# Badanie procesów fizycznych towarzyszących uderzeniu argonowego pocisku klasterowego w powierzchnię Ag(111)

Grzegorz Pałka opiekun prof. dr hab. Zbigniew Postawa

 $14\ {\rm czerwca}\ 2012$ 

Zakład Fizyki Nanostruktur i Nanotechnologii Instytut Fizyki im. Mariana Smoluchowskiego Uniwersytet Jagielloński w Krakowie

# Spis treści

$\mathbf{Sp}$	pis treści	1			
1.	. Wstęp	2			
2.	. Procesy zachodzące podczas zderzenia pocisku z powierzchnią	3			
	2.1. Liniowa kaskada zderzeń	4			
	2.2. Efekty nieliniowe - mechanizm spike'u	6			
	2.3. Efekty nieliniowe - pociski klasterowe				
3.	. Modelowanie komputerowe	8			
	3.1. Metoda dynamiki molekularnej	9			
	3.2. Badany model układu	10			
4.	Analiza i dyskusja wyników symulacji				
	4.1. Analiza uszkodzeń powierzchni	14			
	4.2. Zależność współczynnika rozpylenia od energii pocisku	21			
	4.3. Zależność współczynnika rozpylenia od ilości atomów budujących pocis	sk. 22			
	4.4. Zależność współczynnika rozpylenia na atom od energii kinetycznej na	atom 27			
5.	. Podsumowanie i wnioski	28			
6.	. Literatura	29			

### 1. Wstęp

Istnieją techniki eksperymentalne stosujące bombardowanie pociskami powierzchni materiałów w celu zbadania ich składu, poznania przestrzennego rozmieszczenia poszczególnych składników w badanym materiale, kształtowania jego powierzchni oraz wielu innych [1, 2]. Stosuje się do tego celu pojedyncze atomy oraz wieloatomowe pociski klasterowe zarówno neutralne elektrycznie, jak i zjonizowane. Bombardowaniu poddaje się próbki nieorganiczne i organiczne. Procesy fizyczne zachodzące podczas uderzenia pocisku w powierzchnię odbywają się w układzie o dużej liczbie stopni swobody i wysokiej złożoności. Opis tych zjawisk przy pomocy modeli analitycznych jest bardzo skomplikowany, a w wielu sytuacjach wręcz niemożliwy. Równocześnie metody doświadczalne nie zawsze pozwalają na pomiar wszystkich interesujących wielkości fizycznych charakteryzujących badany układ. Dlatego też zaczęto stosować modelowanie komputerowe do symulacji przebiegu procesu uderzania pocisku w powierzchnię materiału.

W niniejszej pracy dokonano analizy wyników otrzymanych z symulacji, metodą dynamiki molekularnej, uderzeń powierzchni kryształu srebra przez pociski złożone z atomów argonu. Zakres wartości energii kinetycznej pocisku w tych symulacjach jest znacznie szerszy niż uwzględniane do tej pory i obejmuje wartości większe od rozpatrywanych dotychczas w pracach naukowych. Celem tej pracy jest próba odpowiedzi na pytanie, czy zależności efektywności erozji bombardowanego materiału zaobserwowane przy niskich energiach pocisków pozostają prawdziwe dla znacznie wyższych energii.

# 2. Procesy zachodzące podczas zderzenia pocisku z powierzchnią

Uderzenie pocisku w powierzchnię powoduje jej erozję oraz emisję cząstek, które pierwotnie stanowiły jej część. Proces ten nazywany jest *rozpylaniem*. Inicjowany jest on przez depozycję energii kinetycznej pocisku w badanym materiale (tzw. tarczy). Może być ona przekazana do układu jądrowego lub struktury elektronowej tarczy. Przekazanie energii do układu jądrowego zachodzi poprzez elastyczne zderzenia atomów pocisku z atomami tarczy. Rozpędzone w ten sposób atomy tarczy uderzają w kolejne jej atomy powodując dalszy przekaz energii. Uderzające w powierzchnię pociski mogą również tracić energię na nieelastyczne procesy wzbudzenia i jonizacji atomów tarczy. Udział tych procesów w wytracaniu energii przez pocisk silnie zależy od pierwotnej energii kinetycznej pocisku oraz stosunku mas atomu pocisku i atomu tarczy [3, 4, 5].

Zmiany powierzchni i struktury badanego materiału spowodowane uderzeniem weń pocisku zależą od głębokości na jakiej zostanie zdeponowana energia pocisku oraz gęstości zdeponowanej energii. Modyfikacje tarczy spowodowane dostarczeniem dużej ilości energii blisko jej powierzchni sprowadzają się do utworzenia krateru [2, 4, 6]. Wprowadzenie energii do głębszych rejonów materiału tarczy powoduje powstanie defektów struktury (w tym struktury krystalicznej, jeśli bombardowany jest kryształ): mieszania warstw atomowych, wakancji, atomów międzywęzłowych czy konglomeratów atomów [1, 2, 4, 5].

W wyniku uderzenia, z tarczy wyemitowane zostają neutralne oraz naładowane elektrycznie cząsteczki. Stan ładunkowy rozpylonych cząstek w przeważającej części zależy od właściwości bombardowanego materiału [1]. W przypadku metali większość wyemitowanych atomów jest neutralna i znajduje się w swoim stanie podstawowym [1]. Parametry cząstek emitowanych z powierzchni w procesie rozpylania możliwe do eksperymentalnego zmierzenia lub obliczenia przy pomocy modelowania komputerowego to:

- widmo masowe ilość wyemitowanych cząstek w zależności od ich masy (informuje o rodzaju emitowanych cząstek),
- współczynnik rozpylenia ilość wyemitowanych cząstek przypadająca na jeden pocisk (informuje o wydajności emisji),
- rozkład energetyczny ilość wyemitowanych cząstek w zależności od ich energii kinetycznej,
- rozkład kątowy ilość cząstek wyemitowanych w kąt bryłowy w zależności od kierunku względem punktu uderzenia (informuje o symetriach badanej powierzchni).

2988255096(4)

Dane analizowane w tej pracy pochodzą z symulacji, które oparte są na modelu nie uwzględniającym procesów nieelastycznych. Jest to dobre przybliżenie dla małych energii atomów uderzających tarczę [1, 3, 4, 5]. Modele opisujące proces rozpylania z zaniedbaniem efektów nieelastycznych omówiono w dwóch kolejnych podrozdziałach.

#### 2.1. Liniowa kaskada zderzeń

Rozważając pojedynczy atom poruszający się w kierunku nieruchomych atomów tarczy oraz przyjmując, że zderzy się on elastycznie z jednym z nich wiadomo, że nastąpi przekazanie części pierwotnej energii kinetycznej. Po tej stracie atom stanowiący pocisk może mieć jeszcze energię wystarczającą do kolejnych zderzeń z atomami tarczy. Atomy tarczy mogą w tych aktach uzyskać wystarczającą energię kinetyczną, żeby następnie zderzyć się z innym atomem tarczy. W ten sposób w badanym materiale rozwija się kaskada zderzeń. W modelu liniowej kaskady zderzeń zakłada się, że wszystkie zderzenia następują pomiędzy parami atomów, z których jeden przed zderzeniem był nieruchomy, a drugi poruszał się [1, 4].

Istnieje niezerowe prawdopodobieństwo, że rozwój kaskady doprowadzi do zderzenia, po którym atom znajdujący się blisko powierzchni zyska pęd skierowany na zewnątrz tej powierzchni i jeśli jego energia kinetyczna będzie przekraczała powierzchniową energię wiązania, to odłączy się on od materiału. Opisany proces ilustruje rysunek 2.1.



Rysunek 2.1: Ilustracja modelu liniowej kaskady zderzeń

W celu ilościowego określenia wydajności rozpylania definiuje się współczynnik rozpylenia S, który jest równy liczbie cząstek rozpylonych przez pojedynczy pocisk. Przewidywany przez model liniowej kaskady zderzeń współczynnik rozpylenia jest proporcjonalny do  $F_D$  - energii zdeponowanej przez pocisk w rejonie powierzchni uderzonej tarczy w wyniku zderzeń elastycznych z jej atomami, która spełnia następującą zależność [1, 4]:

$$F_D = \left(\frac{dE}{dx}\right)_n \alpha,\tag{2.1}$$

gdzie E - pierwotna energia kinetyczna pocisku, x - droga przebyta przez pocisk w tarczy,  $\alpha$  - bezwymiarowa funkcja stosunku mas atomów pocisku do atomów tarczy, kąta padania i E. Pochodna w równaniu (2.1) jest więc energią traconą przez pocisk w układzie jądrowym uderzonego materiału na jednostkę drogi w nim przebytej. Jej wartość informuje o jądrowej zdolności hamowania pocisku przez materiał tarczy. Współczynnik rozpylenia wyraża się więc następującym równaniem [1, 4]:

$$S = \Lambda F_D, \tag{2.2}$$

gdzie  $\Lambda$  - stała materiałowa (zależy od gęstości atomowej tarczy, powierzchniowej energii wiązania atomów w tarczy U i przekroju czynnego na zderzenie). Liniowy charakter zależności (2.1) (2.2) oraz jest istotą liniowej kaskady zderzeń.

W modelu liniowej kaskady zderzeń rozkład energii kinetycznej  $\epsilon$  rozpylonych atomów spełnia następującą zależność [1, 4, 5]:

$$S(\epsilon)d\epsilon \propto \frac{\epsilon}{(\epsilon+U)^{3-2k}}d\epsilon,$$
 (2.3)

gdzie k - parametr przyjmujący wartości z zakresu 0 < k < 1. Jego wartość zależy od założonych podczas wyprowadzania zależności (2.3): potencjału oddziaływania atomów pocisku z atomami tarczy oraz potencjału oddziaływania między atomami tarczy. Dla k = 0 maksimum rozkładu (2.3) występuje dla  $\epsilon = \frac{U}{2}$ .

Założenie, że podczas procesu rozpylania zderzenia następują jedynie pomiędzy parami atomów, z których jeden przed zderzeniem pozostawał w spoczynku, leżące u podstawy modelu liniowej kaskady zderzeń, jest spełnione jeżeli proces cechuje się małą gęstością energii zdeponowanej przez pocisk w materiale tarczy [1, 4, 5]. Wzrost tej wartości skutkuje zarówno zwiększeniem ilości atomów w jednostce objętości, które zostają wprawione w ruch, jak i wzrostem średniej prędkości tych atomów. Na gęstość zdeponowanej energii wpływ mają następujące czynniki [1, 4, 5, 6]:

- pierwotna energia kinetyczna pocisku,
- ilość atomów w pocisku jej wpływ zostanie przedyskutowany w podrozdziale 2.3,
- gęstość atomowa materiału tarczy im jest ona wyższa, tym większe jest prawdopodobieństwo zderzenia na tej samej drodze przebytej przez atom w tarczy,
- stosunek mas atomu pocisku i atomu tarczy przekaz energii w pojedynczym zderzeniu będzie największy, jeśli stosunek ten będzie równy jedności,
- bezwzględne wartości mas atomów przy tej samej energii kinetycznej cięższe atomy będą miały mniejszą prędkość,

 powierzchniowa energia wiązania atomów w materiale tarczy - im jest ona mniejsza, tym większa jest liczba potencjalnych, które mogą zostać wprawione w ruch oraz tym większa część energii otrzymanej przez atom w zderzeniu unoszona jest w postaci energii kinetycznej.

Wzrost gęstości energii zdeponowanej przez pocisk w materiale tarczy powoduje zwiększenie ilości atomów wprawionych w ruch w jednostce objętości oraz wzrost ich prędkości. Na skutek tego rośnie prawdopodobieństwo, że oba zderzające się atomy będą poruszały się przed zderzeniem. W związku z powyższym mierzalne wielkości fizyczne obliczone przy pomocy modelu liniowej kaskady zderzeń będą poprawnie opisywać układy, w których pocisk jest jednoatomowy lub klasterowy o niewielkiej liczbie atomów i niskiej pierwotnej energii kinetycznej, natomiast energia wiązania atomów w tarczy będzie duża, a stosunek mas atomów pocisku i tarczy będzie daleki od jedności [1, 4, 5].

Próbę opisu układów cechujących się dużą gęstością energii zdeponowanej przez pocisk w materiale tarczy, w których znaczącą rolę zaczynają odgrywać efekty nieliniowe, podejmuje model omówiony w kolejnym podrozdziale.

#### 2.2. Efekty nieliniowe - mechanizm spike'u

Rozpatrując atom padający na powierzchnię, którego energia kinetyczna jest na tyle duża, żeby energia zdeponowana w materiale tarczy przypadająca na jeden jej atom przekroczyła pewną wartość progową, nie można założyć, że przekaz energii jest liniowy [1, 4, 7, 8]. Wraz ze wzrostem udziału w przekazie energii zderzeń par atomów, z których oba poruszały się przed tym aktem, znaczącą rolę zaczynają odgrywać efekty nieliniowe. Przebieg takiego procesu próbuje się opisać przy pomocy mechanizmu spike'u, który ilustruje rysunek 2.2.



Rysunek 2.2: Ilustracja mechanizmu spike'u

Zgodnie z omawianym w tym podrozdziale modelem współczynnik rozpylenia spełnia następującą zależność potęgową [1, 5, 8]:

$$S \propto \left(\frac{dE}{dx}\right)^n,$$
 (2.4)

gdzie (n > 1), w przeciwieństwie do liniowej zależności w modelu liniowej kaskady zderzeń.

Strumień atomów rozpylonych z powierzchni tarczy, o energiach kinetycznych z przedziału ( $\epsilon, \epsilon + d\epsilon$ ) zgodnie z tym modelem opisany jest rozkładem Maxwella-Boltzmana o parametrze  $\Lambda_{\rm spike}$  [1, 4, 7]:

$$\Phi_{\rm spike}(\epsilon)d\epsilon \propto \epsilon \exp\left(-\frac{3\epsilon}{2\Lambda_{\rm spike}}\right)d\epsilon.$$
(2.5)

Wynikający z równania (2.5) rozkład energetyczny współczynnika rozpylenia, jest przesunięty w kierunku niższych energii w porównaniu do analogicznego rozkładu dla modelu liniowej kaskady zderzeń. Oznacza to, że mechanizm spike'u przewiduje niższe energie wyemitowanych z powierzchni tarczy atomów niż model liniowej kaskady zderzeń.

Model mechanizmu spike'u pozwala na obliczenie mierzalnych wielkości fizycznych dla układów nie spełniających podstawowego założenia modelu liniowej kaskady zderzeń.

#### 2.3. Efekty nieliniowe - pociski klasterowe

Kaskady, nawet liniowe, powstające w materiale tarczy po uderzeniu w nią wieloma atomami, jeśli przekrywają się przestrzennie i czasowo, mogą spowodować wystąpienie efektów nieliniowych. Korelacja przestrzenna i czasowa uderzeń jest zapewniona przez użycie pocisków wieloatomowych - klastrów. Efekty kolektywne powodują wzrost współczynnika rozpylenia w porównaniu do wielokrotnych uderzeń pojedynczych atomów. Również rozkład energetyczny wyemitowanych atomów ulega zmianie. Pojawia się dodatkowa składowa niskoenergetyczna. Jest to związane ze wzrostem gęstości energii zdeponowanej przez pocisk w materiale tarczy, a w związku z tym znaczącym udziałem efektów nieliniowych w rozpylaniu, opisywanych przez mechanizm spike'u [2].

Porównanie pojedynczego atomu uderzającego w powierzchnię tarczy, posiadającego taką samą energię kinetyczną, jak klaster złożony z wielu atomów wykazuje zasadnicze różnice. Najważniejszą z nich jest większa gęstość energii zdeponowanej w rejonie powierzchni tarczy dla pocisku klasterowego spowodowana podziałem energii na wiele atomów. Z tego samego powodu pociski wieloatomowe w większym stopniu uszkadzają powierzchnię uderzanej tarczy [2, 6, 9].

Wspomniane procesy składają się na większą efektywność rozpylania wykonanego przy pomocy pocisków klasterowych niż pojedynczych atomów o tej samej pierwotnej energii kinetycznej.

## 3. Modelowanie komputerowe

Modelowanie komputerowe jest metodą wykorzystywaną w fizyce w celu zasymulowania przebiegu procesów fizycznych. Technika ta polega na tworzeniu modeli matematycznych badanych zjawisk w postaci programów komputerowych. Poprawność tych modeli weryfikowana jest poprzez porównanie obliczonych przy ich użyciu wielkości fizycznych z wartościami zmierzonymi podczas rzeczywistych doświadczeń. Pozytywnie zweryfikowany model może służyć między innymi do następujących celów:

- wytłumaczenia przebiegu oraz mechanizmów zjawiska fizycznego, poprzez obliczenie wielkości fizycznych, których zmierzenie podczas eksperymentu jest bardzo trudne, a w wielu sytuacjach wręcz niemożliwe,
- przewidzenia, czy dla układu o niestosowanych wcześniej parametrach rzeczywisty eksperyment ma szansę ujawnić nieobserwowane dotąd zjawiska,
- przewidzenia przybliżonych wyników eksperymentów, których wykonanie nie jest możliwe: ze względu na koszty lub brak technologii,
- weryfikacji teorii analitycznych opisujących zjawiska fizyczne,
- zastąpienia przybliżonych modeli analitycznych, które bez owych przybliżeń są zbyt skomplikowane i złożone,
- badania zjawisk nie poddających się opisowi analitycznemu.

Ograniczenia modelowania komputerowego wynikają ze specyfikacji używanych do tego celu systemów komputerowych. Ograniczona pojemność pamięci operacyjnej nakłada ograniczenie na rozmiar badanego układu. Ograniczona moc obliczeniowa wraz z ograniczonym czasem obliczeń uniemożliwiają symulowanie układów o dowolnej złożoności i rozmiarze - muszą być one dobrane do skali czasowej modelowanego procesu. Ze względu na te ograniczenia przy tworzeniu modeli układów przyjmuje się pewne uproszczenia względem ich rzeczywistych odpowiedników [10, 11]. Przede wszystkim rozmiar układu w symulacji powinien być jak najmniejszy, ale na tyle duży, aby jego wielkość nie wpływała na otrzymane wyniki obliczeń. Jeśli badany układ charakteryzuje się symetriami, na przykład przestrzennymi, wykorzystuje się te własności w celu zmniejszenia ilości obliczeń koniecznych do wykonania. Obliczenia skutków oddziaływania elementów modelu wykonuje się jedynie dla ograniczonego zasięgu, którego wartość wybierana jest w zależności od charakterystyki potencjału oddziaływania. Przykładem implementacji tego pomysłu jest tworzenie listy najbliższych sąsiadów, czyli atomów znajdujących się w obrębie obranego zasięgu potencjału danego atomu [10, 11]. Wyróżnia się następujące metody stosowane w dziedzinie modelowania komputerowego procesów fizycznych:

- deterministyczne układ przemieszczany jest w przestrzeni fazowej w oparciu o rozwiązywanie równań odzwierciedlających jego wewnętrzną dynamikę (np. dynamika molekularna),
- stochastyczne (probabilistyczne) zmiany układu wyznaczane są w oparciu o rachunek prawdopodobieństwa (np. Monte Carlo).

Dane opracowywane na potrzeby tej pracy pochodziły z programu opartego o metodę dynamiki molekularnej, dlatego też została ona dokładniej omówiona w kolejnym podrozdziale

#### 3.1. Metoda dynamiki molekularnej

Metoda dynamiki molekularnej ma na celu obliczenie trajektorii mikroskopowego układu molekuł w przestrzeni fazowej przy zadanych warunkach początkowych oraz założeniu, że każdy z atomów podlega równaniom ruchu mechaniki klasycznej. Przestrzenią fazową mechaniki klasycznej jest przestrzeń położeń i pędów. W wyniku tych obliczeń otrzymuje się więc trajektorie modelowanych atomów w czasie. Spełnienie równań mechaniki klasycznej skutkuje spełnieniem zasady zachowania energii, więc modelowany układ powinien poruszać się w przestrzeni fazowej po powierzchni stałej energii. W celu wymuszenia takiego zachowania się układu, do obliczeń używa się potencjałów zamiast sił. Upraszcza to również obliczenia same w sobie, ponieważ potencjał jest wielkością skalarną, siła natomiast wektorową. Ich dobór ma duży wpływ na zachowanie się modelu podczas symulacji. Potencjały wybrane do opisu oddziaływań w modelu wykorzystanym do symulacji procesu rozpylania na potrzeby tej pracy wymieniono w następnym podrozdziale.

Pewne procesy fizyczne wymagają zachowywania innych wielkości (np. temperatury). Wprowadzane są wtedy pewne modyfikacje do równań, co może skutkować niespełnieniem zasady zachowania energii [11]. Model zaimplementowany w programie stworzonym na potrzeby badania procesu rozpylania, który został wykorzystany do generowania danych analizowanych w tej pracy zawierał takie modyfikacje dla części atomów, co zostało opisane w podrozdziale 3.2.

Ponieważ rozwiązywanie (całkowanie po czasie) klasycznych równań ruchu Newtona dla każdego z atomów wykonywane jest numerycznie, wszystkie wielkości fizyczne (czas, położenie, itd.) oraz operatory różniczkowe w równaniach ruchu Newtona ulegają dyskretyzacji. Obliczenia wykonywane są przy pomocy skończonych metod różnicowych (Finite Difference Methods - FDM)[10, 11]. Dla zadanego dyskretnego kroku czasowego  $\delta t$  na podstawie parametrów stanu układu (położenia w przestrzeni fazowej) w chwili t obliczany jest jego stan w chwili  $t + \delta t$ . Długość kroku czasowego dobierana jest do skali czasowej modelowanego procesu fizycznego i jest kompromisem pomiędzy całkowitym czasem obliczeń a ich dokładnością. Praktycznym kryterium jego wyboru jest warunek, aby fluktuacje energii całkowitej nie przekraczały kilku procent fluktuacji energii potencjalnej układu [11]. Zakres jego stosowalności nie jest jednak ściśle określony, dlatego często długość kroku czasowego należy wyznaczyć obserwując fluktuacje innych obliczanych wielkości fizycznych lub metodą prób i błędów.

Algorytm zastosowany w programie, którego dane wyjściowe zostały poddane analizie w tej pracy, korzystał z metody predictor-corrector. Idea tej metody polega na przewidzeniu, jaką wartość będą miały interesujące wielkości w kolejnym kroku obliczeń na podstawie ich wartości w bieżącym kroku, a następnie korekcji tych przybliżeń w kolejnym kroku. W reprezentacji Nordisecka-Geara przewidywane są wartości położeń oraz ich pochodnych czasowych w chwili  $t + \delta t$  poprzez rozwinięcie ich w szereg Taylora w chwili t. Następnie po wyznaczeniu sił, a z nich przyspieszeń w chwili  $t + \delta t$ , obliczone w poprzednim kroku wartości są korygowane. Współczynniki korygujące zależa od rzędu rozwiązywanego równania różniczkowego. Rzad metody to liczba kolejnych pochodnych, które są obliczane (wliczając w to położenie jako zerową pochodną). Moc obliczeniowa i ilość pamięci operacyjnej wykorzystywane podczas obliczeń z użyciem tej metody silnie zależą od jej rzędu. Wybór rzędu podlega identycznemu kryterium jak wybór długości kroku czasowego. Algorytm zaimplementowany w omawianym programie był rzędu piątego. Przewagą metody predictor-corrector Geara nad innymi metodami jest spełnianie zasad zachowania energii, pędu oraz momentu pędu z większą dokładnością dla małych kroków czasowych[10].

Na dokładność obliczeń i fluktuacje obliczanych wielkości fizycznych wokół rzeczywistych wartości wpływa skończona wartość kroku czasowego, skończona dokładność obliczeń numerycznych wynikająca z zaokrągleń oraz wszystkie przybliżenia zaimplementowane w algorytmie, jak na przykład obliczanie wartości poprzez rozwinięcie ich w szereg Taylora. W skrajnych przypadkach niewłaściwe dobranie parametrów modelu może doprowadzić do zejścia układu z rzeczywistej trajektorii w trakcie symulacji.

#### 3.2. Badany model układu

Parametry modelowanych: pocisku i tarczy wprowadza się do programu poprzez określenie potencjałów oddziaływania oraz zadanie warunków początkowych (położeń, prędkości i mas atomów). Wygenerowany w celu zasymulowania powierzchni kryształu srebra model składał się z 6231203 atomów Ag w układzie FCC [12] z jednoatomową bazą. Wykonany on został w kształcie połowy kuli o promieniu 370 Å z płaską powierzchnią w kształcie koła stanowiącą płaszczyznę o wskaźnikach Millera (111). Na rysunku 3.1 zilustrowany jest widok na tę płaszczyznę.



Rysunek 3.1: Widok na płaszczyznę o wskaźnikach Millera (111) układu FCC. Różnymi kolorami oznaczone są trzy kolejne warstwy gęstego upakowania (A, B i C), których powtarzanie w sekwencji ABCABCABCA... tworzy układ FCC. Źródło: http://cnx.org/content/m16927/latest/ [dostęp 9 czerwca 2012].

Do zasymulowania oddziaływania pomiędzy atomami Ag użyto wielociałowego potencjału CEM (Corrected Effective Medium Potential) [13]. Ponadto zablokowano położenia 345622 zewnętrznych atomów znajdujących się pomiędzy sferami o promieniach 370 Å i 363 Å (tak zwana warstwa rigid), w celu utrzymania kształtu modelu kryształu w trakcie symulacji. Po uderzeniu pocisku klasterowego, w tarczy rozchodzą się fale uderzeniowe. Są to warstwy o kształcie zbliżonym do części sfery z centrum w miejscu uderzenia, w których atomy mają niezerową prędkość skierowaną z dobrym przybliżeniem radialnie. Fale rozchodzą się na zewnątrz od punktu uderzenia. Powstają one, ponieważ prędkości atomów w kierunku prostopadłym do radialnego sumują się do zera lub wartości bliskiej zeru ze względu na symetrię problemu. Prędkości w kierunku radialnym natomiast sumują się do wypadkowej prędkości rozchodzenia się fali uderzeniowej. Wygląd fali uderzeniowych, rozchodzących się w modelu kryształu po uderzeniu pocisku Ar872 o pierwotnej energii kinetycznej 1000 keV zilustrowano w ujęciu przekroju płaszczyzną prostopadłą do powierzchni na rysunku 3.2. Wybrano kilka reprezentatywnych kroków czasowych. Kolor atomu na rysunku 3.2 zależy od jego prędkości: atomy o prędkościach bliskich zeru są niebieskie, natomiast barwa rozciąga się od zielonej, poprzez żółtą do czerwonej wraz ze wzrostem wartości prędkości atomu.



Rysunek 3.2: Przekrój modelu z pociskiem Ar872 o pierwotnej energii kinetycznej 1000 keV w czterech wybranych krokach symulacji. Kolor atomu zależy od jego prędkości: jest niebieski dla prędkości bliskich zeru i zmienia się z jej wzrostem od zielonego, poprzez żółty do czerwonego.

Żeby fale uderzeniowe rozchodzące się w modelu kryształu nie odbijały się od warstwy rigid generując niepożądane efekty w obszarze istotnym dla procesu rozpylania, 1340073 atomów znajdujących się pomiędzy sferami o promieniach 363 Å i 333 Å stanowiło tak zwaną warstwę stochastyczną. Miała ona za zadanie gasić fale do niej przychodzące. Zostało to osiągnięte poprzez dodanie do równania ruchu atomów tej warstwy, siły gaszącej proporcjonalnej do prędkości, czyli tarcia. W efekcie energia tych atomów nie była zachowywana. Do równania ruchu atomów warstwy stochastycznej dodana została również losowa siła wymuszająca, której parametry decydowały o jej temperaturze. Taka realizacja modelu jest równoważna z zanurzeniem układu w termostacie. W obliczeniach, których wyniki analizowane są w tej pracy, parametry odpowiadały temperaturze 0 K. Skuteczność działania warstwy stochastycznej ilustruje rysunek 3.2. Warstwową konstrukcję modelu kryształu zilustrowano na rysunku 3.3, który przedstawia jego przekrój płaszczyzną prostopadłą do powierzchni przechodzącą przez jej środek.



Rysunek 3.3: Ilustracja warstwowej struktury modelu kryształu: od zewnątrz warstwa rigid o grubości 7 Å i warstwa stochastyczna o grubości 30 Å. Rysunek zachowuje skalę.

W celu zamodelowania pocisków argonowych, wygenerowano zbiory koordynat przestrzennych atomów argonu w następujących pociskach: Ar1, Ar30, Ar45, Ar60, Ar101, Ar205, Ar366, Ar872, Ar1000, Ar2000, Ar4001, Ar9000 oraz Ar27327. Ich uderzenia w powierzchnię kryształu były symulowane dla szerokiego zakresu pierwotnej energii kinetycznej: od 115 eV do 2700 keV. Do zasymulowania oddziaływania pomiędzy atomami Ar użyto dwuciałowego potencjału Lennarda-Jonesa 12-6 [12]. Oddziaływanie pomiędzy atomami Ar i Ag było symulowane przy pomocy tego samego potencjału Lennarda-Jonesa, zszytego z potencjałem KrC [14] dla niewielkich odległości. Taka konstrukcja pozwala uzyskać większą dokładność obliczeń dla oddziaływań wysokoenergetycznych [15], gdyż wartość potencjału Lennarda-Jonesa rośnie zbyt szybko dla małych odległości. Wszystkie pociski przed zderzeniem poruszały się w kierunku prostopadłym do powierzchni tarczy i uderzały w jej środek.

Symulacje procesu rozpylania wykonane dla najmniejszych klastrów: Ar30, Ar45, Ar60 oraz Ar101 o pierwotnej energii kinetycznej 1000 keV zostały powtórzone dla mniejszego kroku czasowego niż wszystkie pozostałe. Okazało się bowiem, iż przy tak dużej energii kinetycznej przypadającej na pojedynczy atom pocisku, skale czasowe procesów istotnych dla poprawnego zamodelowania procesu rozpylania są mniejsze. Należało więc zmniejszyć długość kroku czasowego stosując wspomniane w tym rozdziale kryterium traktujące o dopuszczalnych fluktuacjach energii układu.

# 4. Analiza i dyskusja wyników symulacji

Analizie jakościowej i ilościowej poddano dane otrzymane z opartych o dynamikę molekularną symulacji uderzeń pocisków zbudowanych z atomów argonu (Ar) w powierzchnię czystego kryształu srebra (Ag) o wskaźnikach Millera (111). Wykonanie szeregu symulacji z wykorzystaniem pocisków złożonych z identycznych atomów uderzających w identyczną powierzchnię ale mających różne rozmiary i energie kinetyczne, dostarczyło danych umożliwiających zbadanie charakteru zależności współczynnika rozpylenia od tych zmiennych parametrów. W niniejszej pracy skupiono się na zbadaniu efektywności osiąganej przez różne pociski w usuwaniu materii z obiektów, poprzez uderzenie w ich powierzchnię. Współczynnik rozpylenia jest doświadczalnie mierzalną wielkością fizyczną, która mówi o wydajności rozpylania atomów tarczy przez uderzający ją pocisk.

Dla pojedynczych atomów lub małych klastrów współczynnik rozpylenia zależy od miejsca padania. Dzieje się tak ponieważ głębokość, na jakiej zdeponowana zostanie energia i gęstość zdeponowanej energii silnie zależą od toru, po jakim porusza się atom pocisku. Efekt ten jest tym mniejszy, im większe są rozmiary pocisku [2]. Najmniejszy uwzględniany w tym opracowaniu klaster składa się z 30 atomów i jego rozmiar jest wystarczający, żeby zależność współczynnika rozpylenia od miejsca uderzenia pocisku w tarczę była zaniedbywalna. Natomiast dla pojedynczych atomów wartość współczynnika rozpylenia obliczana jest jako średnia z kilku symulacji wykonanych dla różnych miejsc padania pocisku. Odchylenie od tej średniej wykorzystuje się jako niepewność tak wyznaczonej wartości.

#### 4.1. Analiza uszkodzeń powierzchni

W celu zobrazowania wyglądu modelu oraz przebiegu symulacji, wygenerowano ilustracje na podstawie położeń atomów w różnych chwilach czasu obliczonych przez program zastosowany do symulacji. Ilustracje dla czterech wybranych kroków czasowych dla trzech przykładowych klastrów: Ar60, Ar872 oraz Ar9000 o pierwotnej energii kinetycznej 1000 keV zostały zamieszczone na rysunkach odpowiednio 4.1, 4.2 oraz 4.3. Atomy należące do wycinka przestrzeni o pewnym zakresie kąta azymutalnego względem płaszczyzny tarczy zostały pominięte na tych rysunkach, aby lepiej zilustrować sytuację. Kolor atomów zależy od ich współrzędnej w kierunku prostopadłym do powierzchni tarczy.



Rysunek 4.1: Wygląd modelu z pociskiem Ar60 o pierwotnej energii kinetycznej 1000 keV w czterech wybranych krokach symulacji.



Rysunek 4.2: Wygląd modelu z pociskiem Ar872 o pierwotnej energii kinetycznej 1000 keV w czterech wybranych krokach symulacji.



Rysunek 4.3: Wygląd modelu z pociskiem Ar9000 o pierwotnej energii kinetycznej 1000 keV w czterech wybranych krokach symulacji.

Na rysunkach 4.1, 4.2 i 4.3 widoczna jest silna emisja materii ponad powierzchnię tarczy. Zaobserwować można również jak przebiega kształtowanie się krateru. Proces rozpylania rozpoczyna się wprawieniem w ruch atomów tarczy znajdujących się w obszarze o kształcie cylindra [9]. Emisja pojedynczych atomów oraz małych klastrów ma miejsce przez cały czas trwania procesu, a maksimum jej intensywności przypada na jego początkową fazę. Wśród wyemitowanej materii są również duże klastry, niektóre z nich większe niż pocisk, który zainicjował całe zjawisko. Ponadto można stwierdzić, że emisja dużych klastrów odbywa się głównie z "korony" krateru i następuje w późniejszej fazie procesu. Dodatkowo analizując rysunki można dojść do wniosku, że po czasie ok. 60 ps większość emisji już się dokonała, a kształt dna krateru, poza brzegiem, jest ustalony. Wymiary kraterów powstałych po uderzeniu pocisku w powierzchnię tarczy zostały wyznaczone poprzez graficzną analizę przekrojów modelowanego kryształu płaszczyzną prostopadłą do jego powierzchni. Obliczono stosunki interesujących wymiarów krateru do promienia modelu kryształu na ilustracjach wygenerowanych na podstawie położeń atomów obliczonych przez program zastosowany do symulacji. Dzięki znajomości długości promienia kuli (370 Å), korzystając z proporcji obliczono wartości tych wymiarów w jednostkach Å. Opracowane graficznie ilustracje dla klastrów Ar60, Ar101, Ar872 i Ar4001 o pierwotnej energii kinetycznej 1000 keV zamieszczono na rysunkach odpowiednio 4.4, 4.5, 4.6 oraz 4.7. Kolorem czerwonym oznaczono na nich średnią wysokość krawędzi krateru obliczaną jako średnia arytmetyczna z wysokości krawędzi po obu stronach.



Rysunek 4.4: Przekrój krateru powstałego po symulacji uderzenia pocisku Ar60 o pierwotnej energii kinetycznej 1000 keV w powierzchnię kryształu srebra.



Rysunek 4.5: Przekrój krateru powstałego po symulacji uderzenia pocisku Ar101 o pierwotnej energii kinetycznej 1000 keV w powierzchnię kryształu srebra.



Rysunek 4.6: Przekrój krateru powstałego po symulacji uderzenia pocisku Ar872 o pierwotnej energii kinetycznej 1000 keV w powierzchnię kryształu srebra.



Rysunek 4.7: Przekrój krateru powstałego po symulacji uderzenia pocisku Ar4001 o pierwotnej energii kinetycznej 1000 keV w powierzchnię tarczy.

Krater wytworzony przez pocisk Ar60 wyróżnia się wysoką asymetrią oraz jest wyraźnie głębszy od pozostałych. Stało się tak, ponieważ energia kinetyczna przypadająca na atom w tym klastrze jest tak duża, że pozwala na głęboką penetrację materiału tarczy, a więc i depozycję energii w rejonach położonych głębiej pod powierzchnią. Ta powoduje emisję atomów z tych rejonów ponad powierzchnię tarczy.

Wymiary kraterów na pierwszych trzech ilustracjach (4.4, 4.5 i 4.6) wydają się sugerować, że istnieje pewna tendencja. Mianowicie zwiększanie ilości atomów w pocisku o pierwotnej energii kinetycznej 1000 keV uderzającym tarczę, powoduje zmniejszanie głębokości i zwiększanie średnicy generowanego krateru. Natomiast rysunek 4.7 skłania do stwierdzenia, że trend ten nie jest kontynuowany przy dalszym zwiększaniu rozmiarów klastra. O ile pierwszą z zaobserwowanych zależności można tłumaczyć coraz większą powierzchnią oddziaływania pocisku z tarczą, która skutkuje zwiększeniem powierzchni, z której emitowane są atomy (zwiększanie średnicy krateru) oraz coraz mniejszą energią przypadającą na jeden pocisk klastra, która skutkuje zmniejszeniem głębokości depozycji energii (zmniejszanie głębokości krateru). O tyle odwrotny trend nie wydaje się mieć wytłumaczenia na obecny stan wiedzy.

Brzegi kraterów utworzonych w tarczy przez klastry Ar101, Ar872 i Ar4001 są w przybliżeniu równej wysokości. Wysokość jednego z brzegów krateru utworzonego przez pocisk Ar60, spowodowana asymetrią, wyraźnie zawyża obliczoną średnią wysokość.

#### 4.2. Zależność współczynnika rozpylenia od energii pocisku

Na wykresie 4.8 przedstawiono, otrzymane poprzez analizę widm masowych z symulacji, punkty zależności współczynnika rozpylenia od pierwotnej energii kinetycznej pocisku Ar872 padającego na płaszczyznę (111) Ag.



Rysunek 4.8: Zależność współczynnika rozpylenia od pierwotnej energii kinetycznej pocisku Ar872 uderzającego w płaszczyznę (111) Ag. Dopasowane do punktów krzywe: proste (4.1) (kolor czerwony - dopasowana do wszystkich punktów, kolor zielony - dopasowana do pierwszych czterech punktów) oraz wielomian drugiego stopnia (4.2) (kolor niebieski).

W wykonywanych dotychczas analogicznych eksperymentach i symulacjach pierwotna energia kinetyczna pocisku nie przekraczała kilkudziesięciu kiloelektronowoltów. Na podstawie otrzymanych wyników stwierdzono liniową zależność współczynnika rozpylenia od energii pocisku powyżej pewnego progu  $E_0$ , która opisana jest następującym równaniem prostej o współczynniku kierunkowym a [16]:

$$S = a(E - E_0). (4.1)$$

Rzeczywiście dla niewielkiego zakresu energii, do otrzymanych punktów można dopasować linię prostą opisaną równaniem 4.1. Jednak dopasowanie tego typu prostej do punktów ilustrujących zależność w zakresie wyższych energii jest niepoprawne, co ilustruje wykres 4.8. Do punktów dopasowano dla porównania wielomian drugiego stopnia dany następującym równaniem:

$$S = aE^2 + bE + c \tag{4.2}$$

i również zamieszczono na rysunku 4.8. Parametry dopasowanych do punktów krzywych prezentuje Tabela 1. Jak więc widać wnioski otrzymane z publikacji traktujących o rozpylaniu klastrowym w węższym zakresie energii [16] są nie do utrzymania w szerszym zakresie.

Tabela 1: Współczynniki krzywych (4.1) i (4.2) dopasowanych do punktów zależności współczynnika rozpylenia od pierwotnej energii kinetycznej pocisku Ar872 uderzającego w płaszczyznę (111) Ag.

rodzaj krzywej	współczynniki dopasowania				
prosta (czerwona)	a = 49, 61(1, 34)	$E_0 = 54,91(57)$			
prosta (zielona)	a = 22,77(2,41)	$E_0 = 19,83(5,76)$			
wielomian II st.	a = 0,0158(17)	b = 34, 29(1, 65)	c = -1207, 87(252, 26)		

# 4.3. Zależność współczynnika rozpylenia od ilości atomów budujących pocisk

Wcześniejsze obliczenia pokazały, że oprócz pierwotnej energii kinetycznej pocisku klasterowego, parametrem o decydującym wpływie na efektywność rozpylania jest również jego rozmiar. Na wykresie 4.9a przedstawiono, otrzymane poprzez analizę widm masowych z symulacji, punkty zależności współczynnika rozpylenia od ilości atomów budujących pocisk o pierwotnej energii kinetycznej 1000 keV padający na płaszczyznę (111) Ag.

Zależność ta ma wyraźne maksimum. Po sporządzeniu jej wykresu z logarytmiczną skalą osi odciętych (patrz rysunek 4.9b), odczytano położenie maksimum. Występuje ono dla klastrów złożonych z około 100 atomów, co odpowiada energii około 10 keV przypadającej na jeden atom pocisku.

Charakter tej zależności może być wytłumaczony przy pomocy wniosków z modelu MEDF [6] poprzez analizę głębokości na jakiej deponowana jest energia pocisku oraz rozmiarów pocisku. Zgodnie z [9] istnieje krytyczna głębokość zależna od rozmiarów pocisku, sponad której atomy mogą być emitowane. Rozkład energii zdeponowanej przez pocisk w zależności od głębokości rozciąga się w kierunku większych głębokości wraz ze wzrostem pierwotnej energii kinetycznej pocisku. Ta część energii pocisku, która zostanie



(b)

Rysunek 4.9: Zależność współczynnika rozpylenia od ilości atomów budujących pocisk o pierwotnej energii kinetycznej 1000 keV uderzający w płaszczyznę (111) Ag: (a) w skali liniowej i (b) w skali logarytmicznej ilości atomów w pocisku.

zdeponowana poniżej głębokości krytycznej nie zostanie wykorzystana do emisji cząstek z tarczy. W związku z tym współczynnik rozpylenia będzie spadał.

Jest to zgodne z otrzymanymi wynikami, ponieważ przy stałej energii pocisku, zmniejszanie jego rozmiaru powoduje wzrost energii przypadającej na każdy jego atom. Powyżej pewnej wartości energii na atom pocisku, rozkład głębokości, na której deponowana jest jego energia rozciąga się poniżej głębokości krytycznej. Ponadto wraz ze zmniejszaniem rozmiaru pocisku zmniejsza się powierzchnia, na której następuje oddziaływanie z tarczą. Oba te czynniki powodują spadek współczynnika rozpylenia przy zmniejszaniu rozmiarów pocisku poniżej wielkości 100 atomów obserwowany na wykresie 4.9a. Powyżej tej wielkości również następuje spadek współczynnika rozpylania spowodowany zmniejszeniem gęstości energii zdeponowanej w materiale tarczy, a więc zmniejszeniem udziału efektów nieliniowych w procesie rozpylania. Dzieje się tak, ponieważ energia 1000 keV jest dzielona na coraz większą liczbę atomów, a powierzchnia oddziaływania pocisku z tarczą rośnie.

W celu głębszego poznania wpływu efektów nieliniowych na wartości współczynnika rozpylania klastrów o różnych wielkościach uderzających w powierzchnię, wykonano porównanie wyników analizy widm masowych z symulacji wykonanych dla dużego klastra oraz wielokrotnych uderzeń pojedynczych atomów o takiej energii kinetycznej, jaka przypadała na jeden atom w klastrze oraz o położeniach początkowych odpowiadających odpowiednim położeniom w klastrze. Otrzymane współczynniki rozpylenia dla pocisków klasterowych Ar872 dla kilku wybranych energii, oraz odpowiadające im współczynniki rozpylenia pojedynczych atomów zamieszczono w Tabeli 2.

pocisk	E	ilość uderzeń	${\cal S}$ na atom	$S_{\rm klaster}/S_{\rm atom}$
Ar872	1000 keV	1	56,04	
Ar1	$1147 \text{ eV} \approx 1000 \text{ keV}/872$	81	4,76(38)	11,77(97)
		633	4,91(13)	11, 41(54)
Ar872	$750 \ \mathrm{keV}$	1	38,60	
Ar1	$860~{\rm eV}\approx750~{\rm keV}/872$	48	5,36(54)	7,20(85)
Ar872	$500 \ \mathrm{keV}$	1	22,77	
Ar1	$573 \text{ eV} \approx 500 \text{ keV}/872$	80	3,51(25)	6,49(68)
Ar872	250  keV	1	9,82	
Ar1	$287~{\rm eV}\approx 250~{\rm keV}/872$	80	2,05(15)	4,79(60)
Ar872	100  keV	1	2, 12	
Ar1	$115 \text{ eV} \approx 100 \text{ keV}/872$	80	0,75(08)	2,83(54)

Tabela 2: Współczynniki rozpylenia pocisków Ar872 o różnych energiach oraz Ar1 o energiach odpowiadających energiom przypadającym na atom w klastrze Ar872. Fakt, że współczynnik rozpylenia atomu argonu o pierwotnej energii kinetycznej 1147 eV jest mniejszy niż atomu o energii 860 eV świadczy o tym, że poniżej większej z tych wartości występuje maksimum wydajności rozpylania dla jednoatomowego pocisku. Zwiększanie pierwotnej energii kinetycznej powyżej tego maksimum powoduje, że coraz większa jej część deponowana jest poniżej głębokości krytycznej, dlatego nie może ona wpływać na emisję atomów z tarczy. Dlatego też współczynnik rozpylenia maleje. Natomiast dla klastra Ar872 zgodnie z modelem MEDF głębokość krytyczna jest większa, dlatego też wzrost wydajności rozpylania utrzymuje się przy zwiększaniu energii kinetycznej przypadającej na atom pocisku powyżej maksimum dla pojedynczego atomu. Wartość stosunku współczynnika rozpylenia na atom klastra Ar872 do tegoż współczynnika pojedynczego atomu argonu świadczy o skali efektów kolektywnych skutkujących zwiększeniem udziału efektów nieliniowych w procesie rozpylania. Wykres punktów zależności tego stosunku od pierwotnej energii kinetycznej atomu zamieszczono na rysunku 4.10.





Potwierdzenie hipotezy o zwiększeniu udziału efektów nieliniowych w procesie rozpylania można znaleźć dzięki analizie rozkładów energii kinetycznej wyemitowanych atomów. Do obu widm energetycznych dopasowano zależność wyprowadzoną przy pomocy modelu liniowej kaskady zderzeń opisaną równaniem (2.3) o parametrach k = 0 oraz U = 3, 1 eV. Przy energii 1147 eV na atom, do widma energetycznego rozpylonych atomów dla pocisku jednoatomowego, dopasować można zależność, co ilustruje rysunek 4.11a. Natomiast dla klastra Ar872 dopasowanie takie wyraźnie odbiega od danych otrzymanych z symulacji, co demonstruje rysunek 4.11b.



(b)

Rysunek 4.11: Rozkłady energetyczne atomów rozpylonych z powierzchni srebra przez pociski: (a) Ar1 i (b) Ar872 o pierwotnej energii kinetycznej 1000 keV.

# 4.4. Zależność współczynnika rozpylenia na atom od energii kinetycznej na atom

Na podstawie dotychczasowych wyników eksperymentów i symulacji zauważono, że w skali podwójnie logarytmicznej punkty zależności współczynnika rozpylenia przypadającego na jeden atom pocisku od energii kinetycznej przypadającej na jeden atom pocisku, układają się z dobrym przybliżeniem na jednej prostej [16]. Na rysunku 4.12 przedstawiono taki wykres z danymi otrzymanymi poprzez analizę widm masowych z symulacji.





Na wykresie 4.12 zauważyć można odchylenie od zależności liniowej dla małych klastrów, w których energia kinetyczna przypadająca na jeden atom jest największa. Przy tak wysokich energiach procesy jej depozycji w materiale tarczy są silnie nieliniowe. Ponadto, jak zostało to już wspomniane, znaczna część pierwotnej energii kinetycznej pocisku deponowana jest w tarczy poniżej głębokości krytycznej [9], i nie partycypuje w procesie emisji cząstek z materiału. Bezpośrednim tego skutkiem jest spadek współczynnika rozpylenia obserwowany na rysunku 4.12. Krzywa otrzymana na podstawie wyników wcześniejszych badań nie jest uniwersalna w szerokim zakresie energii przypadającej na atom pocisku.

## 5. Podsumowanie i wnioski

Celem niniejszej pracy było porównanie efektywności osiąganej przez pociski złożone z różnej liczby atomów argonu o szerokim zakresie pierwotnej energii kinetycznej w usuwaniu atomów z powierzchni kryształu srebra, poprzez uderzenie w tę powierzchnię. Wykonano je w oparciu o analizę współczynników rozpylenia obliczonych przy pomocy modelowania komputerowego metodą dynamiki molekularnej. Do interpretacji otrzymanych wyników posłużyły również ilustracje wykonane na podstawie położeń atomów w różnych krokach symulacji obliczonych przez wykorzystany program. Program, którego dane wyjściowe zostały wykorzystane w tej pracy modelował jedynie elastyczne procesy przekazu energii.

Zaobserwowany charakter zależności współczynnika rozpylenia od pierwotnej energii kinetycznej dla pocisku klasterowego Ar872 nie jest liniowy w szerokim zakresie energii, co nie zostało wcześniej zbadane. Może to świadczyć o wpływie nieznanych dotąd efektów na proces rozpylania dla wysokich energii, które skutkują wzrostem efektywności wymuszenia emisji atomów z powierzchni kryształu srebra.

Dla pierwotnej energii kinetycznej pocisku klasterowego równej 1000 keV największą wydajność osiągnął klaster Ar101. Najprawdopodobniej dla innych energii kinetycznych klastry o innej wielkości będą najbardziej efektywne. Jest to związane z energią kinetyczną przypadającą na jeden atom oraz powierzchnią oddziaływania pocisku z tarczą, które decydują o gęstości energii zdeponowanej w bombardowanym materiale oraz głębokości, na jakiej zostanie ona zdeponowana.

Wykonując symulacje procesu rozpylania dla wysokich energii przypadających na atom pocisku, można oszacować, w którym miejscu, dla konkretnych atomów tworzących tarczę oraz pocisk, wydajność emisji przypadająca na jeden atom pocisku przestaje rosnąć. Te informacje mogą być bardzo przydatne w zastosowaniach doświadczalnych.

Wykonana analiza pozwoliła zaobserwować, że dla wartości pierwotnej energii kinetycznej pocisków przekraczających wartości rozpatrywane do tej pory, w wynikach symulacji wstępują odstępstwa od zależności obserwowanych dla niższych energii. Wiele wykazanych wniosków jest nie do utrzymania w szerszym zakresie energii. W tym obszarze konieczne są kolejne badania: zarówno doświadczalne, jak i przy pomocy modelowania komputerowego.

#### 6. Literatura

- P. Sigmund, R. Behrisch (Ed.), Sputtering by Particle Bombardment I, Top. Appl. Phys. 47 Springer, Berlin (1981) 9.
- [2] B. J. Garrison, Z. Postawa, Mass Spectrom. Rev. 27 (2008) 289 i referencje tam cytowane.
- [3] J. Lindhard, M. Sharff, *Phys. Rev.* **124** (1961) 128.
- [4] P. Sigmund, Nucl. Instr. Meth. Phys. Res. 27 (1987) 1 i referencje tam cytowane.
- [5] W. Möller, Fundamentals of Ion-Surface Interaction (2004), skrypt do wykładu.
- [6] M. F. Russo Jr, B. J. Garrison, Anal. Chem. 78 (2006) 7206.
- [7] M. Szymoński, A. E. De Vries, *Phys. Lett.* 63 (1977) 359.
- [8] W.M. Thompson, *Phys. Rep.* **69** (1981) 335.
- [9] K. E. Ryan, B. J. Garrison, Anal. Chem. 80 (2008) 6666.
- [10] M. P. Allen, D. J. Tildesley, Computer Simulation of Liquids Clarendon Press, Oxford (1992).
- [11] D. W. Heermann, tł. A Adamczyk, Podstawy Symulacji Komputerowych w Fizyce Wydawnictwo Naukowo-Techniczne, Warszawa (1997).
- [12] C. Kittel, Wstęp do fizyki ciała stałego Wydawnictwo Naukowe PWN, Warszawa (1999).
- [13] C. L. Kelchner, D. M. Halstead, L. S. Perkins, N. M. Wallace, A. E. DePristo, Surf. Sci. 310 (1994) 425.
- [14] W. D. Wilson, L. G. Haggmark, *Phys. Rev. B* 15 (1977) 2458.
- [15] R. A. Aziz, M. J. Salman, Mol. Phys. 58 (1986) 679.
- [16] C. Anders, H. M. Urbassek, R. E. Johnson, Phys. Rev. B 70 (2004) 155404.