

**АКАДЕМИЯ НАУК РЕСПУБЛИКИ УЗБЕКИСТАН**

**ИНСТИТУТ ЭЛЕКТРОНИКИ им. У. А. Арифова**

---

*На правах рукописи*  
УДК 537.534

**КУТЛИЕВ УЧКУН ОТОБОВЕВИЧ**

**КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССОВ РАССЕЯНИЯ  
ИОНОВ И КЛАСТЕРНОГО РАСПЫЛЕНИЯ ПОВЕРХНОСТЕЙ  
МОНОКРИСТАЛЛОВ GaP И ЛЬДА ПРИ БОМБАРДИРОВКЕ  
ИОНАМИ  $\text{Ne}^+$  И  $\text{Ar}^+$**

01.04.04 – Физическая электроника

**А В Т О Р Е Ф Е Р А Т**

диссертации на соискание ученой степени  
доктора физико-математических наук

ТАШКЕНТ – 2010

Работа выполнена в Институте электроники им. У. А. Арифова и  
Ургенческом Государственном университете им. Аль-Хорезми Министерства  
высшего и среднего специального образования Республики Узбекистан.

**Научный консультант** Академик АН РУз, доктор физ.- мат. наук  
**Тураев Назар Юлдашевич**

**Официальные оппоненты:** Академик АН РУз, доктор физ.-мат. наук  
**Раджабов Тельман Дадаевич**

Доктор физ.-мат. наук  
**Балтенков Аркадий Сергеевич**

Доктор физ.-мат. наук, профессор  
**Кремков Михаил Витальевич**

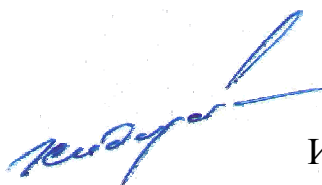
**Ведущая организация** Ташкентский Государственный технический  
университет

Защита состоится « 21 » декабря 2010 года в \_\_\_\_\_ часов на  
заседании Объединенного специализированного совета Д.015.23.01 при  
Институте электроники им. У.А. Арифова АН РУз и Институте ядерной  
физики АН РУз по адресу: 100125, г. Ташкент, ГСП, Академгородок, ул.  
Дурмон йўли, 33.  
Тел.: (998-71) 262-79-40, факс: (998-71) 262-87-67, e-mail: aie@aie.uz

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке Института электроники  
им. У.А. Арифова АН РУз.

Автореферат разослан « 5 » ноября 2010 г.

Ученый секретарь  
Объединенного специализированного совета,  
доктор физико-математических наук, проф.



И. Хидиров

## **ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ**

**Актуальность работы.** Одна из тенденций развития современных технологий состоит в возрастании роли поверхности и приповерхностных областей твердых тел. Это связано с тем, что зачастую такие области определяют физико-химические свойства материалов, представляющих наибольший интерес для микроэлектроники или материаловедения. Поэтому не случайно, что многие технологии, например, ионная имплантация, обработка поверхности импульсными электронными пучками и лазерами, приводят к модификации именно этих областей обрабатываемого материала. Такие области можно специально создавать посредством нанесения тонких слоев с помощью самых разных источников. В значительной степени практическая применимость указанных способов обработки материалов стала возможной благодаря развитию специальной группы методов анализа, среди которых важное место занимают методы, основанные на исследовании разнообразных излучений, которые возникают в объеме материала, облученного ускоренными ионами с энергией несколько килоэлектронвольт.

В настоящее время имеется множество экспериментальных данных по распылению поверхности однокомпонентных веществ, и разработан ряд моделей распыления монокристаллов. Иная ситуация в случае распыления многокомпонентных, в частности двухкомпонентных, кристаллов, играющих важную роль, в современной наноэлектронике и микроэлектронике. Здесь имеется целый ряд нерешенных проблем, связанных, в том числе, с механизмами распыления тонких пленок и с закономерностями распыления этих поверхностей.

К наименее изученным процессам относятся процессы взаимодействия ускоренных ионов с поверхностью твердых тел и их рассеяния. Исследование закономерностей этих процессов основано на анализе формы траекторий бомбардирующих частиц, движущихся в поверхностных слоях. Формы этих траекторий достаточно сложны даже для идеальных кристаллов, так как они определяются большим числом коррелированных столкновений. Задача становится еще более сложной из-за наличия в реальных мишенях различных дефектов на поверхности многокомпонентных кристаллов, а также из-за изменения бомбардируемой мишени со временем. Очевидно, что решение этой важной задачи, требующей громоздких расчетов, невозможно в аналитическом виде, и поэтому единственным эффективным способом расчета является метод компьютерного моделирования, чему и посвящена настоящая диссертация.

**Степень изученности проблемы.** К настоящему времени имеется достаточно много экспериментальных данных по рассеянию ионов поверхностями однокомпонентных монокристаллов и распылению последних при ионной бомбардировке. Разработаны также и различные теории этих физических процессов.

В настоящее время метод компьютерного моделирования широко используется при изучении механизмов и закономерностей процессов рассеяния ионов, распыления поверхностей, подвергнутых ионному облучению. Следует отметить, что для выявления особенностей малоуглового рассеяния ионов низких энергий ( $1,0-5,0$  кэВ) идеальными и дефектными поверхностями двухкомпонентных монокристаллов *GaP* и льда, а также эффекты деканализирования, многократной фокусировки в каналах, протекающие в приповерхностной области, еще достаточно не изучены и соответственно требуют своего совершенствования существующие программы и алгоритмы компьютерного моделирования. Наряду с этим, также закономерности процесса распыления плёнок льда, покрывающих металлическую поверхность, при малых энергиях бомбардирующих частиц еще далеки до полного понимания.

### **Связь диссертационной работы с тематическими планами НИР.**

Диссертационная работа выполнена в соответствии с основным направлением фундаментальных исследований УрГУ и в тесной связи с направлениями фундаментальных исследований:

ИЭ АН РУз в 2003-2007 (номер гос. регистрации темы ГНТП Ф-2.1.29); Международных грантов:

ИНТАС(2001/2-60) 2001-2002гг. по теме «Исследования закономерностей распыления многокомпонентных монокристаллов в виде кластеров при бомбардировке энергетическими частицами»;

Пенсильванского университета (Air Force Office of Scientific Research Grant Number F49620-01-1-0511) 2002-2003гг. по теме «Моделирования процесса взаимодействия ионов с биологическими материалами(вода.т.п)»;

Венского Технологического университета 2003-2004гг. по теме «Изучения механизмов взаимодействия нейтральных и заряженных частиц с веществом»;

Кембриджского университета 2004-2005гг по теме «Исследования закономерностей рассеяния ионов с поверхности многокомпонентных монокристаллов и распыления этих поверхностей при ионном облучении».

**Цель работы:** Установление методом компьютерного моделирования механизмов и закономерностей процессов малоуглового рассеяния ионов идеальными и дефектными поверхностями двухкомпонентных монокристаллов *GaP* и пленок льда и кластерного распыления плёнок льда, покрывающих поверхности *Au(111)*.

### **Задачи исследования:**

1. Обобщить и модифицировать алгоритмы и программы компьютерного моделирования, базирующиеся на методе парных столкновений, для исследования процессов рассеяния ионов поверхностями монокристаллов *GaP(100)* и пленок льда, а также адаптировать программы метода молекулярной динамики для изучения процессов распыления при ионной бомбардировке пленок льда, покрывающих поверхность *Au(111)*.

2. Исследование механизмов рассеяния ионов при бомбардировке идеальных дефектных поверхностей монокристаллов *GaP(100)* и пленок льда при малоугловом падении потока ионов и установление наиболее характерных траекторий, объясняющих сущность малоуглового рассеяния ионов.

3. Изучение ориентационных эффектов при малоугловом рассеянии ионов дефектными поверхностями двухкомпонентных монокристаллов *GaP(100)* и пленок льда при бомбардировке их низкоэнергетическими ионами (до 5 кэВ).

4. Изучение процесса деканалирования ионов, наблюдаемого при малоугловом рассеянии ионов идеальными и дефектными поверхностями *GaP(100)* и пленок льда, а также расчет типичных траекторий деканализованных частиц. Установление взаимосвязи между местоположением дефектов в кристалле и энергетическими и угловыми распределениями деканализованных ионов.

5. Исследование процессов распыления поверхностей плёнок льда, покрывающих поверхность *Au(111)*, и процессов образования кластеров молекул и атомов подложки при ионной бомбардировке.

6. Изучение и установление закономерностей процессов распыления в виде ионных кластеров молекул воды при бомбардировке плёнки льда, адсорбированных на поверхность *Au(111)*, и легированные отрицательными и положительными ионами.

7. Установление закономерностей распыления ионных кластеров при бомбардировке ионами  $Ar^+$  плёнок льда, покрывающих поверхность *Au(111)*.

**Объект исследования:** Объектом исследования являются закономерности распыления и рассеяния ионов при бомбардировке поверхности монокристалла ионным пучком.

**Предмет исследования:** Предметом исследования являются компьютерное моделирование закономерностей рассеяния ионов идеальных и дефектных поверхностей монокристаллов *GaP(100)* и льда, а также распыления плёнки льда, покрытой на поверхности *Au(111)*.

**Методы исследования:** Компьютерное моделирование, основанное на методах молекулярной динамики и приближений парных столкновений. Приближение парных столкновений используется для описания процессов рассеяния ионов поверхностью двухкомпонентных монокристаллов *GaP(100)* и льда, а метод молекулярной динамики применяется для изучения распыления плёнки льда, покрытой на поверхности *Au(111)*.

**Гипотеза исследования.** Разработка и создания программ и алгоритмов, основанных на методах молекулярной динамики и приближении парных столкновений, позволяющих изучать процессы рассеяния ионов и явление распыления поверхностей многокомпонентных монокристаллов при ионной бомбардировке.

Разработка новых методов регистрации спектров рассеянных и распыленных частиц, позволяющие получать важную информацию о невыясненных до настоящего времени механизмах процессов рассеяния и распыления.

**Основные положения, выносимые на защиту:**

1. Разработанные и модифицированные алгоритмы, и компьютерные программы, основанные на методах приближения парных столкновений; позволяющие моделировать процессы многократного рассеяния и деканализирования ионов низких энергий ( $1,0-5,0$  кэВ) при малоугловом падений ионов  $Ne^+$  и  $Ar^+$  на поверхностный блок атомов  $GaP(100)$  и льда с идеальной и дефектной структурой, и молекулярной динамики; позволяющие моделировать процессы молекулярного и кластерного распыления пленок льда с учетом полярности, при ионной бомбардировке ионами  $Ar^+$  низких энергий ( $0,1-1,0$  кэВ) поверхности  $Au(111)$  с адсорбированными пленками льда.

2. Установленные многофокусные, зигзагообразные, а также их комбинационные траектории рассеянных частиц идеальными и дефектными поверхностями монокристаллов  $GaP(100)$  и льда при малых углах падения частиц. Вывод о том, что наряду с отраженными частицами поверхностной атомной цепочки и полуканала, существуют отраженные ионы, которые многократно рассеянные в приповерхностных атомных рядах. Траектории этих частиц имеют не только зигзагообразную, но и сложную форму, которые имеют больше двух фокусов - называемые эффектом многократной фокусировки частиц внутри кристалла и этот эффект можно использовать для измерения межатомных потенциалов в твердых телах.

3. Утверждение о том, что при малоугловой бомбардировке часть падающих ионов  $Ne^+$  и  $Ar^+$  захватываются в каналы, образованные дефектами приповерхностной области монокристаллов  $GaP(100)$  и льда, и имеют угол рассеяния вплоть до  $180^\circ$ . Вывод о том, что увеличения деканализирования ионов обусловлены точечными дефектами, локализованными в приповерхностной области монокристаллов, а уменьшения концентрации дефектов ниже приповерхностной области (более 50 слоев) приводит к увеличению числа каналированных ионов с зигзагообразной траекторией, и они локализуются в кристалле, так как их энергия не достаточно для отражения с кристалла. Определены энергии, пробеги, потерь энергии деканализированных частиц приповерхностной области двухкомпонентных монокристаллов.

4. Рассчитанные коэффициенты рассеяния имеют большие значения при эффектах ионной фокусировки и ионной перефокусировки. Снижения коэффициента рассеяния, наблюдаемые в приповерхностной области монокристаллов, обусловлены эффектами деканализирования и многократной фокусировкой, а также скоплением внутри кристалла части

бомбардирующих частиц, которая даёт возможность определить величины заряда ионов в кристаллах.

5. Заключение о том, что при низких энергиях бомбардирующих ионов (меньше  $1\text{кэВ}$ ) наблюдается распыление плёнки льда, тогда как с увеличением начальной энергии (больше  $600\text{ эВ}$ ) в процесс распыления включаются атомы подложки, что отчётливо наблюдается в масс-спектрах распылённых частиц.

6. Методика имплантации положительных и отрицательных ( $\text{Na}^+, \text{Li}^+, \text{Cs}^+, \text{F}^-, \text{I}^-, \text{и Cl}^-$ ) ионов на плёнку льда, покрывающего поверхность  $\text{Au}(111)$ , которая основана на образовании ионных связей за счёт поляризации ионов и молекул воды. Вывод о том, что имплантированные ионы поляризуют молекулы воды, и в процессе распыления их расположение в кристалле сильно влияет на образование ионных кластеров.

7. Комплекс масс-спектров, полученных при ионной бомбардировке поверхностей с тонкими плёнками льда, содержащих несколько интенсивных пиков, образованных за счёт распыления молекул и кластеров воды, атомов и кластеров золота, а также ионного кластера, образованного за счёт полярности льда. Вывод о том, что существует конкретное значения начальной энергии по распылению атомов подложки для каждого адсорбированного слоя воды.

#### **Научная новизна:**

1. Разработаны и модифицированы алгоритмы и пакет компьютерных программ, основанные на методах приближения парных столкновений и молекулярной динамики, дающие возможность компьютерного моделирования процессов рассеяния ионов идеальными и нерегулярными поверхностями кристаллов  $\text{GaP}(100)$  и льда, а также процессы кластерного распыления пленок льда на поверхности  $\text{Au}(111)$  (с учетом полярности льда) при ионной бомбардировке.

2. Обнаружена и изучена многофокусная (до 30-и фокусов) траектория рассеянных ионов  $\text{Ne}^+$  и  $\text{Ar}^+$  в приповерхностной области дефектных монокристаллов  $\text{GaP}(100)$  и льда. Показано, что чем глубже проникают падающие частицы, тем больше наблюдается увеличение числа фокусов в траектории, обусловленных многократными рассеяниями ионов атомных слоев при поверхности монокристаллов.

3. Обнаружен эффект деканалирования ионов на дефектной поверхности двухкомпонентных монокристаллов  $\text{GaP}(100)$  и льда при малых углах падений ионов  $\text{Ne}^+$  и  $\text{Ar}^+$ . Показано, что отражения частиц на большие углы (вплоть до  $180^\circ$ ) с приповерхностных слоев (до 50 слоев) можно объяснить деканалированием ионов за счёт дефектов, локализованных в этой области кристалла. Установлено, что эффект деканалирования зависит от угла захвата и ширины канала. Траекторий деканалированных ионов имеют зигзагообразную и многофокусную форму с нарастающей частотой и амплитудой. Уменьшение частоты и амплитуды траекторий ионов

приводит к скоплению их в приповерхностной области мишени. Определены пробеги, коэффициент столкновения, потеря энергии и угол рассеяния каждого деканализированного иона.

4. Показано, что при нормальном падении ионов  $Ar^+$  на поверхность  $Au(111)$ , покрытых плёнкой льда, наблюдается распыление молекул воды в диапазоне значений начальной энергии  $E_0=100 \text{ эВ} \div 200 \text{ эВ}$ . Увеличение энергии падающих частиц от этого значения приводит к распылению молекулярных кластеров воды.

5. Установлено, что коэффициент распыления ионных кластеров с поверхности льда при бомбардировке ионами  $Ar^+$  увеличивается в том случае, когда на поверхность имплантированы положительные ионы  $Na^+, Li^+$  и  $Cs^+$ . Показано, что при распылении пленки льда с отрицательно заряженными ионами  $F, I$  и  $Cl^-$  коэффициент распыления ионных кластеров уменьшается в 10 раз.

6. Установлено, что при бомбардировке ионами  $Ar^+$  поверхности  $Au(111)$ , покрытой плёнкой льда, имеющей имплантированные ионы  $Na^+, Li^+, Cs^+, F, I$  и  $Cl^-$ , происходит распыление в виде больших молекулярных кластеров, размеры которых зависят от глубины расположения легированного иона, причём их образование происходит, в основном, за счёт поляризаций ионов.

7. Показано, что при бомбардировке ионами  $Ar^+$  с начальной энергией 400 эВ и 700 эВ поверхности идеальной и имплантированной ионами плёнки льда, покрывающей поверхность  $Au(111)$  несколькими слоями, образуются молекулярные кластеры воды с энергией 1 эВ, и это приводит к появлению интенсивного пика в этой области распределения кинетической энергии распыленных частиц.

**Научная значимость результатов исследования.** Научная значимость полученных результатов заключается в том, что они позволяют получить детальную картину процессов распыления и рассеяния, а также выявить специфику и отличительные особенности этих процессов в условиях малоугловой ионной бомбардировки, т.е., в условиях, когда значительная часть отраженных частиц формируется рассеянием в поверхностных полуканалах, а распыленный поток формируется преимущественно за счет выбитых и десорбированных атомов.

Результаты позволяют определить характерные особенности процесса рассеяния ионов идеальной и дефектной поверхностями кристаллов; установить закономерности процессов распыления многокомпонентных мишеней, установить основные причины образования ионных кластеров.

**Практическая значимость результатов работы** заключается в том, что предложенные на их основе методы ионного легирования в условиях скользящего угла падения ионов, а также новые разновидности малоугловой ионно-рассеивательной спектроскопии могут быть использованы при решении разнообразных задач технологий, связанных с применением ионно-



пучковых методов. Предложенные методы позволяют определять местоположение легированных ионов на поверхности кристалла. Полученные результаты могут быть полезными также для интерпретации соответствующих экспериментальных данных.

Созданный комплекс эффективных расчётных программ на основе усовершенствованных алгоритмов может быть использован как для диагностики поверхностей, покрытых диэлектрическими плёнками, так и при усовершенствовании технологических процессов, связанных с модификацией поверхности твердого тела ионными пучками. Результаты исследований могут быть применены для решения ряда прикладных задач очистки и легирования приповерхностных слоев твердых тел.

**Реализация результатов работы.** Новые научные положения и выводы, представленные автором на защиту, являются крупным вкладом в существующие теоретические представления о процессах малоуглового рассеяния ионов идеальными и дефектными многокомпонентными материалами, и о процессах распыления диэлектрических плёнок. Они являются также научной основой для разработки новых методов диагностики поверхности: малоугловой ионно-рассеивательной спектроскопии и вторично-ионной масс-спектрометрии распыленных частиц в виде ионных кластеров, позволяющих, в отличие от существующих, определять сорт и местоположение легированных ионов. Они также могут быть использованы в качестве теоретического учебного материала при подготовке специалистов в области физической электроники, микроэлектроники и нанотехнологии.

**Апробация работы.** Основные результаты диссертации докладывались и обсуждались на XV-XIX Международных Конференциях по взаимодействию атомных частиц с твердым телом (Звенигород, 2001, 2003, 2005, 2007, 2009); XXVIII-XXXII- XXXIV ежегодных Международных Конференциях по физике взаимодействия заряженных частиц с кристаллами (Москва, 1998-2002-2004); VI Международной Конференции по компьютерному моделированию радиационных эффектов в твердых телах (Дрезден, Германия, 2002); ежегодных совещаниях Европейского общества по исследованию материалов (Страсбург, Франция, 2001, 2005); X Международной Конференции по явлениям на поверхности твердых тел (Бирмингем, Англия, 1998); VII Международной Конференции по осцилляторам в прикладной науке и технологии (Лондон, Англия 2001); XIII и XIV Международных Конференциях по ионно-имплантационной технологии (Альбах, Австрия, 2000, Санта-Фе, США, 2002); XI Международной Конференции по поверхности твердых тел (Сан-Франциско, США, 2001), XII Международной конференции по микроскопии полупроводниковых материалов (Лондон, Англия, 2001); XII-XIII Международной Конференции по фотонным, электронным и ионным столкновениям (Санта-Фе, США, 2001, Стокгольм, Швеция, 2003); Европейской Конференции по исследованию поверхностей и межфазного

анализа (Вена, Австрия, 2005); XIV Международной Конференции по вторично-ионной масс спектрометрии (Сан-Диего, США, 2002), XIV Международной Конференции по ионно-пучковой модификации материалов (Монтерей, США, 2002); IV- Международной Конференции по структуре материалов и микромеханике частиц (Брно, Чехия, 2004); XXXII Международной Школе по радиационным эффектам в твёрдых телах (Эриче, Италия, 2004); XXI Международной Конференции по атомным столкновениям в твёрдых телах (Генуя, Италия, 2004); VI Международной Конференции по проблемам ядерной физики (Ташкент, 2006), Международной Конференции по магнитным и сверхпроводимым материалам (Хива, 2007); XVI Международной Конференции по модификации поверхности металлов ионными пучками (Дрезден, Германия, 2008); Международной Конференции по теоретической физике (Дубна, Москва, 2008); I-V Республиканских (с участием зарубежных ученых) Конференциях по физической электронике (Ташкент, 1995, 1999, 2002, 2005, 2009); Международных Конференциях по современным проблемам ядерной физики (Ташкент, 2006, 2009); научных семинарах кафедры «Физики» Ургенчского госуниверситета (Ургенч, 2000-2010); лаборатории «Теории взаимодействия заряженных частиц с поверхностью тела» Института электроники АН РУз (1999-2009).

**Опубликованность результатов.** По теме диссертации опубликовано 57 научных работ, из них 14 статей в Международных и отечественных научных журналах, 10 статей в трудах Международных Конференций, 33 тезиса докладов в трудах научных Конференций, Симпозиумов и семинаров. Список основных работ по материалам диссертации приведен в конце автореферата.

**Структура и объём работы.** Структура и объём работы. Диссертация состоит из введения, шести глав, заключения с выводами и приложениями. Она изложена на 296 страницах и включает: основную часть – 166 страниц, в т.ч. 108 рисунков на 79 страницах, список литературы 258 наименований на 26 страницах, список опубликованных работ по материалам диссертации на 7 страницах и приложения на 18 страницах.

**Вклад автора в разработку решения проблемы.** Представленные результаты в диссертации получены непосредственно автором. Автор участвовал в постановке задачи исследований, им развиты структура библиотеки подпрограмм, разработаны итерационные алгоритмы и компьютерные программы, получены основные результаты, сформулированы выводы. Таким образом, личный вклад соискателя в диссертационную работу и получение научных результатов, которые выносятся на защиту, является определяющим. В постановке ряда задач исследований и обсуждении результатов приняли участие научный консультант акад. Н. Ю.Тураев, а также проф. Ф. Ф. Умаров, проф. А. А. Джурахалов и к. ф.-м. н. И. А. Войцеховский.

## ОСНОВНОЕ СОДЕРЖАНИЕ РАБОТЫ

**Во введении** обосновывается актуальность выбранной темы исследований, ее научное и практическое значение, сформулированы основные положения, выносимые на защиту, научная новизна, научная и практическая значимость полученных результатов.

**В первой главе** представлен обзор результатов теоретических исследований и экспериментальных данных о процессах рассеяния ионов и о процессах распыления поверхности многокомпонентных кристаллов. Показано, что ионно-рассеивательная спектроскопия даёт важную информацию о поверхности твёрдого тела. Обсуждается применимость метода парных столкновений к столкновениям на поверхности кристалла. При малых значениях энергий ионно-атомные столкновения на поверхности твёрдого тела можно рассматривать как изолированные парные столкновения и их последовательности. Этот вывод основывается на рассмотрении времени взаимодействия падающего иона и атома кристалла, а также энергий, характерных для таких столкновений. Так как отталкивающая составляющая потенциала быстро уменьшается с увеличением межатомного расстояния, то время взаимодействия для таких столкновений составляет величины порядка  $10^{-15}$ - $10^{-16}$  с, что гораздо меньше периода колебаний решетки, составляющего примерно  $10^{-13}$  с. Поэтому, когда энергия, передаваемая в процессе столкновения, превышает энергию связи атома мишени (5-20 эВ), этот атом можно считать изолированным от решетки.

Приводятся основные соотношения элементарного акта взаимодействия двух частиц с помощью метода парных столкновений. Если частица массы  $M_1$  с атомным номером  $Z_1$ , обладающая скоростью  $v_0$  (и кинетической энергией  $E_0$ ), упруго сталкивается с покоящимся атомом мишени массой  $M_2$  и атомным номером  $Z_2$ , то несложно показать, что налетающая частица рассеивается в лабораторной системе координат на угол  $\theta_1$  по отношению к направлению ее первоначального движения. При этом атом мишени в результате столкновения начинает двигаться в направлении, составляющем угол  $\theta_2$  с первоначальным направлением налетающей частицы. Связь этих параметров определяется следующими соотношениями:

$$E_1 = (1 + \mu)^{-2} E_0 (\cos \theta_1 \pm \sqrt{(f\mu)^2 - \sin^2 \theta_1})^2$$

$$E_2 = (1 + \mu)^{-2} E_0 (\cos \theta_2 \pm \sqrt{(f)^2 - \sin^2 \theta_2})^2$$

Для описания ион-атомных столкновений использовались потенциалы Бирзака-Циглера-Литтмарка[1]:

$$V_{SBL} = \frac{Z_1 Z_2 e^2}{r} ((0,1818 \exp(-3,2 \frac{r}{a}) + 0,5099 \exp(-0,9423 \frac{r}{a}) + 0,2802 \exp(-0,4029 \frac{r}{a}) + 0,02817 \exp(-0,2616 \frac{r}{a}))$$

где,  $a=0,8853a_0(Z_1^{0,23}+Z_2^{0,23})$  - функция экранирования.

Что же касается неупругой потери энергии атомной частицы в элементарном акте столкновения, то она определяется формулой Фирсова, модифицированной Кишиневским [1]:

$$\varepsilon(E_0, P) = \frac{0,310^{-7} v Z_1 (Z_1^{1/2} + Z_2^{1/2}) (Z_1^{1/6} + Z_2^{1/6})}{(1 + \frac{0,67 \sqrt{Z_1 r_0}}{a_{tf} (Z_1^{1/6} + Z_2^{1/6})})} + (1 - 0,68 \frac{V(r_c)}{E_r})$$

где,  $a_{tf}= 0,468\text{\AA}$ ,  $v$  и  $E_r$  - относительная скорость и энергия атома,  $Z_1$ - и  $Z_2$  – заряд сталкивающихся ионов и атомов,  $v$  - см/с,  $E_r$ - эВ,  $r_{min}$ - в ангстремах.

В обзоре показано, что значительная часть опубликованных работ посвящена исследованию рассеяния ионов дефектными поверхностями многокомпонентных материалов и определению энергий ионной фокусировки. Рассеяние ионов при бомбардировке под малыми углами скольжения можно использовать для определения чистой и дефектной поверхности. Анализ этих работ показывает, что метод ионно-рассеивательной спектроскопии достаточно успешно применяется для определения атомных ступенек и сорта торцевых атомов, находящихся на ступеньке.

При бомбардировке в условиях ионной фокусировки падающие частицы движутся параллельно поверхности, не проникая вглубь неё. При малых углах рассеяния имеются методики для мониторинга модификации реальной поверхности. На основе модели полуканалов объясняется эффект ионной фокусировки. Ионы, проходящие между двумя атомными рядами поверхности, фокусируются на дне полуканала. Выведены аналитические выражения для определения значений энергии фокусировки. Приведены результаты работ, в которых рассмотрено рассеяние ионов средних энергий ступенчатой поверхностью многокомпонентных монокристаллов.

Приводятся экспериментальные и теоретические результаты по распылению многокомпонентных материалов. Обсуждаются различные методы, описывающие процесс распыления при ионной бомбардировке. Показано, что существует много экспериментальных работ, посвященных распылению многокомпонентных материалов. В то же время, методу молекулярной динамики для процесса распыления многокомпонентных

материалов посвящены лишь отдельные публикации. Этот важный вопрос находится в начальной стадии.

В ряде работ исследовано распыление плёнок в виде кластеров. Анализ показал, что существует ряд работ, посвящённых изучению динамики кластеров воды. Широкие диагностические возможности этих работ требуют их дальнейшего развития.

Таким образом, путем анализа литературных данных очерчен круг вопросов, требующих своего дальнейшего развития и разработки.

**Во второй главе** описывается модель и алгоритм расчета рассеяния ионов при малых углах падения на поверхности многокомпонентных монокристаллов, а также излагаются основы метода молекулярной динамики, который используется для исследования распыления поверхности многокомпонентных материалов.

В области низких энергий траектории сталкивающихся частиц определяются в первом приближении силами упругого взаимодействия атомов. Это кулоновские силы взаимодействия ядер и электронов атомов. Они действуют на атомных расстояниях между взаимодействующими частицами. Следовательно, для расчета траектории налетающего иона необходимо рассмотреть его взаимодействие с совокупностью атомов кристаллической решетки одновременно. Однако, при не очень низких энергиях столкновения иона с атомом кристалла можно ограничиться рассмотрением изолированных парных столкновений частиц. Подтверждением тому, что атомы решетки свободны при столкновениях, т.е. ведут себя как атомы плотного газа, служат результаты исследования времени взаимодействия и энергии сталкивающихся частиц.

Для дальнейшего развития математического моделирования процесса рассеяния ионов средних и малых энергий в широком интервале углов падения и рассеяния нами использованы закономерности столкновения двух тяжелых частиц и рассмотрено рассеяние пучка ионов от поверхности монокристаллического образца на основе модели парных одно-, двух-, и т.д. многократных соударений.

Предполагается, что частицы движутся между столкновениями вдоль прямых линий, которые являются асимптотами путей частицы в лабораторной системе координат. Неупругие потери полагаются равными сумме локальных и нелокальных потерь. Локальные потери определяют по формуле Оена-Робинсона [2]. Нелокальные потери энергии ассоциируются с непрерывными потерями энергии движущейся частицы и полагаются пропорциональными скорости частицы. Учет локальных и нелокальных потерь может быть произведен в любых соотношениях. Программа MARLOWE [3] позволяет также моделировать взаимодействие ионов с аморфными и поликристаллическими твердыми телами. Это осуществляется при помощи специальных процедур вращения монокристаллического блока, параметры которого являются входными данными программы. Так, чтобы

моделировать отражение от мишени с хаотическим расположением атомов, кристаллическую мишень после каждого столкновения с бомбардирующей частицей поворачивают по случайному закону относительно кристаллической решетки.

В этой главе также представлены основы метода молекулярной динамики. Молекулярная динамика (МД) -это техника компьютерного моделирования, позволяющая проследить за эволюцией системы взаимодействующих атомов во времени с помощью интегрирования уравнений движения. Несомненным преимуществом метода МД является возможность моделирования системы при заданной температуре или при заданных скоростях атомов (ионов) с достаточно высокой скоростью расчета [4]. В настоящее время МД применяется в квантовой химии и физике твердого тела для:

- изучения дефектов в кристаллах, варьирующихся от точечных (вакансии, дефекты внедрения) до линейных (дислокации) и плоских (межфазные, междоменные границы и т.д.). Для расчета подобных структур нужно применять метод суперячеек, требующих большого количество атомов в системе;

- реконструкции поверхности кристалла, связанной с перестройкой координат множества атомов на поверхности. Последнюю можно описать с помощью МД, причем можно проследить за изменением поверхности в зависимости от температуры;

- изучения кластеров, величина которых варьируется от нескольких атомов до нескольких тысяч атомов. С помощью МД в основном проводится процедура оптимизации геометрии кластера;

- изучения биологических молекул (белки, ДНК, РНК и др.), обладающих низкой симметрией и содержащих огромное количество атомов.

МД в этой работе используется для моделирования микроскопического движения молекул льда, локализованных на поверхности металла. Основной частью МД моделирования являются потенциалы взаимодействия, которые определяют взаимодействия атомов [5].

Система, исследованная в работе, состоит из кристалла  $Au(111)$ , покрытого слоями воды. Допирующие ионы могут располагаться как в верхних слоях воды, так и внутри пленки воды.

Для описания взаимодействия пары молекул «вода-вода» выбран потенциал SPC [6]. В SPC модели, потенциал взаимодействия определяется электростатическим взаимодействием атомов, образующих молекулу  $H_2O$ . Для описания отталкивающей части потенциала между атомами кислорода был выбран потенциал Ленарда-Джонса [7]:

$$U_{\text{между}} = U_{\text{Л-Ж}} + U_{\text{электростатик}} = 4\zeta_0 \left[ \left( \frac{\sigma}{r_{ij}} \right)^{12} - \left( \frac{\sigma}{r_{ij}} \right)^6 \right] + \sum_{i=1}^3 \sum_{k=1}^3 \frac{q_{ik} q_{jl}}{4\pi\epsilon_0 r_{kl}}$$

Для описания взаимодействия в паре Au-Au используется скорректированный потенциал функции МД/МОНТЕ-КАРЛО [8]. Следует отметить, что этот потенциал хорошо воспроизводит поверхностную энергию атомов Au [9-10].

Для описания взаимодействия  $Au-H_2O$  нами выбран потенциал Spohr [11]. Для пары ион - вода использовался кулоновский потенциал и потенциал Ленхарда-Джонса:

$$U = U_q + U_{LJ}$$

Для того, чтобы проследить за эволюцией данной системы, необходимо провести интегрирование уравнений движения. Среди наиболее известных методов интегрирования можно выделить алгоритм Верле, алгоритм «прыжков лягушки» (leap frog), метод предиктора-корректора.

Далее в этой главе описываются структуры *GaP* и кристаллов льда.

Следует отметить, что поверхность *GaP*  $\langle \bar{1}10 \rangle$  и льда  $\langle \bar{1}10 \rangle$ , похожи друг с другом, но отличаются глубиной и шириной полуканала.

Атомы решетки таких кристаллов выстраивались по четырем координационным сферам. Для каждого атома составляется таблица его ближайших соседей, находящихся на этих координационных сферах. В первой и третьей сферах находятся 4 и 12 атомов одной компоненты, а во второй и четвертой сферах - 12 и 6 атомов другой компоненты.

При изучении распыления пленки льда, покрывающей поверхность металла, была использована система, которая содержит кристалл *Au(111)* и адсорбированную пленку воды. Кристалл *Au(111)*, содержит 1980 атомов, расположенных в 9 слоях. Молекулы воды первого слоя расположены на поверхности *Au(111)*. Молекулы второго слоя образуют водородные связи с атомами кислорода первого и третьего слоев. Следующие слои были построены в соответствии с первым и вторым слоями кристалла воды.

Алгоритм взаимодействия ионов с поверхностью многокомпонентных кристаллов реализован программой, написанной на языке Фортран 90, и на основе этой программы проведены расчеты на машинах PENTIUM-IV и кластерах компьютеров Пенсильванского госуниверситета. При необходимости на основе этих данных могут быть построены графические зависимости с помощью пакета GRAPFER и Origin.

Таким образом, метод молекулярной динамики и метод приближения парного столкновения отвечают всем требованиям, предъявляемым к исследованиям распыления поверхностей и рассеяния ими ионов, и создают возможность успешного решения поставленной задачи.

**В третьей главе** представлены результаты исследования рассеяния ионов идеальной поверхностью многокомпонентных монокристаллов.

Изучены характерные траектории рассеянных ионов  $Ne^+$  и  $Ar^+$  поверхностью многокомпонентных монокристаллов при скользящих углах

падения. Эти траектории рассмотрены для поверхностей  $GaP(100)$   $\langle 100 \rangle$ ,  $\langle 110 \rangle$ ,  $\langle \bar{1}10 \rangle$ , а также для плёнки льда в направлении  $\langle \bar{1}10 \rangle$ . Следует отметить, что в этих направлениях атомы  $Ga$  и  $P$  (в случае монокристалла  $GaP(100)$ ), а также атомы  $H$  и  $O$  (в случае лед) расположены послойно. Поэтому атомные ряды дна и стенки поверхностного полуканала образованы атомами разных сортов.

На рис.1.а. представлена типичная траектория рассеянного иона при значении точки прицеливания  $J=0.94\text{\AA}$ . Видно, что падающая частица проникает внутрь монокристалла на 6 – ой слой и начинает рассеиваться с 4 и 6-ыми атомными рядами. Траектория имеет зигзагообразную форму. Пробег иона между 4-ым и 7-ым слоями имеет сложную форму, длина которого равна  $965\text{ \AA}$ . После выхода из этого канала ион захватывается в соседний канал, образованный 3-им и 5-м слоями. Постепенно поднимаясь в верхние слои, ион покидает кристалл. Следует отметить, что траектория рассеянного иона не ограничивается одним каналом, т.е. ион, проникая в другие каналы (в общем случае в 6 каналов), в конечном счете, выходит из соседнего канала.

С помощью плоской картины этой траектории (рис.1.б) можем также извлечь более подробную информацию. Из вида траектории видно, что ион многократно рассеивался от атомных рядов, расположенных параллельно. Жесткие столкновения с атомами соседних каналов повлияли на выход иона из кристалла. Для этой траекторий иона коэффициент столкновения равен 431, а неупругие потери энергии равны  $898\text{ эВ}$ .

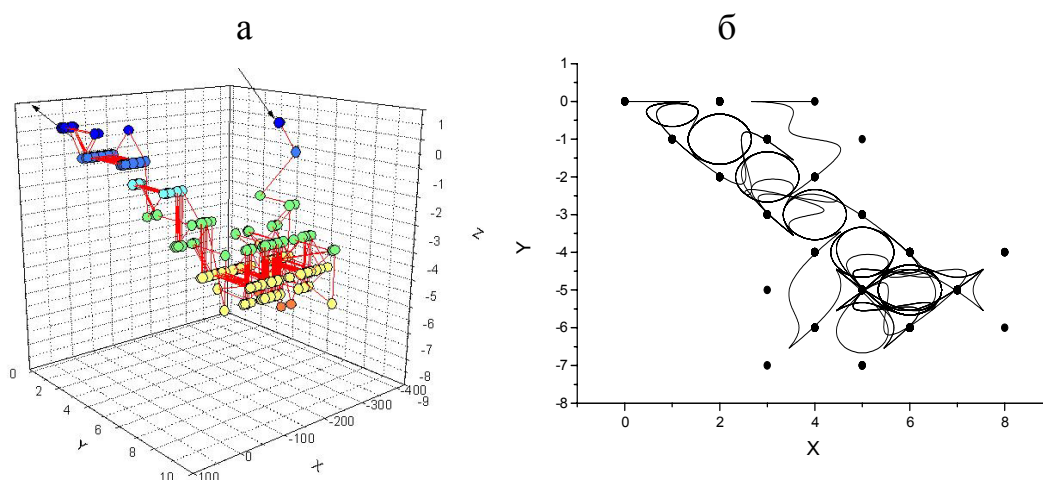
Анализ расчетов показал, что характерные траектории рассеянных ионов от блока атомов многокомпонентных монокристаллов в основном определяются кристаллическими направлениями монокристаллов, которые существенно влияют на процессы рассеяния и нейтрализации ионов.

Исследованы процессы рассеяния ионов  $Ne^+$  и  $Ar^+$  от поверхностей полупроводников типа  $A^3B^5$  и кристалла льда при малых значениях угла скольжения с начальной энергией падающих частиц  $E_0=5\text{ кэВ}$  и  $E_0=1\text{ кэВ}$ . В результате была получена зависимость коэффициента рассеяния ионов от угла скольжения  $\psi$ -  $K_p(\psi)$ .

Полученные результаты показывают, что зависимость  $K_p(\psi)$  имеет двухпиковую структуру. Первый пик, образованный в области малых углов, относится к малоизученному эффекту- эффекту ионной перефокусировки.

А второй пик - относится к эффекту ионной фокусировки. Расчёты показали, что уменьшение начальной энергии приводит к увеличению значения угла скольжения, при котором наблюдается эффект ионной перефокусировки.





**Рис.1. Характерные траектории рассеянных ионов  $Ne^+$  поверхностями  $GaP(100) \langle 100 \rangle$  при угле скольжения  $\psi = 6^\circ$  с  $E_0 = 5 \text{ кэВ}$  (траектория при  $J = 0.94 \text{ \AA}$ , в объемном (а) и плоском виде (б))**

Изучение траектории перефокусированных частиц показало, что столкновение иона с поверхностью происходит следующим образом: вначале с одной стенкой и дном полуканала, а затем с другой стенкой и дном того же полуканала. Проекция данной траектории рассеянного иона от полуканала имеет два фокуса, один из которых находится внутри полуканала, а второй - вблизи поверхностного слоя.

В данной главе также приводятся траектории падающих частиц в приповерхностной области монокристаллов  $GaP(100)$  и льда. Из-за многократного рассеяния иона с атомных рядов, траектория иона рассеянного иона имеет многофокусную форму.

Исследованы энергетические и угловые распределения рассеянных частиц (ионов  $Ar^+$  и  $Ne^+$ ) от полуканалов, образованных на поверхности многокомпонентных монокристаллов ( $GaP(100) \langle 110 \rangle, \langle \bar{1}10 \rangle$  и плёнки льда). Энергетические и угловые распределения были получены при различных значениях угла скольжения  $\psi = 3^\circ, 5^\circ, 7^\circ$ . Показано, что во всех случаях энергетический спектр содержит два пика, первый из которых образуется при малых значениях энергии и относится к ионам, рассеянным от полуканала, а следующий пик, образовавшийся при больших значениях энергии, относится к ионам, рассеянным от атомной цепочки. Показано, что при условиях ионной перефокусировки и фокусировки, интенсивность пика рассеянных ионов от полуканала увеличивается.

Таким образом, изучение процесса скользящего рассеяния ионов поверхностью многокомпонентных материалов даёт возможность получить полную информацию о траекториях рассеянных, имплантированных и гиперканализированных ионов, а также о степени нейтрализации бомбардирующих частиц.

**В четвертой главе** представлены результаты исследования влияния дефектов на процесс рассеяния ионов.

Поверхность кристалла является самым очевидным примером поверхностного дефекта. Известно, что вблизи поверхности кристалла в некоторой степени нарушается расположение атомов. Из-за этого поверхностный слой находится в напряжённом состоянии и обладает некоторой поверхностной энергией, подобно тому, как и поверхность жидкости обладает энергией поверхностного натяжения.

Дефекты встречаются и во внутренней части кристалла. Это связано с тем, что большинство реальных кристаллов формируются одновременно из нескольких центров кристаллизации, и поэтому они состоят из зерен с близкой ориентацией кристаллических решеток.

Приведены исследования рассеяния ионов от ступенчатой поверхности монокристаллов *GaP(100)* и льда. Показано, что в обоих случаях ионы, захваченные в канал, образованный атомами ступеньки, некоторое время находятся в канале, а затем деканализируются. Приведенные расчеты показали, что траектории деканализированных частиц имеют зигзагообразную форму. Сравнены энергетические спектры рассеянных ионов от вышеуказанных ступенчатых поверхностей. В обоих случаях на энергетических спектрах наблюдаются пики, соответствующие одно- и двукратно рассеянными ионам. Во всех наблюдаемых случаях пик однократного рассеяния имеет большую интенсивность по сравнению с пиком двукратного рассеяния ионов. Расчёты показали, что при наличии на поверхности атомных ступенек в обоих случаях можно определить сорт торцевого атома по характеристикам однократного рассеяния ионов при угле рассеяния  $\theta=90^\circ$ .

При проведении расчетов расположение в кристалле внутренних дефектов задавалось с помощью специальной программы. Расположение дефектов, генерируемое случайным образом, хорошо согласуется с экспериментально наблюдаемой картиной локализации дефектов в кристалле.

На рис.2. представлена характерная траектория рассеяния иона  $\text{Ne}^+$  дефектной поверхностью *GaP(100) <110>* с начальной энергией  $E_0=5\text{кэВ}$ , при угле скольжения  $\psi=5^\circ$ .

Траектории ионов внутри кристалла имеют своеобразную форму при  $J=1,355\text{ \AA}$  (рис.2а). Анализ траектории показывает, что ион движется между первым и вторым атомными рядами, а затем, испытывая влияние третьего слоя, захватывается в полуканал. Полуканализирование иона происходит на расстоянии  $28,56\text{ \AA}$ . Рассеяние иона между первым и третьим атомными слоями объясняется наличием линейного дефекта (отсутствие 5 атомов Ga, расположенных на втором слое). Проникновению иона глубже внутрь кристалла способствует наличие дислокации в третьем слое, благодаря которым происходит деканализирование иона. Анализ траектории показывает, что в этом случае падающая частица вследствие деканализирования проникает

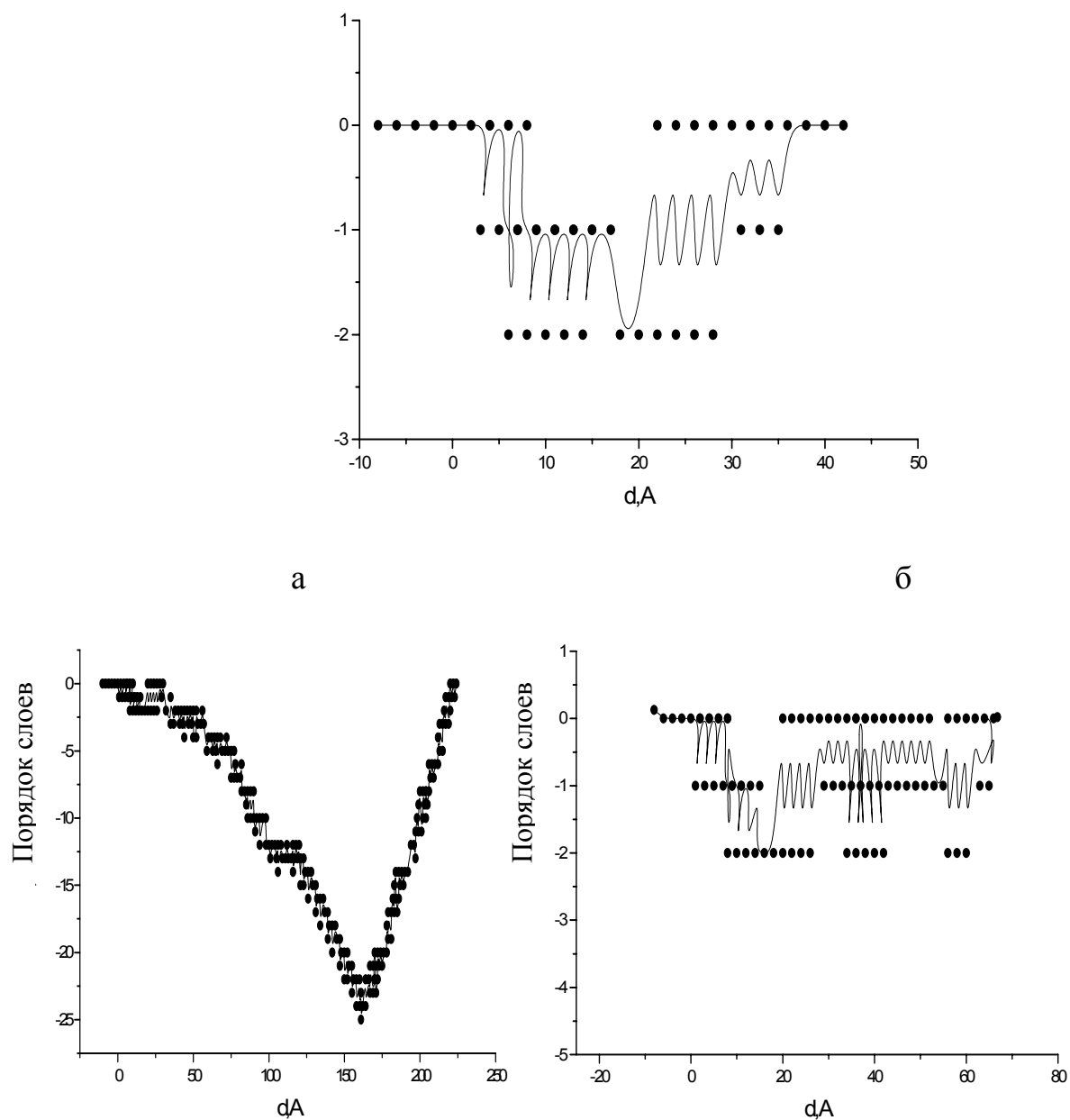
внутри кристалла до 25 слоя (падающая часть траектории), а отсутствие атома Ga, расположенного в 24 слое, приводит к изменению направления траектории иона в сторону поверхности кристалла (отражённая часть траектории). Показано, что при наличии дефектов приповерхностной области монокристалла также наблюдаются многократно перефокусированные траектории ионов.

На рис.2б и рис.2в. представлены характерные траектории при значениях прицельной точки  $J=1.5468 \text{ \AA}$  и  $J=1.74 \text{ \AA}$ . На рис.2б. видно, что ион захвачен в полуканал, образованный тремя атомными рядами. Падающий ион многократно сталкивается со стенками полуканала, образованного первыми двумя слоями. Дальнейшие столкновения иона происходят с атомами второго и третьего слоёв до линейного дефекта, образованного во втором слое монокристалла. Наличие линейного дефекта приводит к рассеянию иона между первым и третьими слоями. Расчёты показали, что дальнейшие столкновения иона происходят как на идеальной, так и на дефектной части полуканала с последующим отражением от поверхности.

При значении прицельной точки  $J=1.74 \text{ \AA}$  траектория рассеянного иона также имеет зигзагообразную форму (рис.2в.) Анализ траектории показывает, что после многократного рассеяния иона атомной цепочкой первого слоя ион начинает проникать внутрь полуканала, образованного на поверхности, и наблюдается необычная траектория иона, имеющая два фокуса. Первый фокус образовался между вторым и третьим слоями (как при эффекте ионной фокусировки), а второй фокус расположился вблизи атомов второго слоя. Типичная траектория, имеющая два фокуса, продолжается до границы линейного дефекта, образовавшегося на втором слое. При наличии дефекта ион испытывает влияние первого и третьего слоёв, а с окончанием дефекта ион рассеивается стенкой полуканала (первый и второй слои) до отражения поверхностным полуканалом. Следует отметить, что при каждом значении прицельной точки траектория иона имеет разные формы, и соответственно параметры рассеянного иона тоже различаются.

Показано, что дефекты внутри кристалла приводят к многократным рассеяниям и деканалированию ионов, а также способствуют увеличению значения угла рассеяния ионов. Деканалирование ионов, в основном, зависит от геометрических параметров канала. Следует отметить, что с увеличением угла скольжения падающие частицы проникают глубже в кристалл, а наличие дефектов усиливает этот эффект.

На рис.3. представлены характерные траектории ионов, которые остаются в внутри кристалла, т.е. они не способны выйти из кристалла. При  $J=1.09 \text{ \AA}$  падающая частица остается в кристалле, проникая до 20- го слоя (рис.3а). Отметим, что в этом случае из-за большого расстояния между



**Рис.2. Характерная траектория рассеянного иона  $Ne^+$  дефектной поверхностью  $GaP(100)$   $\langle \bar{1}10 \rangle$  с начальной энергией  $E_0=5$  кэВ, при угле скольжения  $\psi=5^\circ$ , значения прицельной точки а- $J=1.355$  Å, б- $J=1.5468$  Å и в- $J=1.74$  Å**

атомными рядами и существующими дефектами ион проникает глубже в кристалл. Пробег иона в этом случае равен  $2316$  Å.

При  $J=1.51 \text{ \AA}$  ион проникает до 6-го слоя, а затем поднимается до 2-го слоя и дальнейшие столкновения происходят с атомами, расположенными в глубоких слоях. Расстояние проникновения иона в кристалл этом случае составляет  $2007 \text{ \AA}$ , а глубина проникновения 52 слоя.

Приведены энергетические и угловые распределения рассеянных частиц дефектными поверхностями многокомпонентных материалов. Полученные угловые распределения рассеянных ионов кристаллами, имеющими внутренние дефекты и одновременно ступенчатую поверхность, показывают, что в отличие от рассеяния ионов идеальной поверхностью, рассеяние ионов в данном случае происходит вплоть до угла  $\theta \leq 180^\circ$ .

Из представленных зависимостей видно, что энергетические распределения рассеянных частиц во всех случаях содержат 2 более интенсивных пика по сравнению с остальными. Самый интенсивный пик образуется при однократном рассеянии ионов от идеальной поверхности. Расчёты показали, что при наличии атомных ступенек на поверхности многокомпонентных монокристаллов можно определить сорт торцевого атома, наблюдая однократное рассеяние ионов при угле рассеяния  $\theta=90^\circ$ .

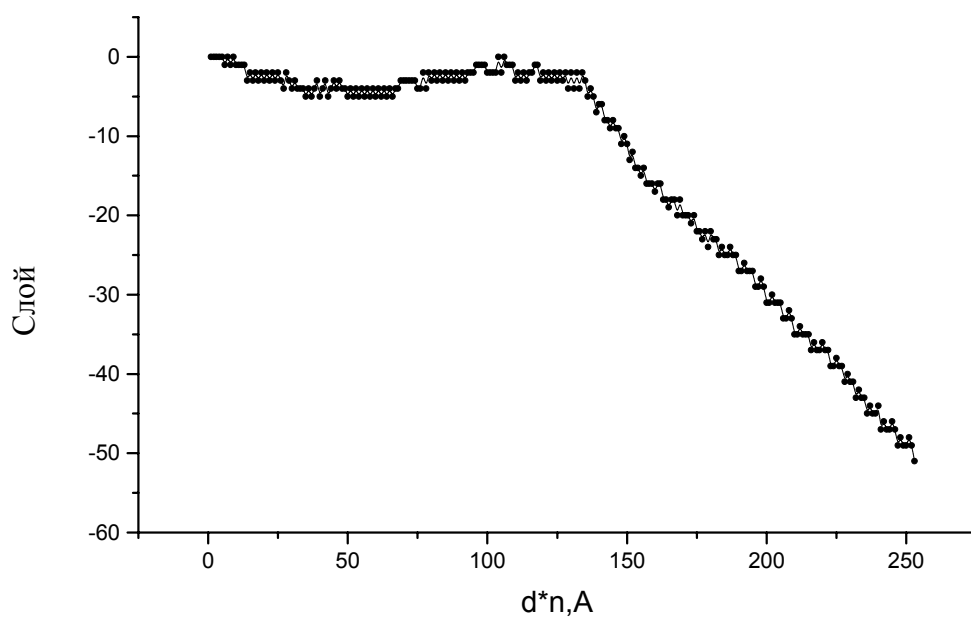
Рассчитанные угловые распределения рассеянных частиц кристаллами, имеющими внутренние дефекты, показывают, что интенсивные пики образуются за счёт зеркально рассеянных ионов идеальной поверхностью при значениях угла рассеяния до  $\theta=10^\circ$ . Последующие менее интенсивные пики относятся к деканализированным ионам, образованным за счёт внутренних дефектов монокристалла при значениях угла рассеяния  $11^\circ \leq \theta \leq 180^\circ$ .

Таким образом, полученные угловые распределения ионов, рассеянных кристаллами, имеющими внутренние дефекты и ступенчатую поверхность, показывают, что в отличие от идеальных кристаллов, интервал значений угла рассеяния деканализированных частиц более широкий, а в энергетическом спектре деканализированные ионы образуют характерные пики.

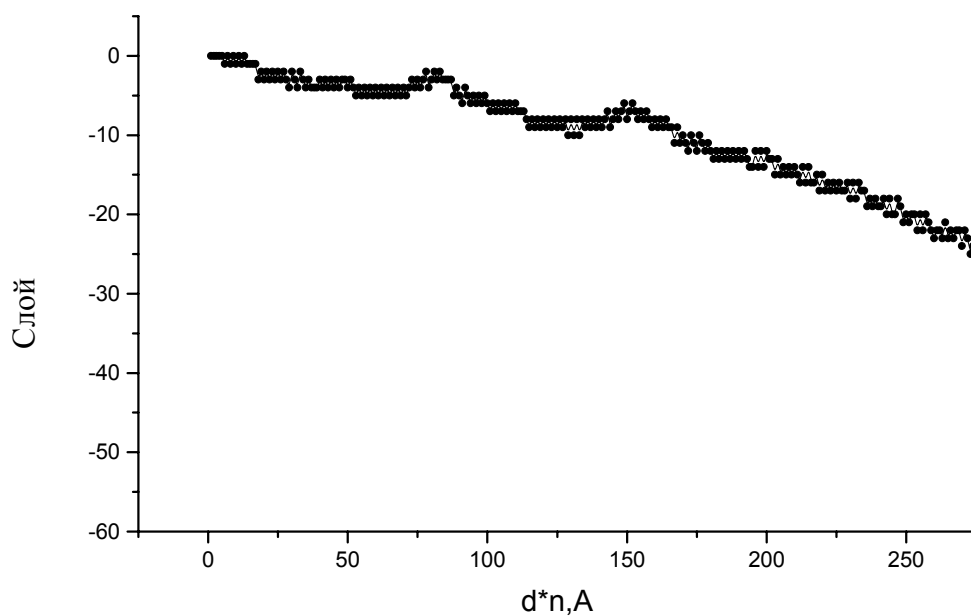
**В пятой главе** представлены результаты расчетов по распылению плёнки льда при бомбардировке ускоренными ионами.

Исследовано распыление тонкой плёнки льда, покрывающей поверхность металла, при бомбардировке ионами  $Ar^+$ . С помощью программы VMD (Visual Molecular Dynamics) визуально показан процесс бомбардировки ионами  $Ar^+$  поверхности  $Au(111)$ , покрытой двумя слоями молекул воды. Данный процесс бомбардировки происходит при нормальном падении на поверхность твёрдого тела иона с начальной энергией  $E_0=400 \text{ эВ}$  и  $E_0=700 \text{ эВ}$ . Продолжительность процесса равна  $t=5$  пикосекунд.

Полученные изображения процесса бомбардировки с помощью специальной программы VMD позволяют выявить закономерность, сущность которой заключается в следующем: молекулы воды, расположенные на



a



**Рис.3. Характерные траектории рассеянного иона  $Ne^+$  дефектной поверхностью плёнки льда в направлении  $\langle \bar{1}10 \rangle$  с начальной энергией  $E_0 = 5$  кэВ, при угле скольжения  $\psi = 5^\circ$ , при разных значениях прицельной точки (a-  $J = 1.09$  Å, б-  $J = 1.51$  Å)**

поверхности кристалла, распыляются не только в виде самих отдельных молекул, но и в виде кластеров (рис.4).

Следует отметить, что атомы  $Au$ , расположенные на нижней части кристалла, покидают его, получая энергию от своих же соседних атомов, в то время как атомы  $Au$ , расположенные на верхней части кристалла, распыляются вместе с молекулами воды.

Установлено, что молекулы воды за некоторое время либо покидают участок взаимодействия иона с пленкой льда, либо перемещаются в разных направлениях. Такие перемещения молекул воды приводят к появлению открытой части подложки, когда часть поверхности некоторое время будет содержать только атомы  $Au$ . Показано, что часть молекул плёнки воды, которая расположена близко к краям поверхности твердого тела, начинает перемещаться по краям подложки, образуя длинную цепочку молекул.

Отметим, что вблизи поверхности образуется несколько кластеров, которые состоят из 2-3 молекул воды, однако эти кластеры весьма неустойчивы. Анализ процесса бомбардировки показывает, что со временем они распадаются и образуются отдельные молекулы воды, которые распыляются в разных направлениях. Отметим, что при бомбардировке плёнки ионами  $Ar^+$  с  $E_0=700\text{эВ}$  распыляются также атомы  $Au$ , что не наблюдается при  $E_0=400\text{эВ}$ .

Представленные результаты показывают, что атомы подложки также очень чувствительны к изменениям значений начальной энергии падающих частиц. Увеличения начальной энергии приводит к образованию больших каскадов столкновения внутри подложки. Происходит деформация подложки, вследствие которой на поверхности подложки наблюдаются некоторые изменения, а именно: на поверхности появляются дефекты в виде атомных ступенек и трещин.

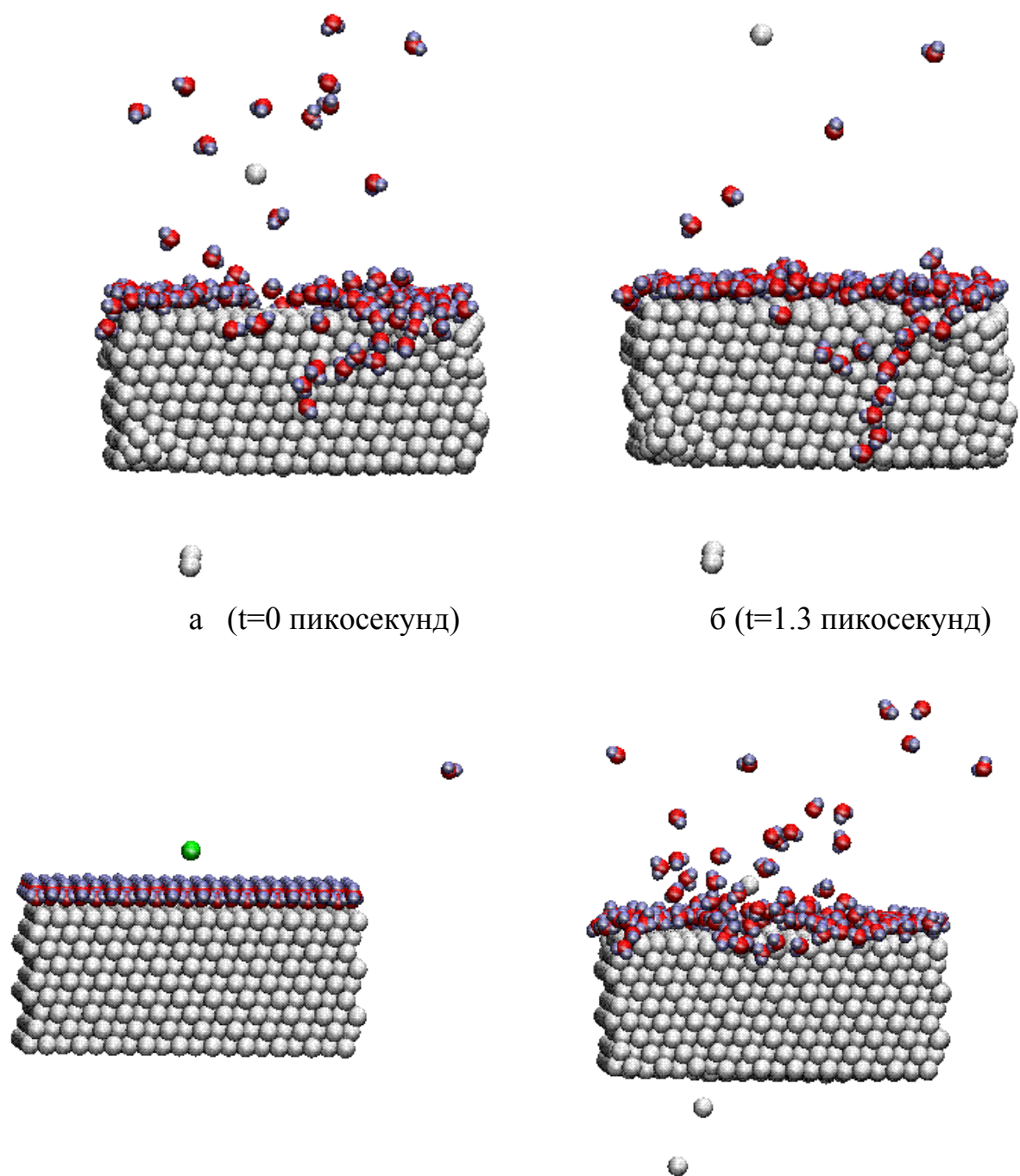
Далее описан процесс бомбардировки при нормальном падении иона  $Ar^+$  с начальной энергией  $E_0=400\text{эВ}$  и  $E_0=700\text{эВ}$  на поверхность  $Au(110)$ , покрытую 8-ю слоями молекул воды. Продолжительность процесса равна  $t=5$  пикосекунд. В случае  $E_0=400\text{эВ}$  столкновения в основном происходят с пленкой льда, а подложка не подвергается сильному изменению.

Отметим, что в подложке наблюдается один каскад, направленный в самый нижний слой под углом к нормали. На плёнке льда наблюдается обрыв в области столкновения падающей частицы. Увеличение значений начальной энергии иона (при  $E_0=700\text{эВ}$ ) приводит к проникновению иона вглубь подложки и образованию множества дефектов внутри нее. Картина процесса при начальной энергии иона  $E_0=400\text{эВ}$  представлены на рис.5.

Анализ этого процесса показывает, что ион после столкновения с плёнкой воды, проникая через неё, разрушает её структуру в местах, близко расположенных к месту столкновения. Также показано, что падающий ион на своем пути выбивает некоторые атомы со своих мест. В нижних слоях

в ( $t=3.7$  пикосекунд)

г ( $t=4.7$  пикосекунд)



**Рис.4. Процесс бомбардировки поверхности  $Au(111)$ , покрытой двумя слоями молекул воды, ионами  $Ar^+$  при  $E_0 = 400$  эВ**

подложки наблюдается торможение иона, причём и здесь происходит выбивание атомов с их рядов. Перемещение падающего иона прекращается между 6-м и 7-м слоями. Именно на этих участках в основном развиваются



каскады столкновения сразу в нескольких направлениях. Следует отметить, что в этом случае атомы, расположенные в нижних краях подложки, покидают её. Этот процесс происходит при падении первой частицы, а следующие частицы могут очень легко удалить слои плёнки воды.

Приведены масс-спектры распыленных частиц при бомбардировке ионами  $Ar^+$  плёнки льда на поверхности металла. Показано, что полученный масс-спектр содержит наиболее интенсивный пик, который образован молекулами воды. Далее наблюдаются пики молекулярных кластеров, которые содержат в своём составе 2, 3, 5, 6, 7 и 8 молекул воды. В более интенсивный пик дают вклад пики кластеров, которые состоят из 2-х и 6-ти молекул.

Следует отметить, что с увеличением значения начальной энергии образуются более тяжелые кластеры, которые можно регистрировать с помощью масс-спектрометров.

Рассчитаны распределения кинетической энергии распыленных молекул воды с поверхности  $Au(111)$  покрытой пленкой воды с 8-ю слоями, при бомбардировке ионами  $Ar^+$  с начальной энергией  $E_0=400$  эВ и 700 эВ (рис.6). Показано, что во всех случаях наблюдается пик с энергией меньшей 1 эВ. Этот пик образуют молекулы воды, покинувшие поверхность в виде изолированных молекул, т.е. в процессе простой десорбции молекул. Зная интенсивность этого пика, можно оценить коэффициент распыления молекул воды. Интенсивность распределения плавно уменьшается и стремится к нулю. Эта часть распределения появляется вследствие распыления атомов золота и молекул воды, распыленных прямым их выбиванием при бомбардировке. Сравнения пиков при начальных энергиях ионов 400эВ и 700эВ, показывает, что при 700 эВ распыление атомов подложки более интенсивно, чем в случае  $E_0=400$  эВ.

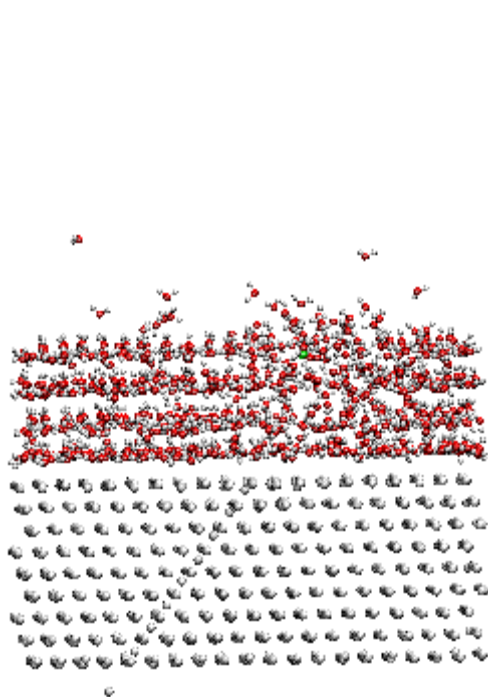
Таким образом, при распылении плёнки льда с энергиями бомбардирующих частиц меньше 1кэВ, в масс-спектре распылённых частиц наблюдаются пики, относящиеся к молекулам и кластерам плёнки, а также атомам подложки.

**В шестой главе** представлены закономерности распыления плёнки льда в виде ионных кластеров.

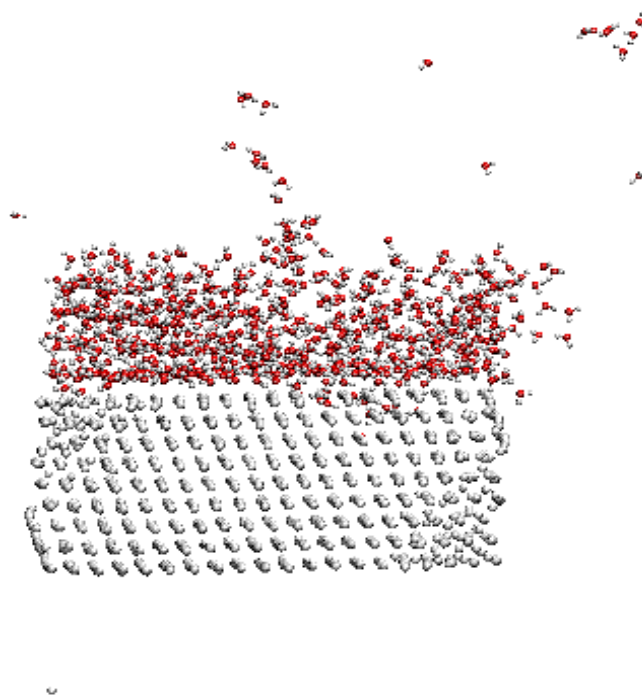
Приведены результаты исследования процесса распыления пленки воды, в составе которой существует адсорбированный ион  $Na^+$ . Этот процесс представляет собой весьма интересный механизм распыления молекул воды и атомов золота в виде тяжелых кластеров. Ион натрия, расположенный внутри пленки, образует ионные связи с её молекулами. Эти связи в первую очередь зависят от заряда иона, т.е. если ион положительный, то вокруг него скапливаются отрицательные компоненты молекул, или наоборот.

в (t=0.5 пикосекунд)

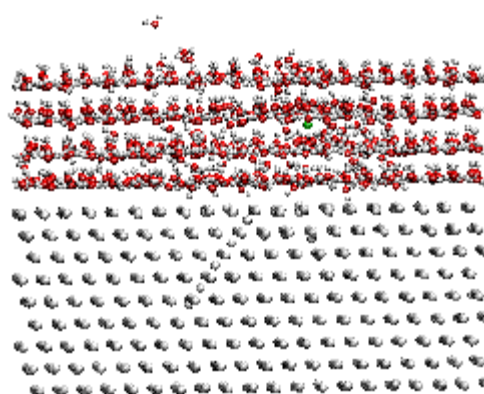
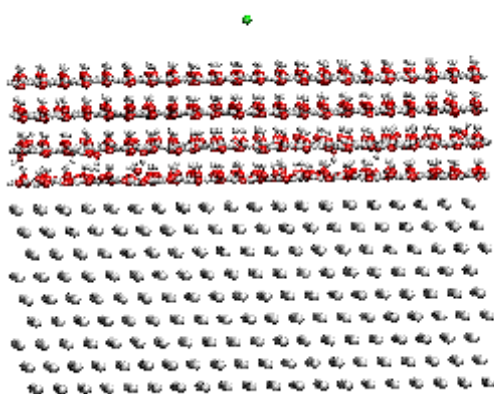
г (t=4.5 пикосекунд)



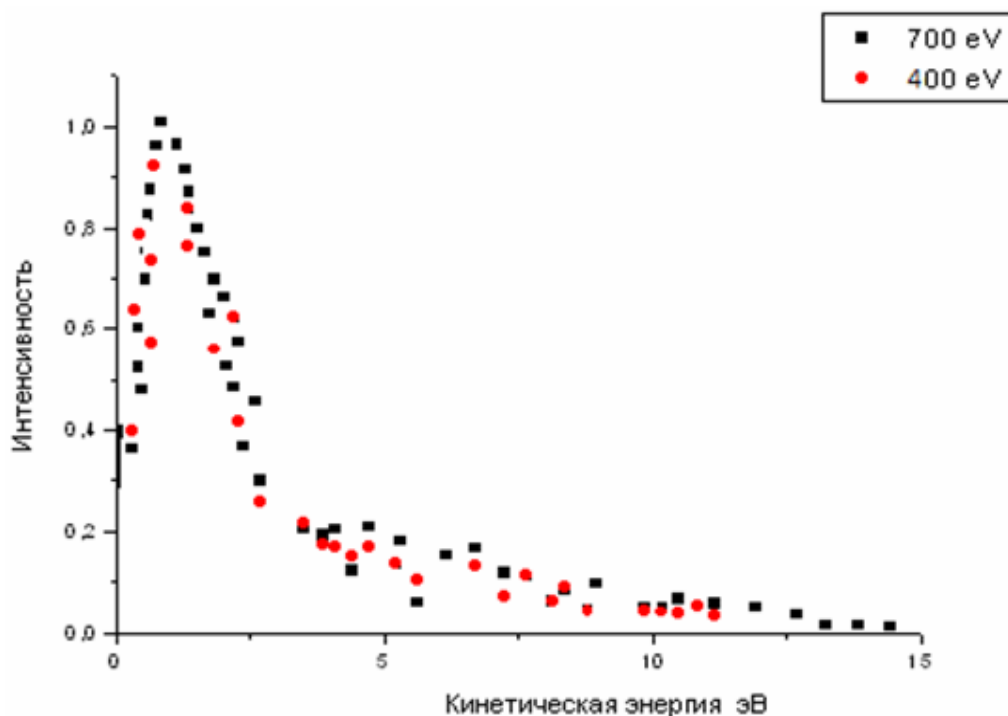
а ( $t=0$  пикосекунд)



б ( $t=0.25$  пикосекунд)



**Рис.5. Визуальный процесс бомбардировки при нормальном падении иона  $Ar^+$  с начальной энергией  $E_0=400$  эВ на поверхность  $Au(111)$ , покрытую 8-ю слоями молекул воды**



**Рис.6. Распределения кинетической энергии распыленных молекул воды с поверхности  $Au(111)$ , покрытым пленкой воды с 8-ми слоями при бомбардировке ионами  $Ar^+$  с начальной энергией  $E_0=300$  эВ и 700 эВ**

В наших расчетах был рассмотрен случай, когда ион  $Na^+$  находится в верхней части пленки, состоящей из четырех слоёв льда на поверхности  $Au(111)$ , которая состоит из 1980 атомов, расположенных в девяти слоях.

Система была сбалансирована в течение 25 пикосекунд, причём внешние воздействия в данном случае не учитывались. Это время достаточно для того, чтобы ион приблизился к поверхности пленки и образовал ионные связи с атомами кислорода. В течение данного времени ион натрия полностью располагался в первом верхнем слое пленки.

Визуально изучено распыление поверхности  $Au(111)$ , покрытой ионизированной пленкой воды, при бомбардировке ионами  $Ar^+$  с начальной энергией  $E_0=700$  эВ. Процесс взаимодействия мишени с падающей частицей продолжался в течение времени  $t=5$  пикосекунд. При бомбардировке этой поверхности наряду с малыми кластерами воды образуется ионный кластер воды, состоящих из иона  $Na^+$  и 45-65 молекул воды. Следует отметить, что этот большой сферический кластер не является устойчивым. Наши дальнейшие расчеты показали, что молекулы воды покидают ионный кластер при достижении времени столкновения порядка 3 пикосекунд. В течение этого промежутка времени кластер становится более устойчивым. Дальнейшие расчеты показали, что наблюдаемый ионный кластер в течение

30 пикосекунд без учёта влияния мишени не распадается, что также свидетельствует об его устойчивости.

Получены и проанализированы масс-спектры распылённых частиц с поверхности ионизированных многокомпонентных плёнок, а также распределения кинетических энергий распылённых частиц с поверхности  $Au(111)$ , покрытой 4-мя слоями льда, который содержит в своём составе ионы  $Na^+$  при бомбардировке ионами  $Ar^+$  при нормальном падении. Начальными значениями энергии иона были выбраны  $E_0=400$  эВ и  $E_0=700$  эВ.

Проведенные расчеты показали, что при начальной энергии  $E_0=400$  эВ наблюдается разрушение слоёв льда, а подложка в данном случае не подвергается сильному разрушению (рис.7). Следует отметить, что в этом случае падающая частица не проникает внутрь подложки. Как было описано в предыдущих главах, именно в этом случае образуется большой ионный кластер. Масс-спектр можно разделить на 3 группы. Первая группа – молекулы воды и молекулярные кластеры, содержащие в своём составе от 2-х до 5-ти молекул воды. Следует отметить, что самый высокий пик приходится на изолированные молекулы  $H_2O$ , остальные пики принадлежат молекулярным кластерам, которые расположились в масс-спектре до 100 а.м. е.

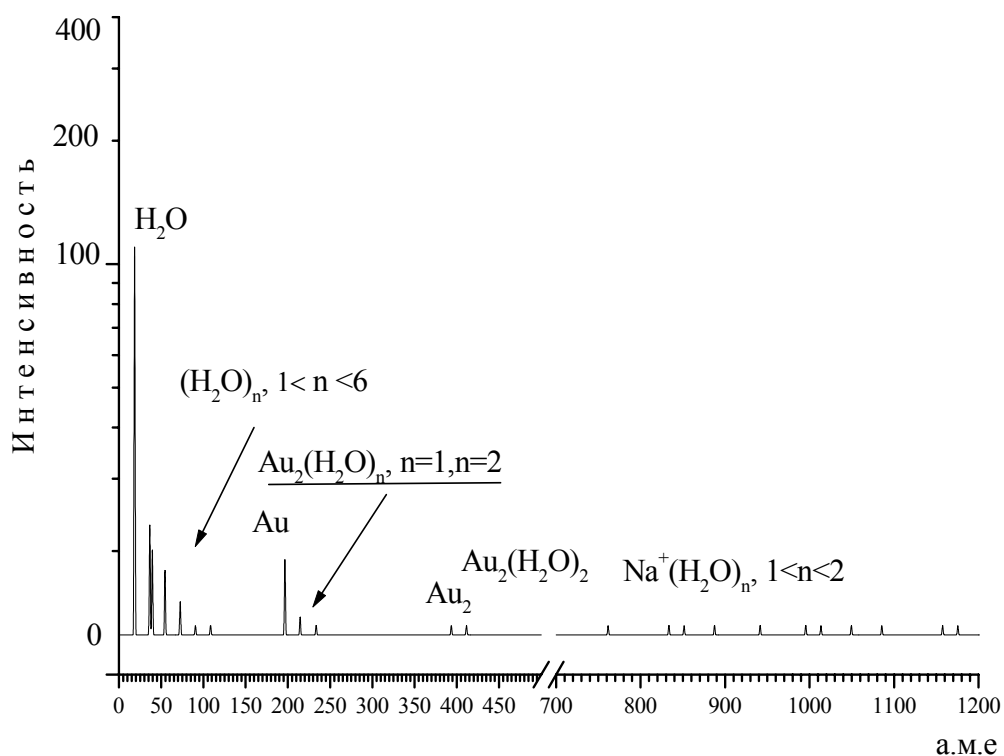
Вторая группа пиков, расположенных в диапазоне 200 - 240 а.м.е, относится к распылённым кластерам, которые содержат атом золота и 1-2 молекулы воды. Следующие пики, которые образовались вблизи 400 а.м.е, относятся к распыленным кластерам, которые содержат 1-2 молекулы воды с 2-мя атомами золота. Показано, что атомы золота распыляются при столкновении падающих частиц с открытой частью подложки. При распылении плёнки эти атомы захватывают 1 или 2 молекулы воды, так как между ними существует определённые связи.

Третья группа пиков принадлежит к ионным кластерам, имеющим диапазон в масс-спектре от 820 до 1176 а.м.е. Из анализа траекторий падающих частиц видно, что не все траектории образуют эти ионные кластеры.

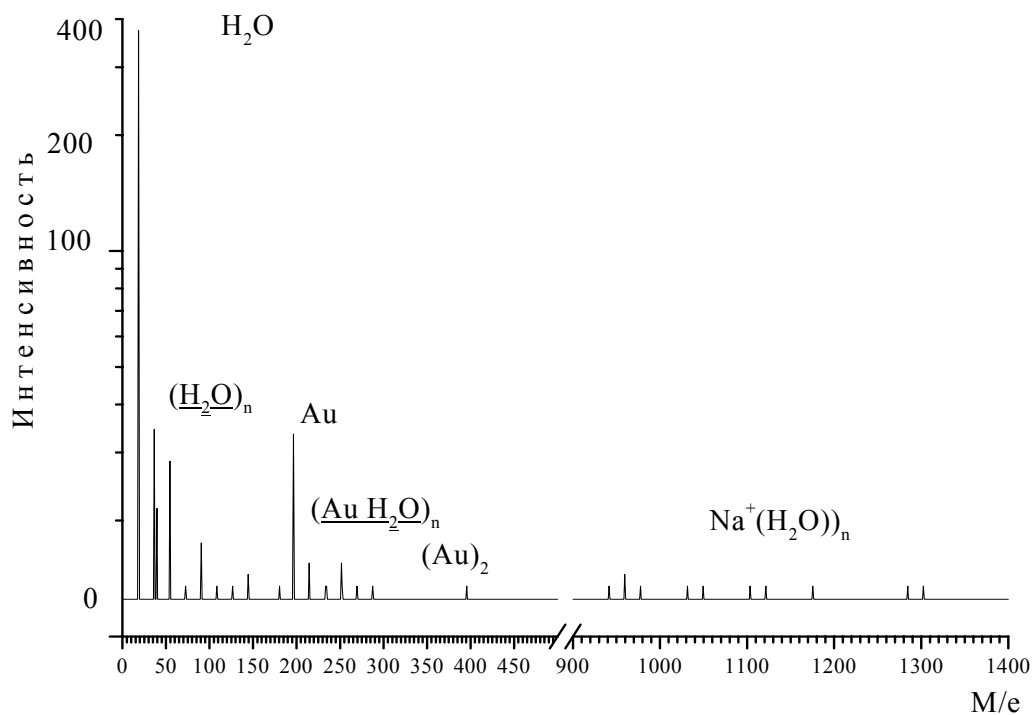
На рис.8. представлен масс - спектр распылённых частиц при прежних условиях, но с начальной энергией  $E_0=700$  эВ. В этом случае рассмотрено 15 траекторий падающих частиц. Из данного масс-спектра видно, что существует разделение кластеров на группы в диапазоне 408 - 920 а.м.е. между объединившимися первыми двумя группами и третьей.

Интенсивность кластеров, состоящих из 2-3-х молекул воды, больше по сравнению с предыдущим случаем. При 392 а.м.е. образовался пик вследствие распыления кластеров, содержащих 2 атома золота.

В конце масс-спектра образованы пики за счёт частиц с большими атомными массами - большого ионного кластера.



**Рис.7. Масс-спектр распылённых частиц при нормальном падении ионов  $Ar^+$  на поверхность  $Au(111)$ , покрытой 4-мя слоями плёнки льда при  $E_0=400$  эВ**



**Рис.8. Масс-спектр распылённых частиц при нормальном падении ионов  $Ar^+$  на поверхность  $Au(111)$ , покрытой 4-мя слоями плёнки льда при  $E_0=700$  эВ**

Таким образом, полученные результаты позволяют сделать следующие выводы:

Во-первых, в первом случае, когда ион находится на верхнем слое плёнки, наблюдается процесс распыления в 2 раза более быстрый, чем в случае, когда ион натрия находится внутри плёнки.

Во-вторых, более заметная деформация в подложке происходит в том случае, когда падающий ион проникает внутрь нее.

В-третьих, в случае, когда ион легирован внутри плёнки, образуется более массивный ионный кластер (65 молекул воды и ион  $Na^+$ ).

## ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В результате выполненных исследований установлено влияние дефектных структур на процесс рассеяние ионов, распыления токих пленок, выявлена взаимосвязь между динамикой изменения атомной структуры под действием ионной бомбардировки двухкомпонентных монокристаллов, легированных ионами. Развита методы поверхностной диагностики состава и структуры монокристаллов, подвергнутых ионной бомбардировке. Получены следующие научные результаты:

1. Разработаны и модифицированы алгоритмы и программы компьютерного моделирования процессов рассеяния ионов с идеальной и дефектной поверхностей монокристаллов *GaP(100)* и на плёнки льда, в модели блока атомов, включающих до 50-и слоёв, основанные методе приближений парных столкновений, а также распыления плёнки льда на поверхности *Au(111)*, основанные на методе молекулярной динамики.

2. Рассчитаны зависимости коэффициента рассеяния ионов поверхностью двухкомпонентных монокристаллов *GaP(100)* и льда от угла скольжения. Показано, что зависимость коэффициента рассеяния ионов от угла скольжения имеет двухпиковую структуру, и между этих двух интенсивных пиков наблюдаются уменьшение значение коэффициента рассеяния, которое можно объяснить большим количеством отраженных частиц на большие углы рассеяния и локализацией ионов в кристалле.

3. Исследовано малоугловое рассеяния ионов  $Ne^+$  и  $Ar^+$ , отражённых идеальной поверхностью *GaP(100)* и льда. Показано, что сравнения рассчитанных спектров с соответствующими экспериментально измеренными спектрами будут полезными для определения степени нейтрализации отраженных частиц, так как при расчётах возможно влияния изменения как геометрических параметров поверхностных полуканалов, так и сорт его составляющих атомов. Установлено, что в спектре наряду с пиками рассеянных частиц с атомной цепочки и полуканала, наблюдаются пики соответствующие ионам, отраженным с глубинных слоев приповерхностной области монокристаллов и определены их вклады в спектр. Рассчитаны коэффициенты столкновения, пробеги, неупругие и

упругие потери энергии отраженных частиц. Показано, что доля неупругих потерь энергии отраженных частиц больше, чем упругих, которое обусловлено многократными столкновениями ионов внутри кристалла.

4. Исследован процесс деканалирования ионов при малоугловой падений ионов  $Ne^+$  и  $Ar^+$  на поверхность монокристаллов  $GaP(100)$  и льда с дефектной структурой. Показано, что увеличение число деканализованных ионов обусловлены точечными дефектами, локализованными в приповерхностной области монокристаллов, а уменьшения концентрации дефектов ниже приповерхностной области (более 50 слоев) приводит к увеличению числа каналированных ионов с зигзагообразной траекторией, и они локализуются в кристалле, так как их энергия не достаточно для отражения с кристалла. Определены энергии, пробеги, потерь энергии деканализованных частиц приповерхностной области дефектных монокристаллов  $GaP(100)$  и льда.

5. Исследован процесс распыления поверхности  $Au(111)$ , покрытой двумя слоями молекул воды, при бомбардировке ионами  $Ar^+$  с  $E_0=400\text{эВ}$  и  $E_0=700\text{эВ}$ . Впервые показано, что при бомбардировке ионами  $Ar^+$  с  $E_0=400\text{эВ}$  пленка льда распыляется в виде молекул воды, и молекулярных кластеров, которая состоят из 2-3 молекул воды. Большое количество движущих молекул и кластеров воды на поверхности подложки обусловлена малым значением энергии бомбардирующих частиц. Обнаружено, что при бомбардировке ионами  $Ar^+$  с  $E_0=700\text{эВ}$  число распыленных молекул и размер кластеров воды (2-6 молекул воды) увеличились, а также наблюдалось распыление атомов золота, которые имеют энергии больше чем поверхностная энергия подложки.

6. Исследован процесс распыления поверхности  $Au(111)$ , покрытой восемью слоями молекул воды, при бомбардировке ионами  $Ar^+$  с  $E_0=400\text{эВ}$  и  $E_0=700\text{эВ}$ . Обнаружено сильное различие по сравнению со случаем с двумя слоями пленки воды. Показано, что при начальной энергии бомбардирующих частиц, равной  $E_0=400\text{эВ}$  происходит распыление только адсорбированной пленки льда в виде молекул и кластеров воды (до 6-и молекул). На подложке образуется один каскад столкновения, который, в конечном счете, выбивает один атома  $Au$  с нижней части подложки. При бомбардировке ионами  $Ar^+$  с  $E_0=700\text{эВ}$  обнаружено разрушение структуры подложки и пленки льда, которое можно объяснить образованием множества каскадов столкновения. Установлено, что в этом случае также образуются кластеры воды, состоящие из 2-6 молекул, и интенсивность их выходов возрастает.

7. Рассчитаны и проанализированы масс-спектры распылённых частиц при бомбардировке двух слоёв воды, покрывающих  $Au(111)$ , ионами  $Ar^+$  с  $E_0=400\text{эВ}$  и  $700\text{эВ}$ . Рассмотрено 450 траектории падающих ионов при получении масс-спектров. Показано, что в масс-спектре образуются пики относящиеся к молекулам, кластерам и атомам подложки. При  $E_0=400\text{эВ}$

распыленные кластеры воды, образованные вблизи поверхности, разлагаются на мелкие кластеры воды (из 2-х молекул). В случае  $E_0=700$  эВ молекулярные кластеры, состоящие из 2-6 молекул воды, становятся устойчивыми из-за большей значений начальной энергии падающих частиц, и они образуют соответствующие пики в масс-спектре.

8. Рассчитаны масс-спектры распылённых частиц при бомбардировке восьми слоёв воды, покрывающих  $Au(111)$ , ионами  $Ar^+$  с  $E_0=400$  эВ и 700 эВ. Показано, что масс – спектре образуются пики молекул и кластеров воды (2-6 молекул воды) при  $E_0=400$  эВ, а в случае  $E_0=700$  эВ наряду пиками молекул и кластеров воды (2-6 молекул воды) образуется пик атомов  $Au$ , который можно объяснить распылением атомов верхних слоев подложки. Впервые установлено, что пик атомов золота в масс-спектре наблюдается при значениях начальной энергии бомбардирующих ионов  $Ar^+$  больше 600 эВ.

9. Исследован процесс распыления плёнки льда с легированными ионами ( $Na^+, Li^+, Cs^+, F^-, Cl^-, I^-$ ), покрывающей поверхность  $Au(111)$ . Установлено, что наблюдается распыление большого ионного кластера из-за полярности льда при ионной бомбардировке. Размер распылённого ионного кластера зависит от расположения иона в определенных слоях плёнки. Впервые показано, что образуется более массивный ионный кластер, когда легированный ион находится между слоями льда.

10. Получены масс-спектры распылённых частиц при бомбардировке ионами  $Ar^+$  пленки льда с легированными ионами, покрытой на поверхность  $Au(111)$ . Обнаружено, что массивный ионный кластер, состоящие из легированного иона и молекул воды, наблюдается в масс-спектре. Показано, что коэффициент распыления положительного кластера, около 1,5 раза больше чем отрицательно-заряженные кластеры. Это обусловлено зарядом легированного иона, который может образовать связь с атомами водорода (более слабая связь) или кислорода (более сильная связь). Полученные кинетические распределения распыленных частиц характеризуются единственным интенсивным пиком в области 1 эВ. Это объясняется тем, что большое количество распыленных кластеров воды имеют энергию, лежащую в этой области.

В диссертации обоснована и решена крупная научная проблема- рассеяние ионов  $Ne^+$  и  $Ar^+$  поверхностями монокристаллов льда и  $GaP(100)$  (методом приближения парных столкновении) и распыление плёнки льда (методом молекулярной динамики) при бомбардировке ионами  $Ar^+$ .

Решение данной проблемы имеет существенное научное и прикладное значение для анализа элементного состава и структуры поверхностей монокристаллов льда и  $GaP(100)$ , а также для развития промышленных технологий, связанных с необходимостью чистки поверхностей и роста кристаллов.



## СПИСОК ИСПОЛЬЗОВАННОЙ ЛИТЕРАТУРЫ

1. Кишиневский Л.М. Сечения неупругих атомных столкновений // Изв. АН СССР. Сер.физ. –Москва,1962.-Т.26.-С.1410.
2. Парилис Э.С, Тураев Н.Ю, Умаров Ф.Ф, Нижная С.Л.Теория рассеяния атомов средних энергий поверхностью твердого тела.-Ташкент,1987.212с.
3. Parilis E.S., Kosshinevsky L.M., Turaev N.Yu.et al. Atomic collisions on solid surfaces. Amsterdam: North-Holland, 1993.664p.
4. Tildesley A. Computer simulation of liquids//Oxford University Press, - Oxford,England,1989.126p.
5. Ponder B., Tinker J.W. Software tools for molecular design, Version 3.8// Washington University School of Medicine Press,-Washington, 2000.147p.
- 6.Berendsen H., Postma J., Van Gunsteren W. F., Hermans J. In Intermolecular forces// Pullman, B., Ed. Reidel. Dordrecht, –Amsterdam,1981.
7. Garcia E., Glaser M. A., Clark N. A., Walba D.M. HFF: A force field for liquid crystal molecules// J. Molec. Struc.-USA,1999.V.464.-P.39-48.
8. Lemak A.S and Balabaev N.K. A comparison between collisional dynamics and Brownian dynamics // Molecular Simulation,-North-Holland.1995,15,-P. 223-231.
9. Шноль Э.Э., Гривцов А.Г. и.др., Метод молекулярной динамики в физической химии, -М. Наука, 1996. 268с.
10. DePristo, A. E. In recent advances in density functional theory: Part 2 Methodology; Chong, D., Ed.; World Scientific: River Edge, -NJ, 1995.341p.
11. Ciccotti G., Ferrario M.,Ryckaert J. Molecular dynamics of rigid systems in cartesian coordinates.a general formulation//Molec. Phys., -USA,1982.V.47.-P.1253-1264.

## СПИСОК ОПУБЛИКОВАННЫХ РАБОТ ПО МАТЕРИАЛАМ ДИССЕРТАЦИИ

### *Статьи в научных журналах*

- 1.Джурахалов А.А., Кутлиев У.О., Хафизов И.И. Перефокусировка потока рассеянных ионов и распыление поверхности GaP(100) при скользящем падении//Известия РАН. серия физическая.-Москва.2000, - Т.64,№4.-С.805-809.
2. Джурахалов А.А., Каландаров Б.С., Кутлиев У.О. Перефокусировка потока частиц, отраженных поверхностными полуканалами монокристаллов//Поверхность.№4. –Москва,2002.-С.101-104.
3. Dzhurakhalov A.A., Kutliev U.O. Peculiarities of  $\text{Ne}^+$  ion scattering from the GaP(100)surface at grazing incidence//Surface investigation.-Singapore, 2000.-vol.15, -P. 705-710.

4. Dzhurakhalov A.A., Kalandarov B.S., Kutliev U.O., Umarov F.F. The ion dechanneling mechanism at grazing scattering on the surface atomic steps// IEEE Publishing. 0-7803-6462-7//00. –New York,2000.-P.217-219.
5. Dzhurakhalov A.A., Kutliev U.O., Rasulov A. Atomic scale analysis of defect structures in single crystals by ion scattering and channeling// Engineering Mechanics.Amsterdam, 2004, N5.-Vol.11.-P. 1-4.
6. Кутлиев У.О., Каландаров. Б.С., Джурахалов. А.А., Курбонов М., Умаров Ф.Ф. Рассеяние ионов на атомных ступеньках поверхности GaP (100) // Поверхность. -Москва,2002.№ 4.-С.118-120с.
7. Dzhurakhalov A., Kutliev U.O., Kalandarov B.S., Kurbonov M., Dreysse H. Study of ion scattering and dechanneling from surface defect structure by computer simulation// Computational materials science.-Amsterdam, 2002,24.-P.111-116.
8. Dzhurakhalov AA., Kutliev U.O., Umarov F.F. Low energy ion scattering by atomic steps on the single crystal surface// Radiation Effects & Defects in Solids.-London, 2004, -Vol.159.-P.293-299.
9. Кутлиев У.О. Исследование распыления пленки льда методом молекулярной динамики// Объединенный научный журнал.–Москва, 2007. №18.С.55-58.
10. Kutliev U.O. Sputtering of ice films by the bombardment of  $Ar^+$  ions// Computational materials science. -Amsterdam. 2008. –Vol.43.P.700-703.
11. Wojciechowski I.A., Kutliev U.O., Sun Sh., Szakal C., Winograd N., Garrison B. Emission of ionic water clusters from water ice films bombarded by energetic projectiles//Applied surface science. –New York.2004. -Vol.231-232.P. 72-77.
12. Кутлиев У.О. Исследование распыления кластеров воды методом молекулярной динамика //Научно-Технический журнал.-Фергана. 2005,№2. –С.21-24.
13. Dzhurakhalov A.,Kutliev U.O.,Kalandarov B.S. Umarov F.F.Computer simulation of Ne ions scattering from the Cu(100) and GaP(100) surfaces at the grazing incidence//Uzbek Journal of Physics .-Tashkent. 2007.-Vol.9.N5-6.P.317-324.
14. Kutliev U. Investigation of sputtering ice films be the molecular dynamics methhod//Uzbek Journal of Physics. -Tashkent.2009.-Vol.11.N5-6.P.117-121.

#### ***Труды международных конференций***

15. Кутлиев У.О. Исследование распыления ионных кластеров: Метод молекулярной динамики// XVIII Межд.конф. Взаимодействие ионов с поверхностью(ВИП-2007).Москва,2007. -С.164-167.
16. Кутлиев У.О. Investigation of sputtering ionic clusters: molecular dynamic simulation// Ion-surface interactions (ISI-2007).-Moskow,2007.-P.164-167.

17. Кутлиев У.О. Исследование распыления плёнки льда методом молекулярной динамики// XVII Межд.конф. Взаимодействие ионов с поверхностью (ВИП-2005). –Москва,2005.-С.133-135.

18. Кутлиев У.О. Исследование распыления многокомпонентных материалов методом молекулярной динамики// XVII Межд.конф. Взаимодействие ионов с поверхностью (ВИП-2005). -Москва,2005. -С.130-132.

19. Кутлиев У.О., Гаррисон.Б., Каландаров. Б.С, Курбонов.М. Распыление многокомпонентных материалов при ионной бомбардировке //XVI Межд.конф. Взаимодействие ионов с поверхностью (ВИП-2003).-Москва,2003.- С.134-137.

20. Kutliev U.O., Kalandarov B.S. Emission of water clusters: Molecular dynamic simulation//Int.conf. «Modern problems of nuclear physics» - Tashkent,2006.-P.204-205.

21. Kutliev U.O. Low energy ion scattering as a tool of investigation of defect surfaces// VII-th International conference «Modern problems of nuclear physics», -Tashkent. 2009.-P.134.

22. Кутлиев У.О., Бекжанова И., Сабилова Б. Исследования процесс рассеяния ионов с дефектных поверхностей многокомпонентных материалов // Труды XIX Международной конференции ВИП-2009, I-Том, -Москва 2009. С.218-221.

23. Dzhurakhalov A.A., Kutliev U.O., Kalandarov B.S. Computer simulation of  $\text{Ne}^+$  and  $\text{Ar}^+$  ions scattering from the defect surfaces at grazing incidence //Int.conf. Modern problems of nuclear physics. -Tashkent,2006. - P.173-174.

24.Джурахалов. А.А., Кутлиев У.О., Умаров Ф.Ф., Каландаров. Б.С , Курбанов М. Исследования скользящего рассеяния ионов дефектной поверхности соединений типа  $\text{A}^{\text{III}}\text{B}^{\text{V}}$ // XV Между конф. Взаимодействие ионов с поверхностью (ВИП-2001). Москва,2001. -С.148-150.

#### ***Материалы и тезисы докладов научных конференций, симпозиумов и семинаров***

25. Kutliev U.O., Dzhurakhalov A.A., Kalandarov B.S. The orientational effects under grazing incidence ion on the GaP(100) surface// 47<sup>th</sup> International symposium,Boston, -USA, 2000.-P.101.

26. Kutliev U.O., Dzhurakhalov A.A., Kalandarov B.S and Kurbanov M.K. Low energy ion scattering from GaP(100) surface at the grazing incidence// Inter.conf. on photonic, electronic, and atomic collisions. (ICPEAC-XXII).- Santa-Fe,USA,2001.-P. 661.

27. Kutliev U.O., Kalandarov B.S. The investigation of the semiconductors surfaces by the method of the low energy ion scattering//11<sup>th</sup> International conference on solid surfaces(AVS 48th International symposium). – Boston,USA,2001. SS1-TuP6.

28. Dzhurakhalov A.A., Kutliev U.O., Umarov F.F., Kurbonov M.K. The investigation of the effect ion refocusing by computer simulation//7<sup>th</sup> European conference on accelerators in applied research and technology.-UK,2001.-P41.
29. Джурахалов А.А., Кутлиев У.О. Особенности рассеяния ионов ионов  $\text{Ne}^+$  поверхностью GaP(100) при скользящем падении //Тезис.докл.XXX международной конференции по физике взаимодействия заряженных частиц с кристаллами. -Москва, 2000г.-С.88.
30. Джурахалов А.А., Каландаров Б.С., Кутлиев У.О. Перефокусировка потока частиц, отраженных поверхностными полуканалами монокристаллов//Тезис.докл.XXX международной конференции по физике взаимодействия заряженных частиц с кристаллами. -Москва, 2000г.-С.89.
31. Kutliev U.O., Dzhurakhalov A.A., Kalandarov B.S. Low energy ion scattering from the semiconductor surfaces at the grazing incidence// XXIII Inter.conf.(ICPEAC-2003).-Stochgolgolm,Sweden.2003.  
<http://atomlx04.physto.se/~icpeac/>
32. Dzhurakhalov A.A., Kutliev U.O., Garrison.B.J., Kalandarov B.S. The investigation of low energy ion scattering from the semiconductor surfaces by computer simulation//Inter.conf.Ion implantation technology (IIT 2002).-USA,2002. TU-POSTER-48.
33. Dzhurakhalov A.A., Garrison B.J., Kutliev U.O., Kalandarov B.S., Umarov F.F. Computer simulation of  $\text{Ne}^+$  ions scattering from the GaP(100)surface at the grazing incidence//Intern.Conf. COSIRIES- 2002.-Drezden,Germany,2002.O17.
34. Dzhurakhalov A.A., Kutliev. U.O., Kalandarov B.S. Study of process of the dechanneling ions from the defect semiconductor surfaces at the grazing incidence//14<sup>th</sup> International Conference IBMM04.-Michigan,USA. 2004.(sep.9) <http://www2.avs.org/chapters/nccavs/ibmm/schedule.pdf>
35. Джурахалов А.А., Каландаров Б.С., Кутлиев У.О. Скользящее рассеяние ионов ступенчатой поверхностью двухкомпонентных монокристаллов //Респ.конф. UzPEC IV, -Ташкент,2005.-С.91.
36. Kutliev U.O., Kalandarov B.S. Study of process of the dechanneling ions from the defect semiconductor surfaces at the grazing incidence// 32<sup>nd</sup> Course of the international school of solid state physics, Radiation effects in solids. -Erice,Italy,2004. -P.67. <http://www.lanl.gov/mst/radeffects/>
37. Kutliev U.O., Dzhurakhalov A.A., Umarov F.F and Kalandarov B.S. The investigation of lattice defects by ion scattering spectroscopy //Microscopy of semiconducting materials XII.-London,UK, 2001-P1-28
38. Dzhurakhalov A.A., Kutliev U.O., Umarov F.F., Kalandarov B.S. The ion dechanneling mechanism at grazing scattering on the surface atomic steps// XIII th international conference (IIT2000).-Alphach,Austria, 2000.-P.86.

39. Dzhurakhalov A.A., Kutliev U.O., Rasulov A. M. Atomic scale analysis of defect structures in single crystals by ion scattering and channels// Inter.conf. MSMF-4 in Brno, -Czech Republic,2004.-P.22.

40. Джурахалов А.А., Каландаров Б.С., Кутлиев У.О. Скользящее рассеяние ионов ступенчатой поверхностью GaP (100)//Тезис докл. XXXIV международной конференции по физике взаимодействия заряженных частиц с кристаллами. –Москва,2004г. -С.98

41. Dzhurakhalov A.A., Kutliev U.O., Kalandarov B.S. Investigation of ion scattering from the semiconductor defect surfaces at the grazing incidence//15th International Conference on Ion Beam Modification of Materials IBMM 2006.- Taormina,Italy,2006.- P.481 <http://209.85.229.132/search?q=cache:aUIETvhMk-IJ:ibmm.imm.cnr.it/forms/Poster2.pdf+Kutliev+IBMM&hl=uz&ct=clnk&cd=1&gl=uz>.

42. Dzhurakhalov A.A., Kutliev U.O., Kalandarov B.S., Kurbonov M., Dreyse H. Study of ion scattering and dechanneling from surface defect structure by computer simulation//EMR-S 2001. Spring Meeting. – Stasbourg,France, 2001.A-III.4 [http://209.85.229.132/search?q=cache:S98PhAIDuZcJ:www.emrs-strasbourg.com/files/pdf/2001\\_SPRING/2001%2520Symposium%2520A%2520Programme.PDF+U.O.Kutliev&hl=uz&ct=clnk&cd=1&gl=uz](http://209.85.229.132/search?q=cache:S98PhAIDuZcJ:www.emrs-strasbourg.com/files/pdf/2001_SPRING/2001%2520Symposium%2520A%2520Programme.PDF+U.O.Kutliev&hl=uz&ct=clnk&cd=1&gl=uz).

43. Kutliev U.O. Study of emission of water clusters from ice films//14<sup>th</sup> International Conference IBMM04.-Michigan,2004. -P.486.  
<http://www2.avs.org/chapters/nccavs/ibmm/schedule.pdf>.

44. Wojciechowski I.A., Kutliev U.O., Garrison B.J., Kalandarov B.S. The investigation of the emission of water clusters from ice// European Conference on Applications of Surface and Interface Analysis.-Vienna, 2005. -P.77.

45. Kutliev U.O., Kalandarov B.S., Atajanova S. Investigation of water cluster sputtering: the MD simulation//The European materials conference (E-MRS 2005) –Strasbourg,France,2005.-A/P1.

46. Kutliev U.O. Study of emission of water clusters from ice films// Inter.conf.ICACS 21. –Torino,Italy,2004.POEPHO2.

47. Kutliev U.O. Sputtering of water clusters from ice films bombardment by fast projectiles: molecular dynamics simulation// XXVI Int.conf. IBMM08. –Germany,2008. PA/PA01#153. [http://www.ibmm2008.org/frs\\_index.asp](http://www.ibmm2008.org/frs_index.asp)

48. Kutliev U.O. Investigation of sputtering of water molecules from ice films at the bombardment by Ar ions //15th International Conference on Ion Beam Modification of Materials IBMM 2006. -Taormina,Italy,2006. -P.480  
<http://209.85.229.132/search?q=cache:aUIETvhMk-J:ibmm.imm.cnr.it/forms/Poster1.pdf+Kutliev+IBMM&hl=uz&ct=clnk&cd=1&gl=uz>

49. Kutliev U. Molecular dynamics simulation of sputtering of surface metal covered by water films under low-energy Ar ion bombardment// Rep.conf. UzPEC -IV, -Ташкент, 2005.-С.95.

50. Kutliev U.O. Sputtering ice films at the bombardment by  $\text{Ar}^+$  ions // Inter.conf. ICTF14 & RSD.-Gent,Belgium,2008.[http://209.85.229.132/search?q= cache:zwd5prkZVRsJ:83.101.19.118/ICTF14/File/ICTF14%26RSD2008\\_PROGRAM.pdf+Kutliev+U.O&hl=uz&ct=clnk&cd=13&gl=uz](http://209.85.229.132/search?q=cache:zwd5prkZVRsJ:83.101.19.118/ICTF14/File/ICTF14%26RSD2008_PROGRAM.pdf+Kutliev+U.O&hl=uz&ct=clnk&cd=13&gl=uz)

51. Kutliev U.O., Kalandarov B.S. Formation of Au nanostructures and sputtering of ionic water cluster by method molecular dynamic simulation // Int.Conf. on Magnetic and superconducting materials (MSM2007), - Khiva,2007.-P.66.

52. Кутлиев У.О. Исследование распыления кластеров льда методом молекулярной динамики//Тезис докладов XXXIV международной конференции по физике взаимодействия заряженных частиц с кристаллами.-Москва,2004г. -С.99.

53. Kutliev U. Investigation of sputtering of ionic water clusters by method molecular dynamic simulation// Inter.conf IIT2006. –Boston,2006.-P.139.

<http://www.iit2006.org/program.pdf>

54. Kutliev U. Sputtering of ionic water at the bombardment by  $\text{Ar}^+$  // International conference on theoretical physics- Dubna-NANO2008.- Москва,2008. <http://theor.jinr.ru/~nano08/poster.html>

55. Kutliev U. Investigation of sputtering of atomic clusters at the bombardments by ar ions of the surface Au(111) covered by ice films// International conference on theoretical physics-Dubna-NANO2008. - Москва,2008. <http://theor.jinr.ru/~nano08/poster.html>

56. Кутлиев У.О. Влияние дефектов на рассеяния ионов при их скользящем падении на поверхность многокомпонентных материалов //Респ.конф. UzPEC V, -Ташкент,2009.-С.80.

57. Kutliev U.O., Sabirova B. Investigation defect structures by the method ion scattering // ECASIA-2009,Turkey. TEC-P-5 (544)+MO-PA-277.

## РЕЗЮМЕ

диссертации Кутлиева Учкун Отобоевича на тему: «Компьютерное моделирование процессов рассеяния ионов и кластерного распыления поверхностей монокристаллов GaP и льда при бомбардировке ионами  $\text{Ne}^+$  и  $\text{Ar}^+$ » на соискание ученой степени доктора физико-математических наук по специальности 01.04.04 – Физическая электроника.

**Ключевые слова:** компьютерное моделирование, распыление, рассеяние ионов, ионная имплантация, деканалирование, дефекты, кластер.

**Объекты исследования:** Объектом исследования являются закономерности распыления и рассеяния ионов при бомбардировке поверхности монокристалла ионным пучком.

**Цель работы:** Установление методом компьютерного моделирования механизмов и закономерностей процессов малоуглового рассеяния ионов идеальными и дефектными поверхностями двухкомпонентных монокристаллов GaP и пленок льда и кластерного распыления плёнок льда, покрывающих поверхности Au(111).

**Методы исследования.** Компьютерное моделирование, основанное на методах молекулярной динамики и приближения парных столкновений. Приближение парных столкновений используется для описания процессов рассеяния ионов поверхностью двухкомпонентных монокристаллов GaP(100) и пленок льда, а метод молекулярной динамики применяется для изучения процессов распыления плёнки льда, покрывающих Au(111).

**Полученные результаты и их новизна:** исследованы процессы деканалирования ионов при бомбардировке ионами  $\text{Ar}^+$  и  $\text{Ne}^+$  идеальных и дефектных поверхностей монокристаллов льда и GaP(100). Выявлены и объяснены особенности траекторий и потерь энергии ионов в монокристаллах, определены их пробеги.

Выявлены и подробно изучены эффекты деканалирования ионов и изучены траектории этих частиц при малоугловой ионной бомбардировке идеальных и дефектных монокристаллов.

Показано, что при низкоэнергетической ионной бомбардировке металлических поверхностей, покрытых плёнкой воды, имеющей имплантированные ионы, обнаружено распыление в виде больших кластеров, размеры которых зависят от расположения имплантированного иона. Рассчитаны коэффициенты распыления при бомбардировке ионами пленки льда, легированными положительными и отрицательными ионами.

**Практическая значимость:** созданы комплексы эффективных программ и результаты исследования процессов рассеяния ионов и распыления поверхностей многокомпонентных монокристаллов, которые могут быть использованы для решения практических задач техники и технологии микроэлектроники, связанных с анализом и контролем состава и структуры поверхностей сложных соединений, получением атомарных чистых поверхностей, а также при внедрении примесей на малые глубины поверхности.

**Степень внедрения и экономическая эффективность:** Результаты использованы грантов номер гос. регистрации темы ГНТП Ф-2.1.29 (2003-2007), а также Международных грантов ИНТАС(2001/2-60) (2001-2002гг.), Пенсильванского университета (2002-2003гг.), Венского Технологического университета (2003-2004гг.) и Кембриджского университета (2004-2005гг.).

**Область применения:** микро- и нанoeлектроника, физика полупроводников и диэлектриков.

**Физика-математика фанлари доктори илмий даражасига талабгор  
Кутлиев Учкун Отобоевичнинг 01.04.04 – Физикавий электроника  
ихтисослиги бўйича « GaP ва муз монокристалларининг сиртини  
Ne<sup>+</sup> ва Ar<sup>+</sup> ионлари билан бомбардимон қилганда ионларнинг  
сочилишини ва сиртни кластер кўринишида чангланишини  
компьютерда моделлаштириш» мавзусидаги диссертациясининг  
РЕЗЮМЕСИ**

**Таянч сўзлар:** компьютерда моделлаштириш, сирт чангланиши, ион сочилиш, ион имплантация, каналдан чиқиш, бурчак ва энергетик тақсимотлар, нуксонлар, кластерлар.

**Тадқиқот объектлари:** Ионлар бомбардировкаси орқали монокристалл сиртидан зарраларининг чангланиш ва ионларнинг сочилиш қонуниятлари.

**Ишнинг мақсади:** Идеал ва нуксонли икки таркибли GaP(100) ва муз монокристалл сиртларига кичик бурчак остида йўналтирилган ионларнинг сочилиши ва Au(111) сиртига қопланган муз қатламларининг кластерлар кўринишида чангланиш механизмлари ва қонуниятларини компьютерда моделлаштириш усули билан ўрганиш.

**Тадқиқот методлари:** Тадқиқот методи кетма-кет тўқнашувлар усули ва молекуляр динамика усулларига асосланган компьютерда моделлаштириш методи. Кетма-кет тўқнашувлар усули кўптаркибли монокристаллар сиртидан ионларнинг сочилиш жараёнини тушунтириш учун, молекуляр динамика усули эса металл сиртига қопланган муз қатламларини чангланишини ўрганиш учун қўлланилди.

**Олинган натижалар ва уларнинг янгилиги:** Ушбу ишда кўп таркибли тоза ва нуксонли монокристаллар GaP(100) ва муз кристалли сиртидан Ar<sup>+</sup> и Ne<sup>+</sup> ионларининг сочилиши ўрганилди. Сочилган ионларнинг траекториялари ва ноэластик энергия йўқотишлари кўп қаррали сочилиш ҳисобига юз бериши тушунтирилди.

Сиртга йўналтирилган ионларнинг каналлардан чиқиш жараёни аниқланди ва ўрганилди. Монокристалл сиртини кичик бурчак остида бомбардимон қилинганда сиртга яқин каналлардан чиққан ионларнинг траекториялари ўрганилди.

Металл сиртига қопланган, таркибида киришма ион бўлган муз қатламини ионлар билан бомбардимон қилганда кластерлар кўринишида чангланиши ўрганилди ва бу кластер киришма ионнинг сиртдаги бошланғич ҳолатда қандай жойлашишига боғлиқлиги кўрсатилди.

**Амалий аҳамияти:** кўп таркибли материалларнинг сиртидан ионларнинг сочилиш ва сиртларни чангланиш жараёнларини моделлаштириш дастурлари сиртни таркиби ва структурасини назорат қилиш билан боғлиқ бўлган амалий характердаги техника ва технология масалаларни ечишда, ҳамда соф сиртлар олиш ва кичик чуқурликларга бошқа турдаги атомларни киритишда ишлатилади.

**Татбиқ этиш даражаси ва иқтисодий самарадорлиги:** Олинган натижалар ГНТП Ф-2.1.29 (2003-2007), ИНТАС(YSF-2001/2-60), НАТО, Кембридж, Пенсильвания ва Вена Технология университетларини грантларини (2002-2005й) бажаришда қўлланилган.

**Қўлланиш соҳаси:** микро- ва наноэлектроника, ярим ўтказгичлар ва диэлектриклар физикаси.



## RESUME

Thesis of Kutliev Uchkun Otoboevich on the scientific degree competition of Doctor of sciences in Physics and Mathematics on specialty - 01.04.04.-Physical electronics on the subject: "Computer simulation the processes of ion scattering and sputtering of the surface GaP and ice monocrystals at the bombardment by  $\text{Ne}^+$  and  $\text{Ar}^+$  ions"

**Key words:** computer simulation, sputtering, ion scattering, ion implantation, dechanneling, defects, clusters.

**Subjects of study:** Object of the study is regularities of the scattering and sputtering of mono crystal surfaces at the bombardment by ions.

**Purpose of work:** is to establish of mechanisms and regularities of the processes small angle scattering ions from the ideal and defect surfaces of double component monocrystals GaP(100) and ice films and sputtering as clusters of the ice film surfaces, covering Au(111) surfaces by method of computer simulation.

**Methods of study:** is a computer simulation method based by the methods molecular dynamic and binary collision approximation. The method of binary collision approximation used for a study of description of the processes of the ion scattering from the double component mono crystal surfaces, and method molecular dynamics used for study of the sputtering of the surfaces metal, covered ice films.

**The results obtained and their novelty:** The process of dechanneling ions at the bombardment by the  $\text{Ar}^+$  and  $\text{Ne}^+$  ions of the ideal and defect surfaces ice and semiconductor GaP(100) was investigated. The trajectory and energy losses of ions in these crystals have been found and explained, their ranges were determined.

The effect of ion dechanneling was found and studied. The trajectory of dechanneling ions at the ion bombardment of the defect and ideal mono crystal surfaces was studied.

At the bombardment by the low energy ions of the surface ice films, implanted by ions and covered on metallic surfaces, was discovered the sputtering of big clusters. The size of sputtering cluster depends to the location of the implanted ion to the crystal. The coefficient of sputtering was calculated for the ice films implanted by positive and negative ions.

**Practical value:** developed effective codes and obtained results of ion scattering and sputtering processes can be used for the analysis of fundamental and applied problems of small angle ion scattering spectroscopy and secondary ions mass-spectrometry.

**Degree of embed and economic effectivity:**

These results were used in grants F-2.1.29 GNTF (2003-2007), INTAS(YSF-2001/2-60), Penn State University (2002-2003), Cambridge University (2004-2005) and Vienna Technology University(2003-2004).

**Field of application:** micro- and nanoelectronics, semiconductors and dielectrics physics.