

ОТЧЕТ О ПРОДЕЛАННОЙ РАБОТЕ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ ОБОРУДОВАНИЯ ИВЦ НГУ

Тема работы:

Моделирование формирования гетерогенных и гомогенных кластерных ионов и физико-химических процессов, протекающих при их столкновении с поверхностью оптических и полупроводниковых материалов

Состав коллектива:

Коробейщиков Николай Геннадьевич, к.ф.-м.н., в.н.с. ОПФ ФФ НГУ, руководитель коллектива,

Николаев Иван Владимирович, аспирант,

Стишенко Павел Викторович, к.ф.-м.н., с.н.с. ОПФ НГУ,

Горчаков Александр Всеволодович, к.ф.-м.н., н.с. ОПФ ФФ НГУ.

Информация о гранте:

Грант Министерства образования и науки РФ «Новая физика» FSUS-2020-0039, 2020-2023 гг.

Научное содержание работы:

Постановка задачи:

В рамках работы предлагается провести численное моделирование для решения двух взаимосвязанных задач. Во-первых, провести моделирование процесса формирования гетерогенных газофазных кластеров вида $\text{ArN} +$ анион или катион. Нейтральные кластеры аргона с размерами $N=100 - 3000$ атомов/кластер формируются при адиабатическом истечении газа и двигаются с тепловой скоростью 400-500 м/с. Заряженные частицы (анионы или катионы), формируемые из ионной жидкости $[\text{emim}][\text{BF}_4]$, двигаются соосно кластерам с кинетической энергией 0,5–5 кэВ. Моделирование будет проводиться с использованием квантовомеханических методов (теории функционала плотности, DFT). На основе анализа кинетики их столкновения необходимо определить вероятности захвата нейтральными кластерами аргона примесных комплексов и, таким образом, оптимальные условия для формирования смешанных кластерных ионов вида $\text{ArN}[\text{emim}]^+$ или $\text{ArN}[\text{BF}_4]^-$.

Во-вторых, провести МД моделирование столкновения ускоренных кластерных ионов ArN , $N=100 - 3000$ атомов/кластер с поверхностью нелинейных оптических

монокристаллов титанил-фосфата калия KTiOPO_4 (КТР), триборат лития LiB_3O_5 (LBO), бета-борат бария $\beta\text{-BaB}_2\text{O}_4$ (ВВО). Для описания межатомных взаимодействий будут использоваться потенциалы Ziegler-Biersack-Littmark (ZBL), реактивные потенциалы и потенциалы на основе машинного обучения. Первичная параметризация потенциалов будет выполнена на основе ранее опубликованных работ, затем параметры будут уточняться с помощью расчётов малых кластеров методом теории функционала плотности и путём сравнения с результатами натуральных экспериментов.

Современное состояние проблемы

Численному моделированию взаимодействия ускоренных газовых кластеров с твердым телом посвящено большое количество работ. Методом молекулярной динамики исследовались динамика столкновения, формирование кратеров, разлет рассеянных частиц мишени, коэффициенты распыления и т.д. При этом чаще всего в качестве мишени рассматривается монокристаллический кремний, т.к. его характеристики хорошо исследованы и легко моделируются: [L.P. Allen e.a. *J. Appl. Phys.* 92 (2002) 3671; Z. Insepov e.a. *Nucl. Instr. and Meth. B* 202 (2003) 261; T. Aoki e.a. *Vacuum* 84 (2010) 994 и др.]. Известны также работы по моделированию столкновения газовых кластеров с поверхностью кристаллических металлов, которые также легко моделируются: лития [Z. Insepov e.a. *J. Nucl. Mat.* 337 (2005) 912], золота [Z. Postawa e.a. *Surf. Interface Anal.* 43 (2011) 12], ниобия [AT. Wu e.a. *Phys. Rev. STAB* 13 (2010) 093504], никеля [Y.Y.Cheng, e.a. *Nucl. Instr. and Meth. B* 267 (2009) 1428], молибдена [D. Maciazek e.a. *J. Vac. Sci. Technol. B* 34 (2016) 03H114], меди и молибдена [A.V. Nazarov e.a. *Nucl. Instr. and Meth. B* 406 (2017) 518].

Ключевым компонентом моделирования удара ускоренных газовых кластеров методом молекулярной динамики являются корректные потенциалы взаимодействий атомов мишени. В перечисленных выше примерах работ используются потенциалы, по которым накоплены данные о применимости и точности: Stillinger-Weber, Tersoff, EAM [A. Decorte e.a. *Int. J. Mass. Spect.* 377 (2015) 580; O. Restrepo e.a. *J. Phys. Chem. C* 117 (2013) 1189]. Только недавно появились работы по распылению газовыми кластерами поверхностей сложных материалов: неорганические соединения [], полимерные материалы [R. Edwards e.a. *J. Vac. Sci. Tech. B* 36 (2018) 03F118; A. Decorte e.a. *Int. J. Mass. Spect.* 377 (2015) 580], гибридные металл-органические поверхности (наночастицы золота на полиэтилене) [O. Restrepo e.a. *J. Phys. Chem. C* 117 (2013) 1189]. Однако, работ по численному моделированию взаимодействия ускоренных газовых кластеров с

поверхностью нелинейных оптических материалов нами не найдено. В случае с нелинейными оптическими материалами таких потенциалов нет.

Научная новизна, практическая значимость работы

На основе анализа результатов численного моделирования и экспериментальных исследований будет разработана методика бездефектной обработки кластерными ионами нелинейных монокристаллов для получения совершенных поверхностей, т.е. сверхгладких с минимальным поврежденным слоем. Ожидаемые результаты востребованы при производстве приборов и устройств управления лазерным излучением, т.к. позволят улучшить рабочие характеристики выпускаемого оборудования.

Полученные результаты:

С использованием методов квантово-механического моделирования исследована детальная кинетика столкновения нейтральных кластеров аргона размером 309 атомов с катионом VF_4 . Нейтральный кластер аргона двигался с тепловой скоростью, соответствующей гидродинамической скорости газового потока (для истечения аргона – 580 м/с). Энергия налетающего катиона варьировалась от 1000 эВ до 50 эВ. Определены максимальные энергии для формирования гетерогенных кластеров вида $\text{Ar}_N\text{-VF}_4^+$.