

コア-シェル構造を持つクラスターの衝突シミュレーション

Molecular Dynamics Simulations of Cluster Impacts with Core-Shell Structures

京都大学 [○]青木学聡, 瀬木利夫, 松尾二郎Kyoto Univ., [○]Takaaki Aoki, Toshio Seki, Jiro Matsuo

E-mail: aoki@sakura.nucleng.kyoto-u.ac.jp

数千の原子・分子の集合体であるクラスターの固体表面への衝突は、特に表面処理において従来の単原子イオン衝突と異なる特徴を示す[1]。クラスターイオンビーム特有の衝突過程は、クラスターのエネルギー、構成原子数(クラスターサイズ)、構成原子・分子等のパラメータにより大きく異なることが知られている[2]。その一方で、クラスターイオンの衝突では、単原子イオンと異なり、衝突するクラスターの部位によりその役割が大きく異なることが考えられる。たとえば、クラスターのうち、基板構成原子と接触するのは、標的基板表面に正対する部分のみである。残りのクラスター構成原子は標的原子と接触することなく、周囲のクラスター構成原子とのみ衝突し、再度真空中へと再脱離する。さらに、クラスター衝突現象の更なる高機能、高精度の表面加工プロセスへの応用を検討する場合、複数の構成原子からなるクラスター、そして、その構造による衝突過程の違いを明らかにする必要がある。本研究では、二種類の希ガス元素からなるガスクラスターの衝突シミュレーションを実施し、その衝突過程の解析を行った。

クラスターサイズを 2000 とし、構成比率を変更した Ar-Xe 複合クラスター($\text{Ar}_x\text{Xe}_{(2000-x)}$)を仮想的に構成し、このクラスターを総加速エネルギー 20keV で Si(100)表面に衝突させる分子動力学シミュレーションを実施した。この際、Ar-Xe 複合クラスターは、Ar を中心とし、外縁に Xe を配置する、またその逆、というコア-シェル構造を取るようにした。図に 1 回のクラスター衝突により形成されるクレーター深さの Xe 構成比率に対する変化を示す。図より、 Ar_{2000} と Xe_{2000} を比較した場合、重い元素により構成された Xe_{2000} の方が深いクレーターが形成されることが分かる。さらに、Ar, Xe 何れの元素をコアにするかにより、構成比率に対するクレーター深さの変化が異なることが分かった。Xe がコアを構成する場合、Ar クラスターの中心部にわずか 10%、200 原子を配置することで、クレーター深さが急激に増大する。これは、クラスター中心部の Xe が高い運動量を持ち、これがクラスターの形態を保持したまま基板奥深くまで進入するためである。逆に、

Xe クラスターの中心部を Ar に置き換えた場合(図中黒線)、クレーター深さの変化は Xe コア比べて急激ではなくなる。これは、コア部分の Ar 原子は衝突時に先行する Xe 外殻原子と衝突するが、その質量比のため、Ar 原子のエネルギー・運動量が Xe 原子に伝わることなく、跳ね返されるためであると考えられる。これらのシミュレーション結果より、多元素から成る複合クラスターにおいては、従来のエネルギー、クラスターサイズに加え、その構成比率、そして構造によってもその衝突過程が異なることが示された

[1] I. Yamada *et al.*, Mat. Sci. & Eng. R, 34 (2001) 231.

[2] T. Aoki *et al.*, Nucl. Instr. & Meth. B206 (2003) 861.

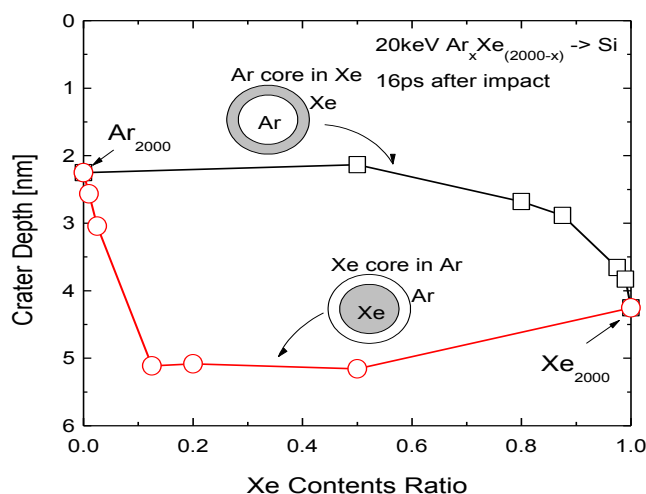


図: $\text{Ar}_x\text{Xe}_{(2000-x)}$ 複合クラスターの衝突により形成されるクレーター深さの Xe 構成比率依存性。二通りの異なるコア-シェル構造に対する結果を示している。