

02;11

Моделирование взаимодействия тяжелых ионов низких энергий с кластерами меди на поверхности графита

© Г.В. Корнич, Г. Бетц, В.И. Запорожченко, Е.В. Пугина

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 3 марта 2004 г.

Выполнено молекулярно-динамическое моделирование распыления уединенного кластера, состоящего из 27 атомов Cu, с поверхности (0 0 0 1) графита ионами Xe с энергиями 100 и 200 eV. Обсуждаются угловые распределения распыленных атомов Cu и рассеянных ионов Xe.

В работах [1–3] методом молекулярной динамики [4] было показано, что азимутальные угловые распределения вероятности распыления кластеров меди, состоящих из нескольких десятков атомов, с поверхности (0 0 0 1) подложки графита ионами Ar с энергией 200 eV имеют шесть максимумов в направлениях $\langle 1\ 1\ 0\ 0 \rangle$, которые соответствуют наиболее открытым направлениям атомной структуры поверхностных кластеров меди на монокристалле графита. В настоящей работе рассмотрено распыление поверхностного кластера, состоящего из 27 атомов меди (27 Cu) ионами Xe с энергиями 100 и 200 eV, а также рассеяние ионов Xe в процессе взаимодействия с мишенью. Графитовая подложка (0 0 0 1) моделировалась двумя атомными слоями, каждый из которых включал 960 атомов углерода. Поверхностный кластер (27 Cu) структурно состоял из трех атомных слоев, которые включали 14, 10 и 3 атома Cu по мере удаления от подложки. Методика создания двухкомпонентных систем медный кластер–подложка графита, а также используемый молекулярно-динамический алгоритм подробно изложены в [1]. При создании системы (27 Cu) кластер–подложка в отличие от [1] свободная релаксация атомных слоев подложки во избежание

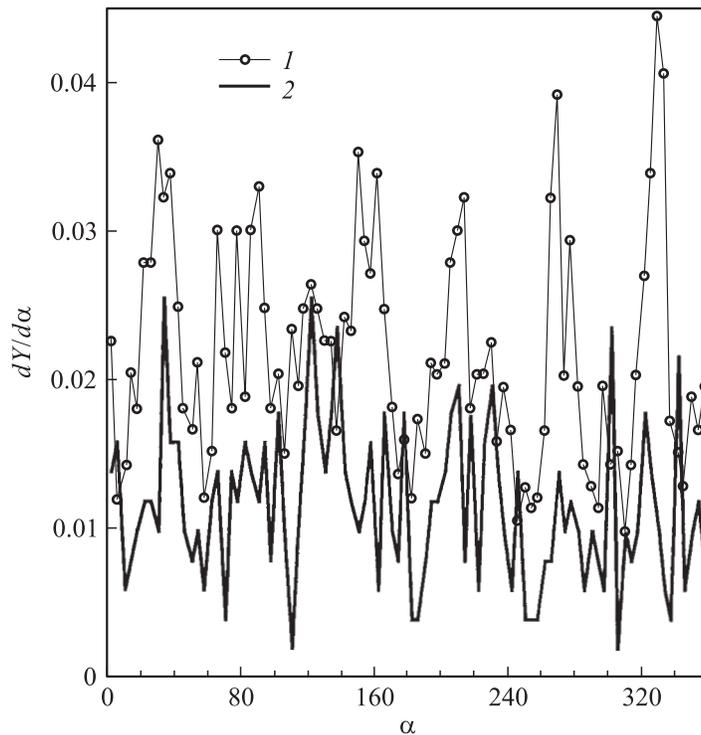


Рис. 1. Азимутальное распределение $dY/d\alpha$ распыленных одиночных атомов поверхностного кластера меди (27Cu) при энергии бомбардирующих ионов Хе: 1 — 200 eV; 2 — 100 eV; α — азимутальный угол (в градусах), отсчитываемый от направления $[1\ 0\ 0\ 0]$ против часовой стрелки в плоскости $(0\ 0\ 0\ 1)$ поверхности подложки; Y — коэффициент распыления (атом/ион).

неконтролируемых искажений разрешалась только вдоль плоскости $(0\ 0\ 0\ 1)$. Для каждой начальной энергии ионов было выполнено по 500 испытаний нормального относительно подложки падения ионов Хе на мишень. Каждое испытание эволюции атомных столкновений рассчитывалось в течение 3 ps.

На рис. 1 представлены угловые азимутальные зависимости дифференциального коэффициента распыления одиночных атомов $dY/d\alpha$,

где α — азимутальный угол, кластера (^{27}Cu) в случае ионов Хе. При энергии ионов 200 eV (кривая 1) наблюдается азимутальная зависимость, качественно аналогичная той, что возникала при бомбардировке поверхностных кластеров меди (^{75}Cu) ионами Ag с той же энергией [1,3]. В частности, шесть максимумов величины $dY/d\alpha$ располагаются через 60° , в наиболее открытых направлениях атомной структуры поверхностного кластера (^{27}Cu). Для ионов Хе с энергией 100 eV (кривая 2) азимутальная периодичность величины $dY/d\alpha$ для кластера (^{27}Cu) отсутствует.

Ионы Хе с начальной энергией 100 eV, попадая в те же точки кластера, что и в случае 200 eV, передают меньше энергии в процессе последовательных столкновений частиц, приводящих к распылению конечного атома кластера. Вследствие многочастичных атом-атомных и ион-атомных взаимодействий, играющих с понижением энергии взаимодействия, а также в случае ионов Хе по сравнению с ионами Ag относительно более существенную роль, эффект фокусирования движения распыляемого атома окружающими соседними атомами кластера нарушается. Это приводит к возрастанию вклада в коэффициент распыления атомов отдачи, имеющих случайное направление движения. Непериодичность азимутальных максимумов величины $dY/d\alpha$ при энергии ионов Хе 100 eV имеет место также потому, что во многих случаях ион, отдавая энергию окружающим атомам, не достигает соответствующей атомной цепочки кластера, которая была достижима при энергии 200 eV и порождала распыленный Cu атом. Полярные же угловые распределения (полярный угол отсчитывается от внешней нормали к подложке) распыленных атомов Cu при начальных энергиях ионов Хе 100 и 200 eV качественно аналогичны распределениям, полученным для ионов Ag с энергией 200 eV [1–3], и имеют по одному максимуму вблизи угла 90° . Незначительная часть распыленных атомов, а также ионов Хе, удаляющихся от кластера под полярными углами более 90° , не отражалась от модельной подложки из-за ее ограниченности.

На рис. 2 представлены угловые полярные распределения вероятности рассеяния ионов Хе и их средних энергий при начальных энергиях ионов 100 eV (точки 1, соответствующая линейно-кусочная 6-точечная аппроксимация 6) и 200 eV (точки 2, аппроксимация 5). Видно, что распределения имеют практически совпадающие при значении полярного угла $\sim 70^\circ$ максимумы вероятности рассеяния, которые возникают вследствие наложения интенсивностей отражения ионов

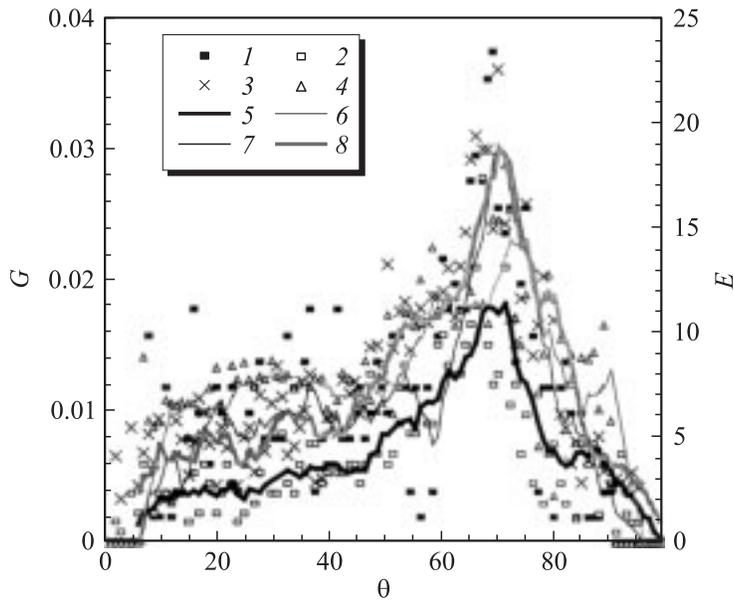


Рис. 2. Зависимости от полярного угла θ : вероятности рассеяния G (левая ось) ионов Хе при начальной энергии 100 eV (1, 6), 200 eV (2, 5); средней энергии Хе E (eV) (правая ось) рассеянных ионов при начальной энергии 200 eV (3, 8), 100 eV (4, 7).

непосредственно от кластера меди и во многих случаях вторичного (после взаимодействия с кластером) отражения ионов от подложки графита. Значительный рост вероятности рассеяния начинается со значений полярных углов отражения ~ 60 и 45° при начальных энергиях 100 и 200 eV соответственно, что связано с возрастанием вклада ионов, отраженных от подложки после взаимодействия с кластером меди. Вероятность отражения ионов от подложки под меньшими полярными углами при таких энергиях снижается вследствие значительного проникновения бомбардирующих ионов в подложку графита. Разница в критических углах начала интенсивного роста вероятности рассеяния для разных начальных энергий определяется упругими свойствами атомной плоскости (0 0 0 1) графита под действием бомбардирующих ионов. Величины интегрального коэффициента отражения для ионов Хе

составляют ~ 1.0 для 100 eV и ~ 0.68 для 200 eV, что проявляется на рис. 2 во взаимном расположении кривых вероятности рассеяния бомбардирующих ионов. Взаимодействующие с кластером (27Cu) ионы Хе с начальными энергиями 100 и 200 eV оставляли в нем в среднем 67–72% начальной энергии.

Как видно из рис. 2, полярные углы, при которых имеют место максимумы средних энергий отраженных ионов, практически совпадают с полярными углами максимумов вероятности рассеяния ионов для обеих начальных энергий, что свидетельствует о доминирующей роли высокоэнергетических ионов в образовании максимума отраженных ионов при больших полярных углах. Относительное расположение кривых средних энергий показывает, что при полярных углах до 45° ионы с начальной энергией 100 eV (точки 4, аппроксимация 7) рассеиваются с большей средней энергией, тогда как при больших полярных углах рассеянные ионы с большей энергией образуются при начальной энергии 200 eV (точки 3, аппроксимация 8), что также является следствием влияния подложки.

Ионы, рассеянные в область малых полярных углов, взаимодействуют преимущественно с кластером. При этом ионы с начальной энергией 200 eV, очевидно, проникают в глубь кластера меди, отдавая часть энергии также и подложке, тогда как при энергии 100 eV взаимодействие ионов происходит в основном с атомами кластера, расположенными в двух верхних слоях. Для обеих начальных энергий ионов многочастичные взаимодействия иона с атомами кластера проявляются также в коллективном отражении тяжелого иона существенно более легкими атомами поверхностного кластера. Аналогичный эффект коллективного отражения тяжелого иона более легкими атомами мишени при низких энергиях бомбардировки моделировался в [5] для случая нормально падающих на поверхность Ni (1 0 0) ионов Хе с энергией 50 eV.

Сравнение полученных результатов со случаем бомбардировки кластеров меди на графитовой подложке ионами Ag с энергией 200 eV показывает, что средние энергии рассеянных ионов Хе в 2–4 раза меньше, чем ионов Ag, что является следствием различия механизмов отражения тяжелых и легких ионов кластерами меди. Полярные углы, при которых наблюдаются максимумы вероятности рассеяния и средних энергий отраженных ионов Хе и Ag, в целом совпадают, что определяется доминирующей ролью графитовой подложки в формировании угловых распределений отраженных под большими полярными углами низкоэнергетических ионов обоих типов.

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] *Корнич Г.В., Бетц Г., Запороженко В.И., Бажин А.И.* // Изв. АН. Сер. Физ. 2004. Т. 68. № 3. С. 304–307.
- [4] *Haile J.M.* Molecular Dynamics Simulation — Elementary Methods. New York: Wiley–Interscience, 1992. 386 p.
- [5] *Корнич Г.В., Бетц Г., Бажин А.И., Корнич В.Г.* // Изв. АН. Сер. Физ. 2002. Т. 66. № 1. С. 89–91.