

02;11

Моделирование ионного распыления кластеров меди с поверхности монокристалла графита

© Г.В. Корнич, Г. Бетц, В.И. Запорожченко, А.И. Бажин

Запорожский национальный технический университет,
69063, Запорожье, Украина
E-mail: gkornich@zntu.edu.ua
Inst. für Allgemeine Physik, Technische Universität Wien,
A-1040, Wien, Austria
Technische Fakultät, Christian-Albrechts-Universität,
24143, Kiel, Germany
Донецкий национальный университет,
83114, Донецк, Украина

Поступило в Редакцию 21 мая 2003 г.

Выполнено молекулярно-динамическое моделирование распыления кластеров, состоящих из 13 и 75 атомов Cu, с поверхности графита (0001) ионами Ag с энергией 200 eV. Обсуждаются угловые распределения распыленных атомов меди, их энергии и значения коэффициентов распыления.

Выполнено молекулярно-динамическое (МД) моделирование [1] распыления кластеров меди с монокристаллической поверхности (0001) графитовой подложки нормально падающими относительно нее ионами Ag с энергией 200 eV. В работе рассматривались два кластера, состоящие из 13 (13 Cu) и 75 (75 Cu) атомов меди. Подложка включала четыре атомных слоя, каждый из которых строился соответственно из 792 и 1500 атомов углерода. Обе системы кластер-подложка создавались путем релаксации первоначально уединенных минимизированных по энергии кластеров меди [2] на свободной поверхности графита (0001). После 10 ps релаксации обеих систем максимальная кинетическая энергия атомов Cu в кластерах на подложке не превышала 0.02 eV/at.

Атомы Cu взаимодействовали между собой согласно многочастичному потенциалу [3], непосредственно подсоединенному при больших энергиях взаимодействия к потенциалу Борна-Майера [4]. Взаимодейст-

вие атомов углерода описывалось потенциалом Терсоффа [5], который подсоединялся к потенциалу Зиглера–Бирзака–Литмарка посредством функции связи, определенной в интервале $x_0 < x < x_1$ в форме полинома пятой степени:

$$\Phi(x) = a_0 + \sum_{i=1}^5 a_i \cdot (x - x_0)^i,$$

где $a_0 = 119.909 \text{ eV}$, $a_1 = -619.745 \text{ eV/\AA}$, $a_2 = 1988.96 \text{ eV/\AA}^2$, $a_3 = -4918.48 \text{ eV/\AA}^3$, $a_4 = 6931.1 \text{ eV/\AA}^4$, $a_5 = -3873.41 \text{ eV/\AA}^5$, $x_0 = 0.5 \text{ \AA}$, $x_1 = 0.98 \text{ \AA}$. Минимальное расстояние между атомами углерода в плоскости (0001) составляло 1.46 \AA , а межплоскостное расстояние было 3.35 \AA . Взаимодействие между атомными плоскостями (0001) в исходной подложке отсутствовало, поскольку радиус обрезания потенциала Терсоффа составляет 2.1 \AA [5]. Взаимодействие пар атомов Си–С описывалось потенциалом Леннарда–Джонса [6] с радиусом обрезания 3.75 \AA . По периметру атомных слоев графита были установлены периодически граничные условия [1] и диссипативный слой [7] без учета тепловых колебаний атомов. Уравнения движения частиц решались методом Верлета [4]. Максимальный шаг интегрирования не превышал 4 fs . Моделируемое время развития одного каскада столкновений составляло 2 ps . Закон сохранения энергии в каждом МД каскаде выполняется с точностью не хуже 1% . Было выполнено по 500 испытаний на каждом кластере, причем каждое новое испытание проводилось на исходной системе кластер–подложка. Начальные координаты ионов Аг выбирались по закону случайных чисел так, что их максимальная энергия взаимодействия с хотя бы одним атомом Си была не меньше 37 eV . С целью определения вклада границы кластеров в распыление дополнительно было выполнено по 500 бросаний ионов Аг вокруг обоих кластеров так, что максимальная энергия взаимодействия ионов с каждым из атомов Си не превышала 37 eV и была не меньше 3.7 eV с каким-либо атомом Си. Атомы Си, распыленные из кластера под полярными углами больше 90° (см. ниже), но не достигшие модельной подложки к моменту окончания расчета каскада, регистрировались как частицы, зеркально отраженные от плоскости ее поверхности.

Структура минимизированного по энергии на поверхности графита кластера меди представляла собой многослойную атомную систему с практически равными расстояниями между слоями, расположенными

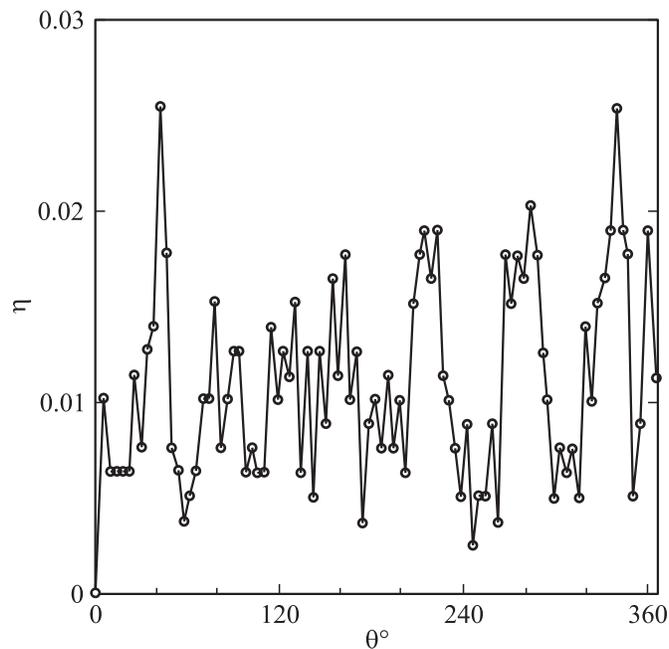


Рис. 1. Азимутальное угловое распределение вероятности распыления кластера (75 Cu) с поверхности графита (0001).

параллельно поверхности (0001). При этом цепочки атомов Cu, формирующие наиболее открытые направления атомной структуры кластера (75 Cu), ориентировались вдоль направлений подложки вида $\langle 1\bar{1}00 \rangle$ через 60° вокруг нормали к ее поверхности.

На рис. 1 представлено азимутальное распределение вероятности распыления одиночных атомов кластера (75 Cu). Азимутальный угол отсчитывался от направления $[1000]$ против часовой стрелки в плоскости (0001) поверхности графита. В секторах вблизи углов 30° , 210° , 270° , 330° видны характерные максимумы вероятности распыления, механизмы, приводящие к образованию которых, связаны с аналогично ориентированными цепочками атомов кластера (75 Cu). Ожидаемые максимумы вероятности распыления в секторах вблизи углов 90° и 150° отсутствовали (рис. 1) из-за нарушений упорядоченности

атомной структуры модельного кластера на соответствующих участках его поверхности. Не до конца выясненным осталось азимутальное смещение на $\sim 10^\circ$ расположения основных максимумов интенсивности распыления относительно направлений вида $\langle 1 \bar{1} 00 \rangle$. Азимутальная зависимость распыленных димеров Cu не определялась. Для кластера (13 Cu) азимутальное распределение распыленных атомов, аналогичное распределению для кластера (75 Cu), не было обнаружено.

Представленный результат дает основание предположить, что ионная бомбардировка монокристаллической поверхности графита (0001) с нанесенными на нее кластерами меди при определенных условиях может вызывать появление преимущественных азимутальных направлений их распыления, близких к направлениям вида $\langle 1 \bar{1} 00 \rangle$, благодаря сходной пространственной ориентации атомных структур поверхностных кластеров меди, что, вероятно, может иметь место и для других материалов.

Получено, что распыленные димеры Cu–Cu вносят не более 18% (75 Cu) и 6% (13 Cu) общего вклада в коэффициент распыления кластеров меди при рассмотренных условиях бомбардировки. Коэффициенты распыления кластеров 75 Cu и 13 Cu, в которых учтены одиночные атомы Cu и димеры Cu–Cu, были соответственно 1.92 и 1.35 атомов/ион. При этом средние доли потерь энергии ионов Ag в кластерах составили 61% для (75 Cu) и 50% для (13 Cu), что согласуется с ростом коэффициента распыления при увеличении линейного размера кластера. Альтернативный расчет коэффициента распыления кластера Cu только по обратнорассеянными ионам Ag и всем распыленным частицам Cu дает соответственно 2.72 и 2.27 атомов/ион. Для частиц Cu, распыленных в каскадах с обратным рассеиванием ионов Ag получено соответственно 2.5 и 1.9 атомов/ион. Неучет в коэффициенте распыления ионов Ag, проникающих в подложку, и включение в него соответствующих распыленных частиц Cu приводит к расчетной ошибке менее 20%. Это позволяет оценивать усредненный коэффициент распыления кластеров Cu (или других тяжелых металлов) с подложки графита, с учетом степени покрытия кластерами бомбардируемой поверхности, по интенсивности потока обратнорассеянных ионов Ag. Распыление графита в выполненных расчетах было несущественным, притом что средние потери энергии ионов в подложке составили 25% (75 Cu) и 40% (13 Cu) от начальной энергии ионов.

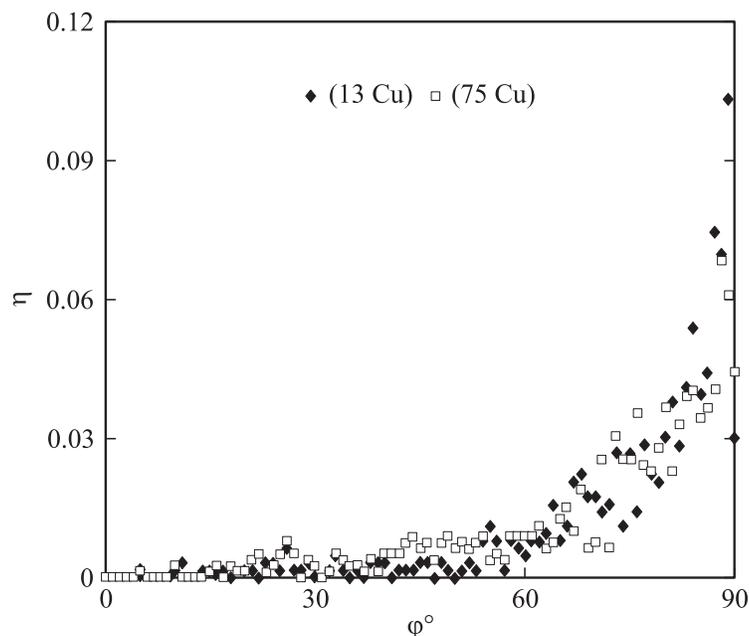


Рис. 2. Полярное угловое распределение вероятности распыления кластеров 75 Cu и 13 Cu с поверхности графита (0001).

На рис. 2 представлены результаты моделирования полярного углового распределения вероятности распыления атомов кластеров меди. Полярный угол определялся относительно нормали к поверхности подложки. Видно, что интенсивность распыления обоих кластеров резко возрастает при углах больше 60°, что является следствием открытости их боковой поверхности для каскадных атомов Cu, покидающих кластеры. Это согласуется с полученным, в рамках МД модели, резким возрастанием средней энергии отлетающих атомов Cu при полярных углах больше 60°, что говорит о существовании по крайней мере двух механизмов распыления кластеров. Один механизм — типично каскадно-рекойловый, приводящий к распылению атомов, преимущественно с низкими и средними энергиями (до 8 eV). Другой механизм — высокоэнергетический, ведущий к распылению атомов с энергиями

до 30 eV при больших полярных углах. Значительную роль при этом играет взаимодействие распыленных атомов Cu с поверхностными атомами подложки.

Список литературы

- [1] *Haile J.M.* Molecular Dynamics Simulation — Elementary Methods. New York: Wiley-Interscience, 1992. 386 p.
- [2] *Betz G., Husinsky W.* // Nucl. Instr. and Meth. 1997. B122. P. 311–317.
- [3] *Betz G., Kirchner R., Husinsky W., Rüdener F., Urbassek H.M.* // Rad. Eff. and Def. in Solids. 1994. V. 130–131. P. 251–266.
- [4] *Экштайн В.* Компьютерное моделирование взаимодействия частиц с поверхностью твердого тела: Пер. с англ. М.: Мир, 1995. 320 с.
- [5] *Tersoff J.* // Phys. Rev. 1989. V. 39. P. 5566–5568.
- [6] *Dorfman S., Mundim K.C., Fuks D., Berner A., Ellis D.E., Van Humbeeck J.* // Mat. Sci. and Eng. C. 2001. V. 15. P. 191–201.
- [7] *Berendsen H.J., Postma J.P.M., Gunsteren W.F.V., Di-Nola A., Haak J.R.* // J. Chem. Phys. 1984. V. 81. P. 3684–3690.