

10;11

## Моделирование рассеяния ионов аргона низких энергий на поверхностных кластерах меди

© Г.В. Корнич, Г. Бетц, В.И. Запорожченко, Н.И. Белая

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

Поступило в Редакцию 26 января 2004 г.

Выполнено молекулярно-динамическое моделирование рассеяния ионов Ag с начальной энергией 200 eV на уединенных кластерах меди, состоящих из 13 и 39 атомов и расположенных на поверхности (0 0 0 1) графита. Обсуждаются угловые распределения рассеянных ионов, их энергии и коэффициенты отражения.

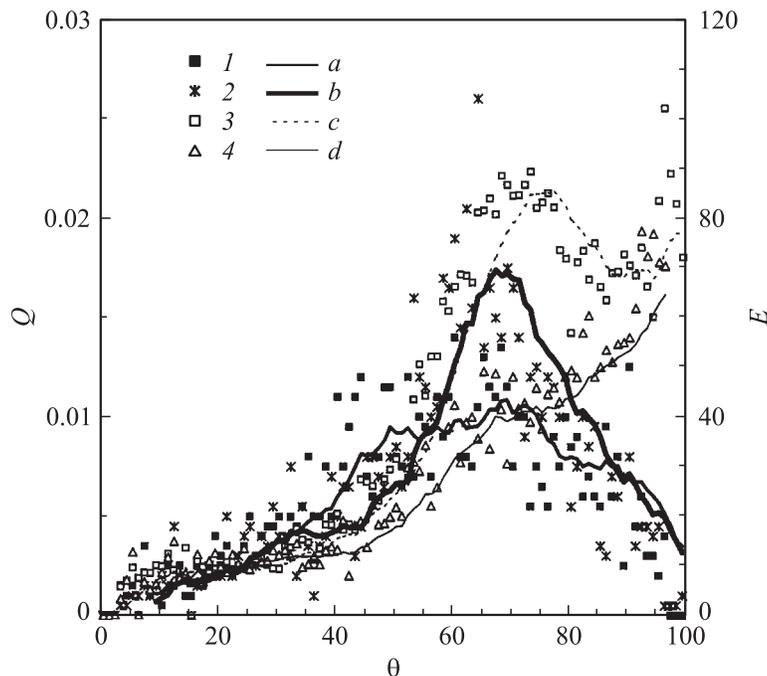
В [1,2] было предложено оценивать степень покрытия поверхности графита кластерами меди согласно потоку рассеянных при бомбардировке мишени ионов Ag. Для выяснения механизмов и закономерностей рассеяния бомбардирующих ионов Ag на поверхностных кластерах меди в данной работе выполнено молекулярно-динамическое (МД) моделирование [3] взаимодействия ионов Ag, имеющих энергию 200 eV, с уединенными кластерами меди, расположенными на поверхности (0 0 0 1) графитовой подложки, в случае нормального относительно подложки начального направления движения ионов Ag. В работе использовались два кластера, состоящие из 13 (13 Cu) и 39 (39 Cu) атомов меди. Подложка состояла из двух атомных слоев, каждый из которых включал соответственно 792 и 1144 атома углерода. Методика создания двухкомпонентных систем медный кластер–подложка графита, а также используемый МД алгоритм изложены в [1]. Для обоих кластеров было выполнено по 2000 испытаний падения ионов на мишень, каждое из которых рассчитывалось в течение 0.3 ps. При создании системы

кластер-подложка на стадии перестройки кластера на поверхности графита в отличие от [1] свободная релаксация атомных плоскостей подложки во избежание их неконтролируемых искажений разрешалась только в направлениях вдоль  $(0\ 0\ 0\ 1)$  плоскостей. Часть рассеянных ионов Ag, имеющих после взаимодействия с кластером полярный угол (отсчитывается от внешней нормали к подложке) более  $90^\circ$ , не отражались от модельной подложки из-за ее пространственной ограниченности.

Кластеры  $(13\text{Cu})$  и  $(39\text{Cu})$  имеют принципиально различную атомную структуру. Непосредственное взаимодействие кластера  $(13\text{Cu})$  с поверхностью подложки осуществляется только тремя атомами Cu, что практически не изменяет его форму. В случае кластера  $(39\text{Cu})$  его структура изменяется при взаимодействии с подложкой в соответствии со структурой поверхности  $(0\ 0\ 0\ 1)$  графита [1]. В направлении, нормальном к поверхности подложки, кластер  $(39\text{Cu})$  состоял из 2–3 слоев атомов Cu.

Два варианта развития процесса рассеяния иона возможны в случае поверхностного кластера меди на подложке: рассеяние на кластере без значительного взаимодействия иона с подложкой и рассеяние на кластере с последующим отражением иона от подложки. В обоих случаях возможны два механизма отражения иона от кластера. Один механизм — это существенно парное взаимодействие иона с одним из атомов кластера. Другой механизм — многочастичное взаимодействие иона одновременно или последовательно с несколькими атомами кластера. В случае многочастичного механизма отражения от кластера при равных углах отражения средняя энергия отлетающего иона будет больше, чем в случае парного механизма.

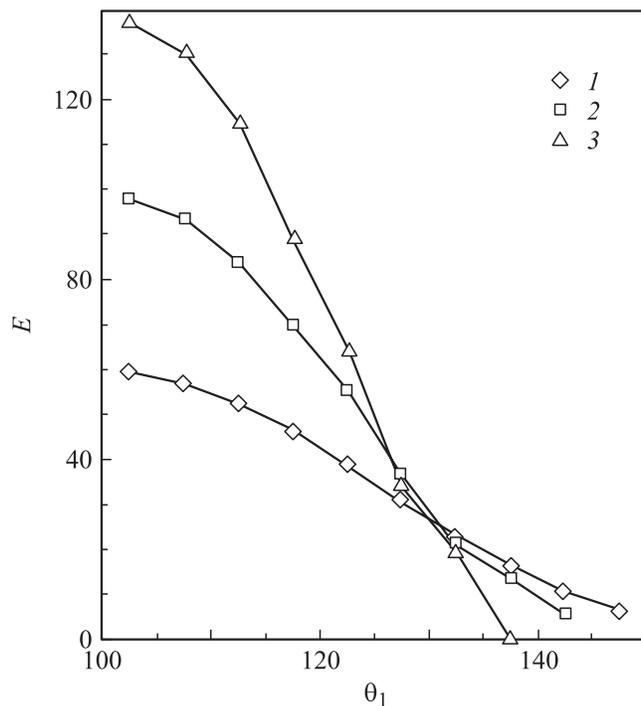
Модельные вероятности распределения рассеянных ионов Ag по полярным углам (количество рассеянных ионов, попавших в каждую единицу (в приведенных расчетах — один градус) полярной угловой области / общее количество испытаний) на уединенных поверхностных кластерах меди  $(13\text{Cu})$  и  $(39\text{Cu})$  представлены на рис. 1 в виде множества точек 1 и 2, а также соответствующих кривых *a* и *b*, образованных отрезками линейных аппроксимаций по каждому последующим 10 расчетным точкам. Там же представлены угловые зависимости средних энергий (сумма энергий ионов, попавших в каждую единицу полярной области углов / количество ионов, попавших в соответствующую единицу полярной области углов) рассеянных ионов аргона



**Рис. 1.** Левая ось. Зависимость вероятности рассеяния  $Q$  ионов аргона на поверхностных кластерах меди ( $^{13}\text{Cu}$ ): 1,  $a$ ; ( $^{39}\text{Cu}$ ): 2,  $b$  от полярного угла  $\theta$ . Правая ось. Зависимость средней энергии рассеянных ионов аргона  $E$  (eV) на поверхностных кластерах меди ( $^{39}\text{Cu}$ ): 3,  $c$ ; ( $^{13}\text{Cu}$ ): 4,  $d$  от полярного угла  $\theta$ .

(множества точек 3, 4 и кривые  $c$ ,  $d$ ). Видно, что значительный рост вероятности рассеяния и средних энергий отлетающих от поверхности мишени ионов приходится на углы более  $35\text{--}45^\circ$  для обоих кластеров.

Для выяснения причины критичности значений  $35\text{--}45^\circ$  полярных углов отраженных ионов было выполнено моделирование взаимодействия чистой поверхности (0 0 0 1) графита с ионами Ag при полярных углах бомбардировки от  $100$  до  $180^\circ$  с шагом  $5^\circ$ . Получено, что с ростом полярных углов падения ионов на поверхность графита и при начальных энергиях  $60$ ,  $100$  и  $140\text{ eV}$  угол падения только незначительно ( $\sim 1^\circ$ ) отличается от угла отражения до критических полярных углов  $130$ ,



**Рис. 2.** Зависимость энергии  $E$  (eV) отраженного иона Ag от полярного угла падения  $\theta_1$  на поверхность графита (0 0 0 1) при начальных энергиях: 1 — 60 eV; 2 — 100 eV; 3 — 140 eV.

120 и 110° соответственно, а конечные энергии иона Ag при этом монотонно уменьшаются, что показано на рис. 2. При дальнейшем увеличении полярных углов падения наблюдаются резкие отклонения углов отражения от значений углов падения и значительный рост потерь энергии иона. Такой характер взаимодействия ионов с подложкой вызван локальным разрушением атомного слоя графита при полярных углах падения более критических. При еще больших полярных углах падения и прочих равных условиях наблюдается проникновение ионов в подложку. Модельный результат для чистой поверхности графита качественно согласуется с экспериментальными данными [4], где была

получена пороговая энергия 43.5 eV проникновения нормально падающих ионов Ag сквозь поверхность (0 0 0 1) внутрь графитового слоя.

Таким образом, в области полярных углов отражения до 45° вероятность рассеяния ионов формируется главным образом за счет парных взаимодействий ион Ag–Cu атом, которые сопровождаются большими потерями энергии иона. Однако, как видно из рис. 1, такие ионы Ag составляют незначительную долю от общего числа отраженных ионов и их интенсивности рассеяния, а также средние энергии незначительно отличаются для кластеров (13 Cu) и (39 Cu). При больших полярных углах отраженных ионов, как показывает моделирование, значительный вклад составляют ионы с большими энергиями до 80 eV. Сохранение значительных кинетических энергий отраженных частиц возможно благодаря доминированию второго варианта рассеяния, а именно многочастичного взаимодействия иона с атомами кластера с результирующим полярным углом больше 90° и его последующим отражением от поверхности подложки, которое также является результатом многочастичного взаимодействия. Такой характер рассеяния проявляется в результирующем максимуме средних энергий отраженных ионов в области углов 70–90°, что видно на рис. 1. В среднем отлетающие от мишени ионы сохраняют ~ 10–20% начальной энергии.

Сравнение интенсивностей рассеяния ионов Ag при больших углах для кластеров (13 Cu) и (39 Cu) на рис. 1 показывает, что средняя энергия рассеянных ионов на кластере (13 Cu) существенно меньше, чем на кластере (39 Cu). Это происходит благодаря меньшей вероятности возникновения эффективных многочастичных взаимодействий, в особенности последовательных, иона Ag с атомами Cu кластера (13 Cu) по сравнению с кластером (39 Cu) в силу относительной малости первого кластера. Возрастание средней энергии рассеянных ионов при полярных углах более 90° и значительные локальные отклонения соответствующих точек вероятности рассеяния от аппроксимирующих кривых связаны с пространственной ограниченностью подложки и, как следствие, с отсутствием отражения от ее поверхности незначительной части бомбардирующих ионов после их взаимодействия с кластерами. Общие коэффициенты рассеяния ионов Ag на модельной мишени были 0.6 и 0.68 для кластеров (13 Cu) и (39 Cu) соответственно. Коэффициенты отражения ионов в области полярных углов меньше 90°

за время моделирования составили 0.56 и 0.64 для кластеров (13 Cu) и (39 Cu) соответственно. Остальные ионы Ag проникали в подложку, тогда как в кластерах меди ионы Ag не были обнаружены после 0.3 ps эволюции модельной системы.

## Список литературы

- [1] *Корнич Г.В., Бетц Г., Запороженко В.И., Бажин А.И.* // Письма в ЖТФ. 2003. Т. 29. В. 22. С. 33–38.
- [2] *Корнич Г.В., Бетц Г., Запороженко В.И., Бажин А.И.* // Материалы XVI Международной конференции по взаимодействию ионов с поверхностью. Москва–Звенигород, Россия. 25–29 августа 2003. Т. 1. С. 65–68.
- [3] *Haile J.M.* Molecular Dynamics Simulation — Elementary Methods. New York: Wiley–Interscience, 1992. 386 p.
- [4] *Marton D., Vu H., Boyd K.J., Todorov S.S., Al-Bayati A.H., Rabalais J.W.* // Surf. Sci. Lett. 1995. V. 326. С. 489–496.