### Uniwersytet Jagielloński w Krakowie

Wydział Fizyki, Astronomii i Informatyki Stosowanej

## Paweł Wiśniewski

Nr albumu: 1088853

# Wpływ krzywizny powierzchni nanostruktur na efektywność procesu rozpylania pociskami C60

Praca magisterska

na kierunku Zaawansowane Materiały i Nanotechnologia

Praca wykonana pod kierunkiem: prof. dr hab. Zbigniew Postawa Instytut Fizyki im. Mariana Smoluchowskiego Zakład Fizyki Nanostruktur i Nanotechnologii

#### Oświadczenie autora pracy

Świadom odpowiedzialności prawnej oświadczam, że niniejsza praca dyplomowa została napisana przeze mnie samodzielnie i nie zawiera treści uzyskanych w sposób niezgodny z obowiązującymi przepisami.

Oświadczam również, że przedstawiona praca nie była wcześniej przedmiotem procedur związanych z uzyskaniem tytułu zawodowego w wyższej uczelni.

Kraków, dnia

Podpis autora pracy

#### Oświadczenie kierującego pracą

Potwierdzam, że niniejsza praca została przygotowana pod moim kierunkiem i kwalifikuje się do przedstawienia jej w postępowaniu o nadanie tytułu zawodowego.

Kraków, dnia

Podpis kierującego pracą

Serdecznie dziękuję prof. dr hab. Zbigniewowi Postawie Za poświęcenie czasu, cenne uwagi oraz rady, a przede wszystkim za wykazaną cierpliwość.

Dziękuję również Dawidowi, Grzegorzowi, Michałowi i Mikołajowi, którzy zawsze służyli pomocą oraz uświetniali atmosferę w trakcie prowadzonych badań.

# Spis treści

1	Rozpylanie jonowe		3
	1.1 Przekaz energii		3
	1.2 Efekty liniowe		4
	1.3 Efekty nieliniowe		6
<b>2</b>	Modelowanie komputerowe		8
	2.1 Dynamika molekularna		8
	2.2 Potencjały		9
	2.3 LAMMPS		11
3	Układ badawczy		12
4	Wyniki badań		18
	4.1 Depozycja energii w próbce		18
	4.2 Wpływ rozmiaru próbki na rozpylanie		20
	<ul> <li>4.2 Wpływ rozmiaru próbki na rozpylanie</li></ul>		20 23
5	<ul> <li>4.2 Wpływ rozmiaru próbki na rozpylanie</li></ul>		20 23 <b>26</b>
5 6	<ul> <li>4.2 Wpływ rozmiaru próbki na rozpylanie</li></ul>		<ol> <li>20</li> <li>23</li> <li>26</li> <li>27</li> </ol>
5 6 Sp	<ul> <li>4.2 Wpływ rozmiaru próbki na rozpylanie</li></ul>	· · · · · · · · · ·	<ol> <li>20</li> <li>23</li> <li>26</li> <li>27</li> <li>28</li> </ol>

# Wstęp

Nanotechnologia, będąca szczególną dziedziną chemii oraz fizyki, obejmuje w swoich badaniach obiekty, których znaczący rozmiar nie przekracza 100 nm. Rozmiarem tym, w zależności od typu obiektu, może być np. grubość warstwy nałożonej na jakieś podłoże, średnica nanodrutu czy też promień nanocząstki. Ten zakres wielkości wymusza na badających zastosowanie precyzyjnych, często atomowo rozdzielczych metod badawczych. Jedną z tego typu metod jest spektrometria masowa jonów wtórnych (SIMS – *Secondary Ion Mass Spectrometry*). Metoda ta wykorzystuje proces rozpylania powierzchni jonami celem wykonania analizy chemicznej próbki. Podobnie jak wiele innych technik badawczych, tak i SIMS wykorzystuje obliczenia teoretyczne celem poparcia swoich wyników, bądź analizy zjawisk zachodzących w trakcie rozpylania.

Celem niniejszej pracy jest zbadanie wpływu krzywizny powierzchni na wydolność rozpylania. Pozwoli to między innymi opisać zjawiska zachodzące podczas rozpylania nanostruktur znajdujących się na powierzchni materiałów. Krzywiznę powierzchni wymodelowano poprzez stworzenie nanocząstek w kształcie kuli. Oparto się tutaj na pracy Nietiadi et al. [1], którzy założyli, że rozpylanie nanoukładów na powierzchni, takich jak kropki kwantowe czy też innych nanostruktur powierzchniowych, można przybliżyć poprzez rozpylanie kulistych nanocząsteczek.

Dotychczasowe badania skupiały się na wpływie krzywizny na rozpylanie pociskami monoatomowymi [1, 2]. W tej pracy przeprowadzono analogiczną analizę wpływu krzywizny na rozpylanie klastrami  $C_{60}$ . Pozostałe różnice między pracą Nietiadi et al., a niniejszą polegały na doborze metody oraz podłoża. Nietiadi et al. w swojej pracy skupili się na metodzie Monte Carlo, uzupełniając wyniki o centralne uderzenia przy zastosowaniu dynamiki molekularnej (MD – *Molecular Dynamics*). Ponadto badanymi obiektami były nanocząstki o kształcie kuli zbudowane z atomów krzemu [1]. Metodą wykorzystaną w tej pracy była tylko dynamika molekularna, a nanocząstki były zbudowane z atomów srebra. Wybór materiału podyktowany był dotychczasowym doświadczeniem badawczym grupy w pracy nad rozpylaniem srebra [3,4].

Niniejsza praca składa się z pięciu rozdziałów. Rozdział pierwszy poświęcono opisowi procesów rozpylania. Wprowadzone zostały tam podstawowe pojęcia związane z tym procesem oraz opisano podstawowe modele, tłumaczące zjawiska zachodzące w próbce podczas rozpylania.

W drugim rozdziale przedstawiono opis metody MD wykorzystanej do modelowania badanych układów oraz zaprezentowano potencjały wykorzystane w trakcie badań.

Trzeci rozdział przeznaczono na opis układu badawczego. Pojawiają się tam informacje na temat próbek użytych do rozpylania. Opisano parametry pocisku takie jak np. jego energia.

W czwartym i piątym rozdziale zaprezentowano wyniki badań wraz z ich analizą.

# 1. Rozpylanie jonowe

Rozpylaniem nazywamy proces, podczas którego w skutek bombardowania powierzchni cząstkami, następuje erozja bombardowanego podłoża wraz z emisją atomów bądź cząstek. Bombardująca cząstka, która posiada pewną nadaną energię kinetyczną, nazywana jest pociskiem. Natomiast podłoże określa się mianem tarczy. Do określenia efektywności tego zjawiska stosuje się współczynnik rozpylenia, zdefiniowany jako [5]

$$Y = \frac{N_a}{N_p},\tag{1.1}$$

gdzie:

 $N_a$  – liczba rozpylonych atomów,  $N_p$  – liczba padających pocisków.

W przypadku pojedynczego uderzenia, niezależnie od faktu czy pociskiem był pojedynczy atom, czy zespół atomów (klaster), liczba pocisków N<sub>p</sub> wynosi 1. Często stosowaną wielkością jest tzw. parcjalny współczynnik rozpylenia, który mówi nam o emisji określonego typu cząstek z tarczy.

#### 1.1. Przekaz energii

Jon pocisku traci swoją energię na drodze oddziaływań z atomami tarczy. Mogą być one elastyczne, gdy energie obu cząstek zostają zachowane po zderzeniu, bądź nieelastyczne, gdy część energii jest tracona poprzez oddziaływania atomów ze strukturą elektronową [6].

Dynamika molekularna, z powodu swojej natury, czyli opieraniu się na równaniach ruchu Newtona, nie bierze pod uwagę oddziaływań nieelastycznych. Aby móc korzystać z tej metody w badaniach rozpylenia, należy obliczyć straty energetyczne wynikające z przekazu energii do struktury elektronowej. Jeżeli ta wartość nie będzie znacząca, to znaczy poniżej 10%, to będzie można założyć brak oddziaływań nieelastycznych.

W powyższym celu skorzystano ze wzoru, określającego średnią ilość energii przenoszoną w strukturę elektronową układu, przy założeniach, iż prędkość cząstki jest dużo mniejsza niż prędkość Bohra ( $v \ll v_0 \approx 2187690 m/s$ ). Wielkość tę wyznaczono równaniem [7]

$$\tilde{\eta}(E) = \frac{8}{7} E^{\frac{3}{2}} E_c^{-\frac{1}{2}}, \qquad (1.2)$$

gdzie:

E – energia kinetyczna atomu pocisku (keV),

 $E_c$  – energia kinetyczna atomu posisku (keV) odpowiadająca 4.75 wartości energii zredukowanej Linharda  $\varepsilon$ , która zdefiniowana jest jako [8]

$$\varepsilon = \frac{32.53 \cdot M_2 \cdot E}{Z_1 Z_2 \cdot (M_1 + M_2) \cdot \left(Z_1^{\frac{2}{3}} + Z_2^{\frac{2}{3}}\right)^{\frac{1}{2}}}.$$
(1.3)

gdzie:

 $M_1/M_2$  – masa atomu pocisku/tarczy (g/mol),

 $Z_1/Z_2$  – liczba atomowa pocisku/tarczy.

Wzór 1.3 jest stosowalny tylko w przypadku gdy  $E \ll E_c$ .



Rysunek 1.1: Zależność energii przekazywanej w strukturę elektronową od energii pocisku.

Jak widać na rysunku 1.1, średnia ilość energii przenoszona w strukturę elektronową wynosi poniżej 10% nawet dla wysokiej wartości początkowej energii kinetycznej pocisku monoatomowego. Za wysoką wartość przyjęto energię na atom wynoszącą 0.33 keV, co odpowiada energii klastra  $C_{60}$  równej 20 keV. Należy pamiętać, że stosowany wzór prawidłowy jest dla pocisków monoatomowych, padających na izotropowy materiał podłoża. W trakcie pracy bombardowano powierzchnię klastrami. Zdecydowano się na zastosowany opis ze względu na brak podobnej teorii dla badanego przypadku.

#### 1.2. Efekty liniowe

Do opisu procesu rozpylania stosuje się kilka modeli. Główne różnice między nimi zależą od energii oraz masy pocisku. W przypadku kiedy pociskiem jest niskoenergetyczna i lekka cząstka, uważa się, że dominujący wkład w rozpylanie mają efekty liniowe. Związane są one z przekazem



Rysunek 1.2: Efekty liniowe zachodzące podczas rozpylania.

a) Model *recoil sputtering*. Pocisk po odbiciu się od głębszych warstw podłoża może przekazać pęd atomowi przy powierzchni.

b) Liniowa kaskada zderzeń. Atom pocisku propagując w głąb materiału inicjuje kolejne zderzenia atom ruchomy-nieruchomy. Czarnym kolorem zaznaczono atom pocisku, szare kolory stosowane są do atomów tarczy.

energii przez poruszający się atom innemu, nieruchomemu atomowi. Poniżej zaprezentowano dwa podstawowe modele.

#### **Recoil sputtering**

Model ten jest stosowany dla opisu procesów zachodzących między bardzo lekkimi, niskoenergetycznymi pociskami, takimi jak np. niskoenergetyczne atomy Argonu oraz atomami tarczy. *Recoil sputtering* zakłada iż pocisk penetruje kilka warstw podłoża, aby po odbiciu się od głębiej położonego atomu, zacząć poruszać się z powrotem ku powierzchni. Przed opuszczeniem podłoża atom pocisku może przekazać część energii atomom tarczy znajdujących się na powierzchni i je rozpylić.

Ze względu na niską masę pocisku oraz niewielki przekaz energii między atomami, prawdopodobieństwo rozpylenia tarczy jest niewielkie. Wpływa to na współczynnik rozpylenia, który zwykle jest mniejszy od jedynki [9].

#### Liniowa kaskada zderzeń

Model ten jest stosowany do opisu rozpyleń przez cięższe i bardziej energetyczne pociski niż przy *Recoil sputtering*. Pocisk taki może wywołać w tarczy zjawisko określane mianem liniowej

kaskady zderzeń. Efekt ten polega na przekazaniu pędu atomom nieruchomym przez inne atomy podczas kolejnych zderzeń.

Przypomina to sytuację na typowym stole bilardowym. Gdy gracz uderzy kijem białą bilę, ta odbijając się od kolejnych bil przekazuje im pęd. Jeżeli bile będą przekazywać pęd tylko na drodze zderzeń ruchomy-nieruchomy, cały proces będzie wtedy identyczny jak dla modelu liniowej kaskady zderzeń.

W modelu tym istnieje pewne prawdopodobieństwo, że część atomów próbki otrzyma energię pozwalającą na wyrwanie z powierzchni i ostateczne rozpylenie. Ponadto liczba atomów biorących udział w zderzeniu jest liniowo zależna od energii deponowanej w powierzchnię. Prowadzi to do analitycznie wyznaczonego współczynnika rozpylenia [9,10]

$$Y = \Lambda F_D, \tag{1.4}$$

gdzie  $\Lambda$  jest liniowym współczynnikiem zależnym od właściwości materiału, natomiast F<sub>D</sub> określa ilość zdeponowanej energii na jednostkę głębokości

$$F_D = \left(\frac{dE}{dx}\right) \alpha_D \left(\frac{M_1}{M_2}, \Theta, E\right), \qquad (1.5)$$

gdzie:

 $\frac{dE}{dx}$  – jądrowa zdolność hamowania,

 $\alpha_D$ – funkcja zależna od stosunku mas pocisku i atomów powierzchni, kąta padania i energii pocisku.

#### 1.3. Efekty nieliniowe

Efekty nieliniowe zaczynają grać dużą rolę wraz ze wzrostem wartości energii kinetycznej pocisku. W momencie gdy przekaz energii przekracza energię wiązania atomów w próbce, zderzenia w układzie przestają zachodzić tylko pomiędzy atomami poruszającymi się i nieruchomymi [9].

Dla układów, w których obserwuje się efekty nieliniowe, współczynnik rozpylenia zaczyna wykładniczo zależeć od jądrowej zdolności hamowania [11]

$$Y \sim \left(\frac{dE}{dx}\right)^k,\tag{1.6}$$

gdzie k > 1.

Zaproponowanymi modelami opisującymi efekty nieliniowe w trakcie rozpylania powierzchni pociskami monoatomowymi są model termicznego spike'u oraz fali uderzeniowej. Pierwszy z nich zakłada podnoszenie się temperatury układu przy powierzchni, doprowadzając do termicznej emisji materiału [13]. Drugi zakłada powstanie na pewnej głębokości materiału fali uderzeniowej, wytworzonej przez oddziaływania pocisku z tarczą. Fala ta, niesiona przez materię układu, załamuje się przy powierzchni doprowadzając do wyrzutu atomów z materiału [11].



Rysunek 1.3: Efekty nieliniowe zachodzące podczas rozpylania.

a) Model termicznego spike'u. Pocisk penetrując podłoże powoduje powstanie wysokiej temperatury, która zaburza strukturę i doprowadza do emisji atomów przy powierzchni.
b) Model fali uderzeniowej. Czerwonym kolorem zaznaczono maksimum fali, powstałej w wyniku oddziaływania pocisku z tarczą. Fala załamując się przy powierzchni powoduje emisję atomów. Czarnym kolorem zaznaczono atom pocisku, szare kolory stosowane są do atomów tarczy.

Wszystkie powyższe modele opisujące zarówno efekty liniowe i nieliniowe stosowane są dla oddziaływań pocisków monoatomowych z powierzchnią. W przypadku klastrów można próbować opisywać rozpylanie poprzez rozpatrywanie zderzenia przez każdy atom pocisku niezależnie [12]. Dla dużych pocisków klastrowych, próby zastosowania powyższego modelu załamują się, gdyż nie uwzględniają oddziaływań wieloatomowych. W takim przypadku, celem opisu układu można wykorzystać metody Monte Carlo lub zastosować dynamikę molekularną.

# 2. Modelowanie komputerowe

Fizyka posiada szereg narzędzi, pozwalających opisać analitycznie proste układy, takie jak np. gaz doskonały i otrzymać informacje o ich stanie mikro i makroskopowym. Zakładając pewne przybliżenia bądź podchodząc w sposób statystyczny, możemy uzyskać podobny opis dla trochę bardziej skomplikowanych układów (np. gaz z oddziaływaniami). Wiele cieczy oraz ciał stałych jest zbyt skomplikowana dla metod analitycznych czy statystycznych. W tym celu chcąc uzyskać informacje na temat ich stanu, należy skorzystać z pewnych zaproponowanych modeli fizycznych.

Poprawność zaproponowanego modelu bada się poprzez porównanie uzyskanych wyników z danymi eksperymentalnymi. Po pozytywnej weryfikacji, stosowany model pozwala na [14]:

- uzyskanie opisu mikroskopowego badanego układu i otrzymanie informacji na temat jego stanu makroskopowego,
- weryfikacje teorii analitycznych bądź danych eksperymentalnych,
- przeprowadzenie badań w warunkach, których uzyskanie w eksperymencie jest niemożliwe bądź nieekonomiczne,
- podejrzenie zjawisk zachodzących na obszarach czasowych bądź wielkościowych niedostępnych dla eksperymentatora.

Z powodu stopnia skomplikowania równań w tego typu modelach oraz szybkiego rozwoju technologii, coraz częściej wykorzystuje się komputery do obliczeń.

#### 2.1. Dynamika molekularna

Dynamika molekularna jest metodą pozwalająca rozwiązywać równania ruchu N atomów układu, które znajdują się w polu siłowym opisanym potencjałem V. Wykorzystuje ona w tym celu klasyczne równanie ruchu Newtona

$$m_i \frac{d^2 \vec{r_i}}{dt^2} = -\nabla_{\vec{r_i}} V, \qquad (2.1)$$

gdzie:

 $m_i$  – masa i-tego atomu,

 $\vec{r_i}$  – położenie i-tego atomu.

Po rozwiązaniu powyższego równania ruchu otrzymuje się trajektorię atomu [14]. Powyższe równanie opisuje tylko efekty klasyczne, pomijając kwantowe zjawiska, co zaznaczono w rozdziale 1.1. Atomy traktowane są jako neutralne cząstki, a zderzenia pomiędzy nimi są elastyczne. Sposób rozwiązania powyższego równania opisano w dalszej części pracy, przy okazji opisu pakietu obliczeniowego wykorzystanego w niniejszej pracy.

#### 2.2. Potencjały

Równianie 2.1 pozwala obliczyć trajektorię cząstki. Wymaga ono informacji na temat potencjału w punkcie położenia interesującego nas obiektu. Wartość oraz kierunek działania siły wytworzonej przez zmiany potencjału można uzyskać na dwa sposoby. Pierwszym z nich jest rozwiązanie metodami chemii kwantowej równania Schrödingera badanego układu. Pomimo wysokiej dokładności metody, jej złożoność obliczeniowa nie pozwala stosować jej dla opisanego w niniejszej pracy układu. Stąd też, dla dużej ilości atomów, stosuje się drugie podejście, gdzie potencjał przybliżany jest stabularyzowanymi wartościami uzyskanymi poprzez dopasowanie wyników do danych eksperymentalnych bądź obliczeniowych, uzyskanych dzięki metodom chemii kwantowej [15].

Powyżej wspomniane potencjały dzielą się na dwuciałowe oraz wielociałowe. Potencjałem dwuciałowym nazywamy oddziaływanie między atomami, które zależy tylko i wyłącznie od odległości między nimi. Do opisu wielu układów rzeczywistych, w których siły działające na dany atom zależą też od innych parametrów, takich jak np. otoczenie chemiczne atomów, powinno się stosować potencjały wielociałowe [15].

W niniejszej pracy wykorzystano poniżej opisane potencjały dwu i wielociałowe.

#### Potencjał AIREBO

Potencjał AIREBO (*Adaptive Intermolecular REBO Potential*) jest wielociałowym potencjałem. Energię oddziaływań między atomami i/j, w układzie opisywanym potencjałem AIREBO można przedstawić jako sumę [16]

$$E = \frac{1}{2} \sum_{i} \sum_{j \neq i} \left[ E_{ij}^{REBO} + E_{ij}^{LJ} + \sum_{k \neq i,j} \sum_{l \neq i,j,k} E_{kijl}^{tors} \right],$$
(2.2)

gdzie:

 $E_{ij}^{REBO}$  – energia oddziaływań REBO (*Reactive Empirical Bond Order Potential*) opisuje oddziaływania wewnątrzcząsteczkowe [17]

$$E_{ij}^{REBO} = V_{ij}^R + b_{ij}V_{ij}^A, (2.3)$$

gdzie:

 $b_{ij}$  – parametr związany z rzędem wiązania chemicznego między atomami i/j. Opisuje zmiany sił między atomami w zależności od otoczenia chemicznego.

 $\mathbf{V}_{ij}^{R}/\mathbf{V}_{ij}^{A}$  – dwuciałowy potencjał odpychający/przyciągający, którego postać zależy od typu atomu i/j (wodór lub węgiel).

 $E_{ij}^{LJ}$  – energia oddziaływań opisywana potencjałem Lennarda-Jonesa (LJ) opisany równaniem

$$E_{ij}^{LJ} = 4\epsilon_{ij} \left[ \left( \frac{\sigma_{ij}}{r_{ij}} \right)^{12} - \left( \frac{\sigma_{ij}}{r_{ij}} \right)^6 \right].$$
(2.4)

Ze względu na swój charakter, potencjał LJ jest silnie odpychający dla niewielkich odległości. Aby wyeliminować ten problem stosuje się pewne kryteria oparte na:

- odległościach między parami atomów,
- siłach pozostałych oddziaływań między nimi,
- siłami wiązań atomowych.

 $\mathbf{E}_{kijl}^{tors}$  – energia oddziaływań zależna od ułożenia kolejnych cząsteczek (kąty torsyjne etc.).

Potencjał ten stosuje się do opisu oddziaływań między atomami i cząsteczkami, zbudowanymi z atomów wodoru lub węgla. W stosunku do REBO, który brał pod uwagę tylko oddziaływania wewnątrzcząsteczkowe, AIREBO uwzględnia też oddziaływania międzycząsteczkowe.

#### Potencjał EAM dla stopów

EAM (*embedded-atom method*) jest wielociałowym potencjałem półempirycznym. Opisuje on oddziaływania w stopach metali. Zakłada on istnienie funkcji, która zwraca potencjał działający na atom, który oddziałuje z chmurą elektronową określoną gęstością  $\rho$ , pochodzącą od jego sąsiadów. Potencjał ten wykorzystuje celem obliczenia oddziaływań pomiędzy atomami metalicznymi. Energia potencjalna atomu *i*, oddziałującego z sąsiadującymi atomami *J* dana jest wzorem [18]

$$V_{i}^{EAM} = \frac{1}{2} \sum_{j \neq i}^{J} \phi(r_{ij}) + F_{emb} \left( \sum_{j \neq i}^{J} \rho(r_{ij}) \right), \qquad (2.5)$$

gdzie:

 $\phi(r_{ij})$  – dwuciałowy potencjał oddziaływań między atomami *i* i *j*,

 $\rho(r_{ij})$  – wkład do gęstości elektronowej na atomie *i* wywołany przez atom *j*,

 $F_{emb}$  – funkcja osadzająca (*embeded function*). Przekształca wkład do gęstości elektronowej na atomie *i* od wszystkich sąsiadów *J* na energię potencjalną tego atomu.

Wartości poszczególnych funkcji  $\phi$ ,  $\rho$  oraz  $\mathbf{F}_{emb}$  podaje się w formie stabularyzowanej.

#### Potencjał ZBL

Potencjał ZBL (potencjał Zieglera-Biersacka-Littmarka) wykorzystuje się podczas modelowania wysokoenergetycznych zderzeń atomowych. Dzięki sparametryzowaniu go metodami chemii kwantowej otrzymano potencjał, który lepiej oddaje oddziaływania odpychające niż potencjał Lennarda-Jonesa. Wartość energii z jaką atom j działa na atom i opisuje się [19]

$$E_{ij}^{ZBL} = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \cdot \frac{Z_i Z_j e^2}{r_{ij}} \cdot \varphi\left(\frac{Z_i^{0.23} + Z_j^{0.23}}{0.46850}r_{ij}\right) + S(r_{ij}),$$
(2.6)

gdzie:

 $Z_i/Z_j$  – liczba atomowa atomu i/j,  $\epsilon_0$  – przenikalność elektryczna próżni,  $\epsilon_0 = 8.854187817...\cdot 10^{-12} \frac{F}{m}$ , e – elementarny ładunek elektryczny,  $e = 1.6021766208(98) \cdot 10^{-19}C$ ,  $S(R_{ij})$  – funkcja wygładzająca potencjał na granicy odcięcia,  $\varphi(x)$  – sparametryzowana funkcja wyrażona wzorem

 $\varphi(x) = 0.18175 \cdot e^{-3.19980x} + 0.50986 \cdot e^{-0.94229x} + 0.28022 \cdot e^{-0.40290x} + 0.02817 \cdot e^{-0.20162x}.$  (2.7)

#### 2.3. LAMMPS

Wykorzystany w badaniach pakiet LAMMPS (*Large-scale Atomic/Molecular Massively Pa-rallel Simulator*) udostępnia szereg narzędzi pozwalających wykonywać obliczenia MD. Pakiet udostępniony jest przez Steve'a Plimptona et al. z Sandia National Laboratiores [20]. Program po dostosowaniu do obliczeń wysokoenergetycznych, został wybrany ze względu na swoją prostotę, skalowalność oraz szybkość.

Program przybliża numerycznie rozwiązanie równania 2.1, wykorzystując w tym celu algorytm Verleta [21]. Wykonuje to poprzez zastosowanie odpowiedniego algorytmu całkującego, dzielącego czas na małe odcinki  $\delta$ t. Krok ten jest wybierany przez użytkownika. Musi być on na tyle mały, aby uniknąć zjawisk niefizycznych oraz na tyle duży, żeby obliczenia skończyły się w rozsądnym czasie [14]. W trakcie badań wykorzystano zmienny krok czasowy, uzależniony od wielkości przemieszczeń atomów. Maksymalna wartość na jaką atomy mogły przesunąć się w trakcie jednego kroku czasowego wynosiła 0.05 Å.

# 3. Układ badawczy

Celem badań, który zaznaczono na samym wstępie, było zbadanie wpływu krzywizny powierzchni na rozpylanie jej pociskami klastrowymi  $C_{60}$ . W tym celu przygotowano serię układów, w którym zbudowana z atomów srebra tarcza miała przypominać nanocząstkę. Jak już zaznaczono, skorzystano z założenia w pracy Nietiadi et al. [1], którzy stwierdzili, że rozpylanie nanocząstek można przybliżyć poprzez rozpylanie kulistych próbek.

Na poniżej opisane układy badawcze składały się:

- pocisk klastrowy  $C_{60}$ ,
- nanocząstki o kształcie kuli zbudowane z atomów srebra i wycięte z kryształu, który eksponował powierzchnię (111),
- powierzchnia srebra (111).

Wybór materiałów tworzących układy podyktowany był po pierwsze celem pracy (pocisk klastrowy) oraz dotychczasowym doświadczeniem grupy w badaniu rozpylania srebra [3,4].

#### Próbki



Rysunek 3.1: Układu użyty do badania rozpylania nanocząstek. Po lewej nanocząstka o kształcie kuli o promieniu R = 3 nm, po prawej R = 10 nm. Pocisk fulerenu C<sub>60</sub> umieszczono 2 nm nad szczytem nanocząstki wzdłuż osi z. Promień pocisku wynosi ok 0.7 nm.



Rysunek 3.2: Układu użyty do badania rozpylania powierzchni srebra. Czarnym kolorem zaznaczono atomy pocisku, srebrnym atomy próbki, niebieskim atomy wiskotyczne, a czerwonym atomy nieruchome. Pocisk zawieszony został 2 nm nad powierzchnią.

Podłoże oraz nanocząstki zbudowane były z atomów srebra, wyciętych z kryształu, który eksponował powierzchnię o orientacji (111). Nanocząstki były kulami o promieniu  $R \in \{3, ..., 10\}$  nm, jak przedstawiono na rysunku (3.1), dla których modelowano pełen szereg kątów padania, opisanych w rozdziale o punktach padania pocisku. Ponadto wymodelowano centralne rozpylanie dla nanocząstek o rozmiarze 1.5, 2, 2.5 i 15 nm. Liczba atomów w takiej próbce wynosiła, w zależności od jej rozmiaru, od 6 603 dla R = 3 nm, aż do 244 961 w przypadku R = 10 nm.

Powierzchnia płaska została wymodelowana poprzez półkulę o R = 12 nm (rysunek (3.2)). Celem symulacji nieskończonego kryształu posłużono się pewnymi specyficznymi warunkami brzegowymi. Próbka została podzielona na 3 obszary. Najbardziej zewnętrzna warstwa o grubości d = 6 Å była stworzona z atomów nieruchomych, których zadaniem było zachowanie kształtu próbki. Pośrednia warstwa, tak zwana warstwa wiskotyczna, a jej grubość wynosiła d = 19 Å . Miała ona za zadanie wygaszenie energii fali uderzeniowej, która odbiłaby się od warstwy nieruchomej, a która w prawdziwym krysztale rozchodzi się po całej próbce. Efekt ten uzyskano poprzez wprowadzenie dodatkowego niewielkiego współczynnika lepkości w fragmencie układu. Obie warstwy otaczały wewnętrzną półkulę o promieniu R = 9.5 nm. Półkula ta była właściwą próbką powierzchni, dla której liczba atomów wynosiła 107 072.

W trakcie eksperymentu zachowywano stałą liczbę cząstek, starano zachować się stałą energię oraz stałą objętość układu.

#### Pocisk

Pocisk klastrowy, którym była cząsteczka fulerenu  $C_{60}$  o energii 20 keV, został wykorzystany w badaniach z kilku powodów. Po pierwsze, celem poniższych badań było porównanie rozpylania nanocząstek pociskami klastrowymi z wynikami osiągniętymi przy wykorzystaniu pocisków monoatomowych. Po drugie, bombardowanie powierzchni fulerenami o podanej energii jest szeroko stosowane w eksperymentach SIMS.

#### Punkty padania pocisków



Rysunek 3.3: Punkty padań pocisku na nanocząstkę. Po lewej modelowanie kątą rozpylania (kąt polarny) poprzez przesuwanie fulerenu w płaszczyźnie xy. Po prawej ukazano czerwony wycinek okręgu o  $\Theta = 60^{\circ}$  dla wybranego kąta padania pocisku  $\alpha$ . Pocisk przemieszczano wzdłuż wycinka okręgu co 2.5°, dzięki czemu uzyskano po 24 uderzenia dla danego kąta padania  $\alpha$ .

Pocisk umieszczono na wysokości 2 nm nad najwyższym punktem próbki. W przypadku bombardowania nanocząstek celem zbadania zależności kątowej, pocisk był odpowiednio przesuwany w płaszczyźnie xy tak, aby jego wektor prędkości tworzył zadany kąt z normalną do powierzchni. Celem uzyskania dużej liczby różnych punktów padania dla danego kąta, wyznaczono serię uderzeń wzdłuż wycinka okręgu o  $\Theta = 60^{\circ}$ . Przemieszczając pocisk wzdłuż wycinka co 2.5° pozwoliło uzyskać po 24 uderzenia dla danego kąta padania  $\alpha$  (rysunek 3.3). W przypadku uderzeń od góry jak i w powierzchnię płaską, wybrano 24 punkty znajdujących się wewnątrz komórki elementarnej powierzchni (111). Kąty padania dla wszystkich próbek należały do zbioru  $\alpha \in \{0^{\circ}, 15^{\circ}, 30^{\circ}, 45^{\circ}, 60^{\circ}, 75^{\circ}\}^{\circ}$ . Liczba uderzeń przypadająca na dany kąt padania ze względów statystycznych jest taka sama dla powierzchni jak i nanoczątki.

Celem uniezależnienia analizy danych od rozmiaru próbek oraz zachowania spójności z badaniami przeprowadzonymi dla pocisków monoatomowych [1, 2], wyprowadzono poniżej opisane przekształcenia. Punkt padania pocisku na próbkę x przedstawiono jako zależność dwóch parametrów zaprezentowanych na rysunku 3.4

$$x = \frac{b}{R}.$$
 (3.1)

Taka prezentacja pozwoli na porównanie wyników między próbkami różnych rozmiarów, uniezależniając punkt padania od



Rysunek 3.4: Punkt padania pocisku b na nanocząstkę o promieniu R.

promienia tejże próbki. Ponadto w dalszym ciągu zostaje zachowana informacja o kącie padania pocisku, który można wyznaczyć poprzez zależność

$$\alpha = \arcsin(\frac{b}{R}). \tag{3.2}$$

W przypadku, w którym liczono współczynnik rozpylenia dla innego punktu padania niż x = 0 lub tzw. średni współczynnik rozpylenia po całej próbce (< Y >), był on normalizowany uwzględniając prawdopodobieństwo padania na dany punkt próbki jako

$$Y_{norm} = Y_{sim} \cdot \cos(\theta), \tag{3.3}$$

gdzie:

 $\mathbf{Y}_{sim}$ – wartość współczynnika rozpylenia uzyskana w wyniku obliczeń.

#### Czas symulacji

Czas symulacji dla nanocząstek został dobrany wizualnie. Przeprowadzono symulację uderzenia centralnie największej nanocząstki o R = 10nm i zebrano klatki symulacji dla czasów od 5 do 30 ps, co 5 ps (3.6). Po analizie wizualnej stwierdzono, że po 30 ps nie obserwuje się już fragmentacji próbki pod wpływem pocisku. Ponadto taki czas pozwala na jednoznaczne oddzielenie próbki od rozpylonych klastrów oraz samych klastrów od siebie.

Celem wyznaczenia czasu długości symulacji rozpylenia powierzchni płaskiej posłużono się zależnością współczynnika rozpylenia próbki od czasu trwania symulacji, zaprezentowanego na rysunku (3.5). Wybrano czas, dla którego zaobserwowano wysycenie się współczynnika rozpylenia i wyniósł on 25 ps.



Rysunek 3.5: Wykres zależności rozpylenia próbki płaskiej od czasu symulacji. Zaprezentowano krzywe dla trzech kątów padania pocisku na powierzchnię próbki.



Rysunek 3.6: Ewolucja rozpylanego układu w czasie. Próbkowana była nanocząstka o ${\rm R}=10$  nm.

# 4. Wyniki badań



### 4.1. Depozycja energii w próbce



W pierwszym kroku zbadano depozycję energii przez pocisk w próbce płaskiej. Przede wszystkim wyznaczono głębokość deponowanej energii. W tym celu wykonano następujące kroki:

- 1. Wyznaczono krok czasowy, dla którego pociski atomu traciły 90 % energii traconej w trakcie procesu rozpylania. Ilość energii przekazanej próbce po tym czasie wynosiła ~ 15 keV.
- 2. Dla tego kroku czasowego wyznaczono atomy, których wzrost energii całkowitej był wyższy niż energia wiązania między atomami srebra [22].
- 3. Metodą graficzną z wykorzystaniem programu VMD wyznaczono granice depozycji energii przez pocisk w próbce.

Głębokość depozycji energii wyznaczono na

a = 3.33nm.

W dalszych etapach pracy odnoszono się do otrzymanej wartości porównując ją z rozmiarem badanych próbek. Pozwoliło to na analizę wpływu głębokości depozycji energii na proces rozpylania cząstek. Ponadto podobnie jak w przypadku prezentacji punktów padania, tak i tutaj starano się zachować konsystencję z wynikami prezentowanymi dla pocisków monoatomowych.



Rysunek 4.2: Rozmieszczenie atomów pocisku w próbce po uderzeniu w powierzchnię płaską. Srebrnym kolorem zaznaczono atomy tarczy, czerwonym atomy pocisku. Czerwoną elipsą zaznaczono obszar, w którym stwierdzono zdeponowanie energii po uderzeniu przez pocisk.

W następnym kroku skupiono się na analizie rozmieszczenia deponowanej energii w próbce. Przez wzgląd na rozmieszczenie energii można zdefiniować dwa obszary. Pierwszym z nich jest opisany powyżej, wyraźnie odcięty od otoczenia obszar, w którym znajduje się największe zagęszczenie deponowanej energii. Należy zwrócić uwagę na izotropię rozmieszczenia energii względem punktu padania pocisku. W drugim obserwuje się wyraźne, lokalne zagęszczenia zdeponowanej energii. Przyglądając się obszarowi zaznaczonemu na rysunku 4.2, w którym wedle rysunku 4.1 zaobserwowano lokalne zagęszczenie energii, nie stwierdza się tam żadnego atomu pocisku. Najprawdopodobniej takie zagęszczenie jest spowodowane wtórnym przekazem energii przez atomy próbki.

#### 4.2. Wpływ rozmiaru próbki na rozpylanie



Rysunek 4.3: Wykres zależności współczynnika rozpylenia przy uderzeniu centralnym od rozmiaru próbki. Wartość współczynnika została znormalizowana względem powierzchni płaskiej. Maksimum rozpylania osiągane jest dla próbek o $a/R \approx 1.3$ .

Jeżeli założyć stałą głębokość depozycji energii w próbce, można spróbować zgadywać wzrost współczynnika rozpylenia wraz z malejącymi rozmiarami tejże próbki. Po analizie danych z wykresu na rysunku 4.3 częściowo potwierdzono powyższe założenie. Częściowo, gdyż zaobserwowano spadek współczynnika po osiągnięciu wyraźnego maksimum. Dane te dotyczą rozpylenia centralnego.

Aby lepiej zrozumieć to zjawisko można wspomóc się wykresem zależności efektywności rozpylania od rozmiaru próbki, który przedstawiono na rysunku 4.4. Efektywność rozpylania została zdefiniowana jako stosunek współczynnika rozpylenia do liczby atomów w próbce.

Dla próbek, które są rozmiaru pozwalającego na osiągnięcie najwyższych wartości rozpylenia, obserwuje się zwiększoną efektywność rozpylania. Pomimo iż wraz z malejącymi rozmiarami efektywność rośnie, współczynnik rozpylenia maleje, ponieważ zaczyna brakować atomów do rozpylenia.

Z analizy wykresów można wywnioskować, że maksimum rozpylania osiąga się dla próbek, których stosunek rozmiar wynosi  $a/R \approx 1.3$ . Efektywność rozpylania takiej cząstki wy-



Rysunek 4.4: Wykres zależności efektywności rozpylania próbek od rozmiaru próbki. Zależność przedstawia stosunek ilości atomów rozpylonych do ilości atomów w próbce, w zależności od rozmiaru próbki.

nosi ~ 80%. Liczba atomów w próbce wynosi ~ 3800, a przy założeniu przekazu tej samej ilości energii przez pocisk co w próbce płaskiej, średnio na jeden atom zostało przekazane ~ 3.95eV.

Wpływ na efektywność rozpylania ma depozycja energii w próbce przez pocisk. Analizując rysunek 4.5, widać że próbki, których rozmiar jest porównywalny bądź mniejszy niż głębokość deponowanej energii w powierzchni płaskiej, są rozrywane przez pocisk. Mechanika rozpylania w większych próbkach, przy rozpylaniu centralnym, jest podobna jak dla powierzchni płaskiej.

Depozycja energii w sposób zaobserwowany i opisany w pierwszym paragrafie tego rozdziału ma duży wpływ na dwa istotne czynniki. Pierwszym z nich jest wspomniana powyżej wartość rozmiaru próbki dla której następuje maksimum rozpylenia. Zaobserwowanie przesunięcie a/R w kierunku mniejszych wartości w stosunku do pocisku monoatomowego z  $a/R \approx 2.0$  [1].

Drugim czynnikiem jest izotropia rozpylania, którą tutaj rozumiano jako zwrot składowej z-owej prędkości atomów rozpylonych. Przez składową z-ową rozumiano składową zgodną z nadanym kierunkiem prędkości pocisku. Szerzej zostało to opisane w następnej sekcji.



Rysunek 4.5: Mechanizm rozpylania w zależności od rozmiaru próbki. Próbka po lewej  $(a/R \approx 1.0)$  została rozerwana w wyniku skoncentrowania się energii w małej objętości. Próbka po prawej  $(a/R \approx 0.33)$  reprezentuje mechanizm rozpylania porównywalny z powierzchnią płaską.

#### Izotropia rozpylania



Rysunek 4.6: Wykres zależności izotropii rozpylania od rozmiaru próbki. Przedstawiona zależność prezentuje stosunek liczby rozpylonych atomów, które mają składową z-ową dodatnią lub znajdują się w obrębie takiego klastra, do całkowitej liczby rozpylonych atomów w zależności od rozmiaru próbki.

Jak zaobserwowano w poprzedniej sekcji pracy, małe rozmiary próbek znacząco wpływają na mechanizm rozpylania. Próbki poniżej rozmiarów porównywalnych z głębokością deponowanej

energii w powierzchni płaskiej są rozrywane. Przypomina to proces detonacji ładunku. Zadano sobie pytanie jak rozmiar cząstki wpływa na kierunki rozpylania atomów. W tym celu wyznaczono zależność ilości atomów "widzianych przez detektor" do wszystkich atomów rozpylonych. Za atomy widziane przez detektor uznano te, których składowa prędkości z-owa po rozpyleniu była dodatnia, bądź klaster w obrębie którego się znajdowały posiadał tę cechę.

Powyżej opisana zależność została zaprezentowana na wykresie znajdującym się na rysunku 4.6. Najważniejszą obserwacją jest zauważenie malejącej zależności wraz ze zmniejszającymi się rozmiarami próbki. Z punktu widzenia eksperymentatora może to prowadzić do błędnego oszacowania rozmiaru próbki, wykorzystującą SIMS jako metodę badawczą, jeżeli zapomni się o powyżej opisanej zależności.

#### 4.3. Wpływ punktu padania pocisku na wydajność rozpylania



Rysunek 4.7: Wykres zależności współczynnika rozpylenia od punktu padania pocisku na próbkę i jej rozmiaru.

Po opisaniu wpływu rozmiaru próbki na mechanizmy rozpylania należy zbadać wpływ punktu padania pocisku. W tym celu wykorzystano otrzymaną wcześniej wiedzę nt. deponowanej energii oraz wyniki badań zaprezentowane na rysunku 4.7 oraz tzw. heatmapach 4.8.

Po pierwsze znając wpływ rozmiaru próbki na mechanizm rozpylania, spodziewano się zwiększania prawdopodobieństwa rozpylenia atomów próbki wraz ze zmniejszaniem się jej rozmiarów. Potwierdzenie założenia znajduje się na heatmapach na rysunku na rysunku 4.8, w szczególności dla przypadków rozpyleń centralnych. Po drugie, zaobserwowano, że gdy punkt padania pocisku określony parametrem x, zbliża się do krawędzi próbki  $(x \rightarrow 1)$ , wpływ rozmiaru próbki na rozpylanie zanika. Spowodowane jest to prawdopodobnie ślizganiem się pocisku po próbce. Obserwując heatmapy dla wysokich kątów padania, możemy zauważyć, że są one niemalże identyczne, niezależnie od rozmiarów próbki.

Po trzecie, widoczny jest wpływ wtórnych zderzeń atomów próbki na rozpylanie atomów z brzegów próbek, określone tutaj jako rozpylanie boczne. Obserwacja heatmap próbek o rozmiarach R/a = 2.00 i wzwyż pozwala zauważyć niezerowe prawdopodobieństwo rozpylenia atomów próbki leżących w oddaleniu od punktu padania pocisku. Ważną obserwacją jest fakt, że dotyczy to zarówno atomów leżących na powierzchni jak i w jej głębi.

Po czwarte, zauważono zanik prawdopodobieństwa rozpylenia atomów leżących w punkcie padania pocisku. Jest to szczególnie widoczne dla rozpyleń centralnych (x = 0). Gdy pocisk zaczyna padać pod coraz wyższym kątem względem próbki, obserwuje się "ścieranie" atomów próbki przez niego. Równocześnie maleje prawdopodobieństwo na rozpylanie boczne. Najprawdopodobniej atomy przyjmujące uderzenie starają oddać się swoją energię sąsiadom leżącym pod nimi i po bokach. Gdy wartość parametru x opisującego punkt padania pocisku równaniem 3.1 zbliża się do 1, atomy nie mając wystarczająco dużej ilości sąsiadów, doprowadzają do rozpylenia atomów leżących bezpośrednio pod nimi.



Rysunek 4.8: Prawdopodobieństwo rozpylenia atomu w zależności od punktu padania i rozmiaru próbki. W lewej kolumnie widok z boku, w prawej widok z góry.

# 5. Podsumowanie i wnioski

Podsumowując obserwacje oraz propozycje podane w rozdziale z wynikami, można wyciągnąć szereg następujących wniosków.

Zaobserwowano zależność współczynnika rozpylenia próbki od jej rozmiaru. Jest to zależność, która osiąga swoje maksimum dla próbek o porównywalnych rozmiarach z wartością głębokości depozycji energii w ciele stałym przez ten pocisk.

Potwierdzono wpływ rozmiaru próbki na mechanizmy rozpylania. Jak zostało to zauważone podczas analizy wyników, wraz ze zmniejszaniem się rozmiarów próbki obserwuje się zmianę sposobu rozpylania atomów. Duże próbki rozpylają się podobnie do powierzchni atomowo płaskich. Powstający na ich powierzchni krater był na tyle duży, aby wpływ krzywizny mógł powodować wzrost współczynnika rozpylenia. Rozpylone z takich próbek atomy bądź klastry leciały głównie w kierunku, z którego padał pocisk. Gdy rozmiary próbek odpowiadały rozmiarom głębokości deponowanej energii, proces rozpylania powodował rozrywanie próbek. Z jednej strony powodowało to gwałtowny wzrost współczynnika rozpylenia, jednak z drugiej strony zmniejszała się ilość atomów bądź klastrów rozpylanych w kierunku, z którego padał pocisk. Opisane zjawisko może doprowadzić do sytuacji, gdy atomy najmniejszych cząstek mogą w wyniku rozpylenia nie dotrzeć do detektora.

Jako przyczynę tego zjawiska można zasugerować sposób deponowania energii przez pociski klastrowe. Pociski klastrowe deponują swoją energię sferycznie i na mniejszych głębokościach niż pociski monoatomowe [3]. Taki przekaz energii powoduje powstawanie krateru dla dużych próbek. Próbki o mniejszych rozmiarach mają na tyle mało atomów, że średni przekaz energii na atom przez pocisk znacząco przekracza energię wiązania między atomami srebra, co prowadzi do rozerwania próbki.

Zauważono również rozpylanie atomów leżących na powierzchni próbki, ale z dala od punktu padania pocisku. Zjawisko to nazwano w pracy jako rozpylanie boczne. Spowodowane jest ono wtórnymi zderzeniami atomów próbki, które mogą wybić atomy leżące na powierzchni. Ze względu na fakt, iż obserwowano to dla próbek większych niż wartość głębokości deponowanej energii, mógł to być kolejny przyczynek do zwiększenia się całkowitego współczynnika rozpylenia tych próbek.

# Bibliografia

- [1] Nietiadi M. L., Sandoval L., Urbassek H. M. & Möller W., Phys. Rev. B, 90 (2014) 045417.
- [2] Urbassek H. M., Bradley R. M., Nietiadi M. L. & Möller W., Phys. Rev. B, 91 (2015) 165418.
- [3] Postawa Z., Czerwiński B., Szewczyk M. Smiley J. E., Winograd N. & Garrison B. J., Anal. Chem., 75 (2003) 4402.
- [4] Maciążek D., Kański M., Gaża Ł., Garrison B. J. & Postawa Z., J. Vac. Sci. Technol. B, 34 (2016) 03H114.
- [5] Sigmund P., Phys. Rev., 184 (1969) 383.
- [6] Sigmund P., J. Vac. Sci. Technol., 17 (1980) 396.
- [7] Sigmund P., Nucl. Instr. and Meth. in Phys. Res. B, 135 (1998) 1.
- [8] Linhard J., Nielsen V., Sharff M. & Thomsen P. V. Mat. Fys. Medd. Dan. Vid. Selsk., 33 (1963) nr 10 20
- [9] Sigmund P., Mat. Fys. Medd. Dan. Vid. Selsk, 43 (1993) 7.
- [10] Sigmund P., Nucl. Instr. Meth. B, 27 (1987) 1.
- [11] Yamamura Y., Nucl. Instr. Meth., 194 (1982) 515.
- [12] Shulga V. I. & Sigmund P., Nucl. Instr. Meth. B, 47 (1990) 236.
- [13] Andersen H. H. & Sigmund P., Physics Letters, 15 (1965) 237.
- [14] Allen M. P. & Tildesley D. J., w Computer Simulation of Liquids, roz. Computer simulation: motivation and applications, Oxford University Press, (1987).
- [15] Garrison B. J. & Postawa Z., w TOF-SIMS: Material Analisys by Mass Spectrometry 2nd Ed., roz. Molecular dynamics simulations, the theoretical partner to dynamic cluster SIMS experiments, red. Vickerman J. C. & Briggs D., publisher = IM Publications LLP, (2013).
- [16] Stuart S. J., Tutein A. B. & Harrison J. A. J. Chem. Phys, 112 (2000) 6472.
- [17] Tersoff J., Phys. Rev. B, 37 (1988) 6991.
- [18] Daw M. S. & Baskes M. I., Phys. Rev. Lett., 50 (1983) 1285.
- [19] Ziegler J. F., Biersack J. P. & Littmark U., SRIM The Stopping and Range of Ions in Mattes, 1 (1985) Pergamon.
- [20] Plimpton S., Fast Parallel Algorithms for Short-Range Molecular Dynamics., 117 (1995) 1.
- [21] Verlet L., Phys. Rev., 159 (1967) 98.
- [22] Kerr J. A. & Stocker D. W., Strengths of chemical bonds, (1998).

# Spis rysunków

1.1	Zależność energii przekazywanej w strukturę elektronową od energii pocisku	4
1.2	Efekty liniowe zachodzące podczas rozpylania	5
1.3	Efekty nieliniowe zachodzące podczas rozpylania	7
3.1	PUkładu użyty do badania rozpylania nanocząstek	12
3.2	Układu użyty do badania rozpylania powierzchni srebra	13
3.3	Punkty padań pocisku na nanocząstkę	14
3.4	Punkt padania pocisku $b$ na nanocząstkę o promieniu $R.$ $\ldots$ $\ldots$ $\ldots$ $\ldots$ $\ldots$ $\ldots$	15
3.5	Wykres zależności rozpylenia próbki płaskiej od czasu symulacji	16
3.6	Ewolucja rozpylanego układu w czasie	17
4.1	Depozycja energii w płaskiej próbce	18
4.2	Rozmieszczenie atomów pocisku w próbce	19
4.3	Wykres zależności współczynnika rozpylenia przy uderzeniu centralnym od rozmiaru próbki	20
4.4	Wykres zależności efektywności rozpylania próbek od rozmiaru próbki	21
4.5	Mechanizm rozpylania w zależności od rozmiaru próbki	22
4.6	Wykres zależności izotropii rozpylania od rozmiaru próbki	22
4.7	Wykres zależności współczynnika rozpylenia od punktu padania pocisku na próbkę i jej	
	rozmiaru	23
4.8	Prawdopodobieństwo rozpylenia atomu w zależności od punktu padania i rozmiaru próbki	25

- SIMS spektrometria masowa jonów wtórnych.
- MD dynamika molekularna.
- AIREBO Adaptive Intermolecular REBO Potential.
- REBO Reactive Empirical Bond Open Potential.
- LJ potencjał Lennarda-Jonesa.
- EAM embedded-atom method.
- ZBL potencjał Zieglera-Biersacka-Littmarka.
- LAMMPS Large-scale Atomic/Molecular Massively Parallel Simulator.