

Разработка фундаментальных основ ионно-кластерного метода создания совершенных оптических поверхностей нелинейных монокристаллов для лазерной техники

Состав коллектива:

Коробейщиков Николай Геннадьевич, д.ф.-м.н., в.н.с. ОПФ ФФ НГУ
Стишенко Павел Викторович, к.ф.-м.н., с.н.с. ОмГТУ, с.н.с. ОПФ ФФ НГУ,
Николаев Иван Владимирович, к.ф.-м.н., н.с. ОПФ ФФ НГУ

Грантовая поддержка:

Работа выполняется при финансовой поддержке гранта РФФИ №21-19-00046.
Руководитель – Коробейщиков Н.Г., 2021-2023 гг.

Аннотация

Численным МД моделированием исследованы повреждения поверхности плавленого кварца (SiO_2), вносимые кластерами разных газов (Ne, Ar, Kr) с различными энергиями E/N 25 – 110 эВ/атом при нормальном и наклонном падении на мишень. Анализ параметров ударных кратеров показал, что при нормальном падении и одинаковой энергии E/N диаметр кратеров практически одинаков, хотя диаметры кластеров заметно отличаются. Объем кратеров (соответственно, и количество перемещенных атомов мишени) растет с увеличением удельной энергии кластеров E/N , при этом диаметр кратера при нормальном падении кластера и глубина кратера при наклонном падении слабо зависят от вида газа. Для исследованных газов доля распыленных атомов относительно объема кратера обобщается в зависимости доли энергии кластеров, переданной мишени E_{sput}/E .

Научное содержание работы

Постановка задачи

Данный проект посвящен комплексному исследованию физико-химических процессов, протекающих при взаимодействии пучка ускоренных кластерных ионов благородных газов (gas cluster ion beam, GCIB) с поверхностью нелинейных монокристаллов. Отличительной особенностью таких ионов является возможность формировать интенсивный поток частиц с очень малой удельной энергией (на один атом в кластере), сравнимой с энергией связи атомов на поверхности мишени (единицы электронвольт). Коллективные нелинейные эффекты, протекающие при столкновении газового кластера с твердым телом, обеспечивают высокую эффективность распыления и возможность сглаживания рельефа при минимальном повреждении подповерхностной структуры мишени. Благодаря этому газовые кластерные ионы потенциально являются уникальным малоинвазивным инструментом для создания совершенных оптических поверхностей (атомарно гладких с минимальным поврежденным слоем) монокристаллических материалов для приборов управления лазерным излучением. Для изучения детальной на атомарном уровне динамики быстропротекающих (с характерным временем десятки пикосекунд) процессов столкновения кластеров с поверхностью нелинейных

монокристаллов будут использоваться современные методы компьютерного моделирования: МД-моделирование и квантовохимические расчеты.

Проведенные работы

С использованием МД моделирования проведено исследование воздействия кластеров разных газов на аморфный SiO₂ (плавленый кварц). Моделировалось столкновения отдельных кластеров, состоящих из 561 и 923 атомов Ne, Ar или Kr с полной кинетической энергией 22, 60 и 100 кэВ и углами падения 0° и 60°. Выбранные размеры и энергии кластеров охватывают широкий диапазон энергий E/N от 25 до 110 эВ/атом, который обычно используется для технологической обработки поверхности материалов. Для моделирования ударов кластерных ионов газа мы использовали компьютерный код LAMMPS. Мишень представляла собой прямоугольную пластинку аморфного SiO₂ с периодическими граничными условиями по осям O_x и O_y и была создана в Materials Studio 7.0. Ячейка моделирования имела размеры 192,5 × 192,5 × 107 Å и содержала в общей сложности 262 440 атомов мишени. Чтобы предотвратить дрейф моделируемой ячейки, нижний слой толщиной 8 Å был зафиксирован. Кластеры благородных газов создавались с использованием программ Atomic Simulation Environment (ASE). При компьютерном моделировании использовались следующие потенциалы: потенциал Леннарда-Джонса – для взаимодействия атомов благородных газов; потенциал Циглера-Бирсака-Литтмарка (ZBL) – для взаимодействия между кластером и атомами мишени; комбинация потенциалов Терсоффа и ZBL – для взаимодействий Si–O. Моделирование каждого столкновения кластера проводилось в течение 7 пс с шагом по времени 0,1 фс, что обеспечивало детальное описание всего столкновения. Для сбора статистики расчеты повторялись по пять раз со смещенным начальным положением кластера для каждого набора параметров.

Полученные результаты

Исследованы геометрические параметры ударных кратеров: диаметр и глубина – для нормального падения, длина, ширина и глубина – для наклонного падения при различных режимах столкновения. По полученным результатам рассчитаны объёмы ударных кратеров. Объем кратера отражает число перемещенных атомов мишени и тем самым, вносимое кластерами повреждение мишени. Полученные результаты сопоставлены с литературными данными других авторов. Проведен анализ зависимостей геометрических параметров и объема кратеров разных газов от основных определяющих параметров: коэффициента распыления Y, удельной энергии E/N, плотности выделения энергии E/S, где S – площадь удара (в качестве S бралось сечение соответствующего кластера), доли исходной энергии кластеров, переданной распыленным атомам мишени E_{sput}/E.

Методами теории функционала плотности (DFT) проведено моделирование кристаллической решетки монокристалла трибората лития LBO. DFT расчёты проводились с помощью кода Siesta версии 4.1.5. Использовалось приближение функционала электронной плотности Perdew-Burke-Ernzerhof (PBE). Стандартный двухэкспоненциальный базис, в который дополнительно включены поляризационные функции (DZP) базис использовался для описания псевдоорбиталей. Поляризационные функции помогают лучше описать межатомные взаимодействия и химическую связь. Псевдопотенциалы Troullier-Martins применялись для описания потенциала невалентных электронов. Остальные параметры, влияющие на погрешность численных приближений,

такие как плотность сэмплинга на обратной решётки решётке (k-grid), подбирались для достижения точности общей энергии 0.01 eV на один атом ячейки кристалла LBO.

Публикации:

1. I.V. Nikolaev, P.V. Stishenko, V.V. Yakovlev, N.G. Korobeishchikov. Effect of gas cluster species on crater formation for fused silica // Journal of Non-Crystalline Solids. 2023. Vol. 619. 122590. DOI: 10.1016/j.jnoncrysol.2023.122590 Импакт фактор 4.458
2. I.V. Nikolaev, P.V. Stishenko, N.G. Korobeishchikov, V.V. Yakovlev. Simulation of Surface Sputtering of Fused Quartz by Clusters of Different Gases // AIP Conference Proceedings. 2023. Vol. 2784. 040005. DOI: 10.1063/5.0140411