

Молекулярно-динамическое моделирование взаимодействия ионов Ag и Xe низкой энергии с кластерами меди на поверхности графита

© Г.В. Корнич, Г. Бетц*, В.И. Запорожченко**, Ф. Фаупел**, Л.И. Лозовская

Запорожский национальный технический университет,
69063 Запорожье, Украина

* Institut für Allgemeine Physik, Technische Universität Wien,
A-1040 Wien, Austria

** Technische Fakultät, Christian-Albrechts-Universität,
24143 Kiel, Germany

E-mail: gkornich@zntu.edu.ua

(Поступила в Редакцию в окончательном виде 22 февраля 2005 г.)

Выполнено молекулярно-динамическое моделирование распыления уединенных кластеров, состоящих из 13, 27 и 195 атомов Cu, с поверхности (0001) графита ионами Ag и Xe с энергией 200 eV. Обсуждаются угловые и энергетические характеристики распыленных атомов Cu и рассеянных ионов.

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства образования и науки Украины (грант ДБ 04314), Венского технического университета (грант UT8/058-04) и Кильского университета (грант 405/1033976).

1. Введение

Исследования металлических наноразмерных кластеров на различных подложках, включая углеродсодержащие поверхности [1–9], представляют значительный интерес в связи с созданием новых материалов в электронике, атомной энергетике, химических и биопроизводствах. В течение последнего десятилетия моделировались составляющие элементы и процессы, относящиеся к системам кластер/подложка: углеродные структуры [10–13], металлические кластеры, включая их напыление на атомные поверхности [14–18]; распыление поверхностей кластерами атомов [19–23], а также механизмы распыления вещества в виде кластеров [24] и молекулярных фрагментов [25]. В то же время моделирование распыления наноразмерных металлических кластеров с подложек ранее не выполнялось, исключая выполненные в рамках метода классической молекулярной динамики (МД) [26] оценочные расчеты распыления кластеров меди с поверхности графита [27].

Выполненные исследования посвящены МД моделированию бомбардировки уединенных медных кластеров, состоящих из разного числа атомов, на подложке графита (0001) ионами Ag и Xe с энергией 200 eV. Сравнение результатов взаимодействия ионов Ag и Xe с поверхностными кластерами позволяет выделить проявления многочастичности взаимодействия ионов Xe с более легкими атомами кластеров. Подобные эффекты взаимодействия уже рассматривались в рамках МД модели с многочастичными атомными потенциалами для мишеней в виде металлических гладких поверхностей [28,29].

2. Молекулярно-динамическая модель

Подложки, имевшие гексагональную атомную структуру, моделировались двумя слоями атомов, расположенными в плоскости (0001), каждый из которых состоял из 792, 960 и 1500 атомов углерода для кластеров, состоящих из 13 (13 Cu), 27 (27 Cu) и 195 (195 Cu) атомов Cu соответственно. Системы кластер–подложка создавались путем релаксации первоначально уединенных в пространстве минимизированных по энергии кластеров меди [19,24] на поверхности графита (0001). После 20–40 ps релаксации систем кластер–подложка максимальная кинетическая энергия атомов Cu в поверхностных кластерах не превышала 0.02 eV/атом. Положение слоев атомов графита относительно нормали к поверхности подложки полагалось неизменным в отличие от модели [27], где подложка в процессе релаксации бинарной системы оставалась свободной и ее поверхность незначительно деформировалась. Моделирование второго слоя атомов в подложке позволило полнее учесть развитие процессов столкновений в мишени, что привело к росту коэффициента распыления кластеров на 5–10%. Дальнейшее увеличение числа атомных слоев подложки не изменяло коэффициент распыления кластеров.

Атомы меди в интервале 1.3–5.5 Å взаимодействовали между собой в соответствии с многочастичным потенциалом в представлении Гадеса и Урбассека [30], дающим реалистичные энергии сублимации для малых атомных кластеров, в частности для димера Cu–Cu — 2.64 eV [31]. В рассматриваемой модели потенциал [30] непосредственно стыковался с парным отталкивающим потенциалом Борна–Майера, описывавшим высокоэнергетические столкновения атомов [32] в интервале

0–1.3 Å. Взаимодействие атомов углерода описывалось многочастичным потенциалом Терсоффа с радиусом обрезания 2.1 Å [33], который стыковался с парным отталкивающим потенциалом Зиглера–Бирзака–Литмарка [32] посредством функции связи, заданной полиномом пятой степени в интервале 0.5–0.98 Å. Минимальное расстояние между атомами углерода в плоскости (0001) составляло 1.46 Å, а межплоскостное расстояние было 3.35 Å. Взаимодействие атомов Cu–C на интервале 1.946–3.75 Å описывалось парным потенциалом Леннарда–Джонса [34] с минимальной потенциальной энергией взаимодействия атомов Cu–C –0.11 eV при межатомном расстоянии 2.34 Å. Потенциал Леннарда–Джонса стыковался с потенциалом Зиглера–Бирзака–Литмарка посредством функции связи, также заданной полиномом пятой степени в интервале 1.2–1.946 Å. По периметру атомных слоев графита были заданы периодические граничные условия [26] и диссипативный слой [35]. Уравнения движения частиц решались методом Верлета [26,32]. Взаимодействие ионов Ag и Xe с атомами углерода и меди описывалось потенциалом Зиглера–Бирзака–Литмарка с радиусом обрезания 5 Å. Максимальный шаг интегрирования не превышал 4 fs. Моделируемое время развития одного каскада столкновений составляло 2 ps для случая ионов Ag и 3 ps для ионов Xe. Закон сохранения энергии в каждом модельном каскаде выполнялся с точностью не хуже 1%. Было выполнено по 2000 испытаний на каждом кластере. Каждое новое испытание проводилось на исходной системе кластер–подложка. Начальные координаты иона выбирались по закону случайных чисел так, что его максимально возможная энергия взаимодействия с хотя бы одним атомом Cu в процессе сближения с кластером была не меньше 37 eV.

3. Результаты и их обсуждение

3.1. Потери энергии бомбардирующих ионов и их рассеяние. На рис. 1, *a* представлены модельные распределения вероятности нахождения бомбардирующих ионов Ag и Xe в кластерах меди и атомных слоях подложки после прекращения расчета испытаний. Вероятности отражения бомбардирующих ионов Ag в область 1 несколько больше, чем ионов Xe. В самих кластерах меди бомбардирующих частиц нет уже после 0.5 ps эволюции столкновений вследствие учета только отталкивающего взаимодействия Cu–ион. С учетом возможности нахождения ионов Ag и Xe в области 2 вероятности нахождения ионов Ag и Xe над подложкой после их взаимодействия с мишенью отличаются незначительно. Заметное отличие вероятностей нахождения ионов Ag и Xe наблюдается в первом атомном слое подложки вследствие значительно большей массы иона Xe по сравнению с атомными массами Cu, C и Ag. Вероятности нахождения ионов Ag и Xe в других областях мишеней отличаются незначительно.

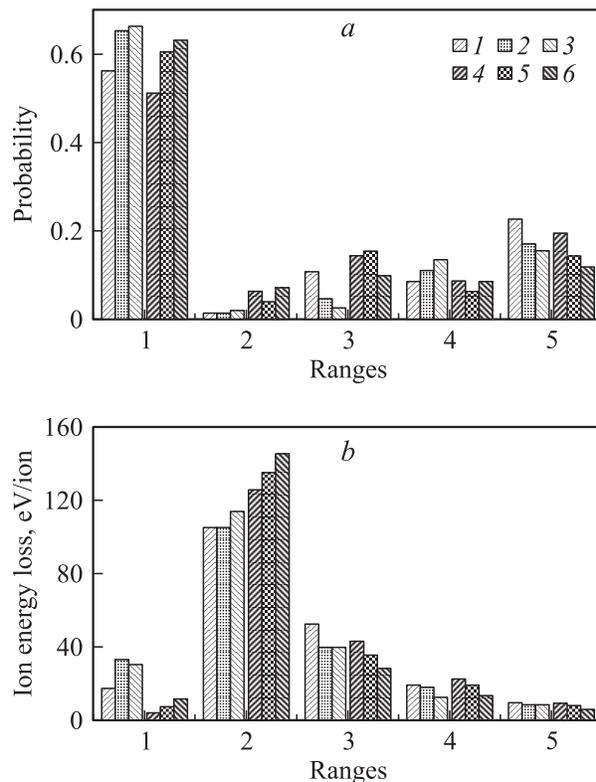


Рис. 1. Распределения вероятности нахождения бомбардирующих ионов (*a*) и средних упругих потерь энергии ионов (*b*) Ag: 1 — (13 Cu), 2 — (27 Cu), 3 — (195 Cu) и Xe: 4 — (13 Cu), 5 — (27 Cu), 6 — (195 Cu) с начальной энергией 200 eV по моделируемым областям (Ranges) мишеней: 1 — обратнорассеянные ионы, 2 — поверхностный кластер; 3 и 4 — первый и второй атомные слои подложки, 5 — пространство за подложкой.

На рис. 1, *b* представлены усредненные по числу испытаний распределения упругих потерь энергии бомбардирующих ионов Ag и Xe в кластерах и атомных слоях подложки. Видно, что для всех рассматриваемых кластеров средние энергии отраженных ионов Xe в 3–4 раза меньше средних энергий отраженных ионов Ag. Для обоих бомбардирующих ионов упругие потери в кластерах меди являются доминирующими и достигают для ионов Xe 60–70%, а для ионов Ag 50–55% от их начальной энергии, имея тенденцию к возрастанию с увеличением размера кластера. В атомных слоях подложки упругие потери энергии ионов Ag и Xe уменьшаются сходным образом.

На рис. 2 представлены угловые полярные распределения рассеянных ионов Ag (*a*) и Xe (*b*). Полярный угол отсчитывался от внешней нормали к поверхности подложки. Для обоих типов ионов и всех рассматриваемых кластеров распределения имеют основной максимум в интервале углов 60–80°, причем максимум в случае Xe демонстрирует четкую тенденцию к смещению в сторону больших полярных углов с ростом размера кластера. Максимум при углах 60–80° является результатом наложения двух интенсивностей отраженных

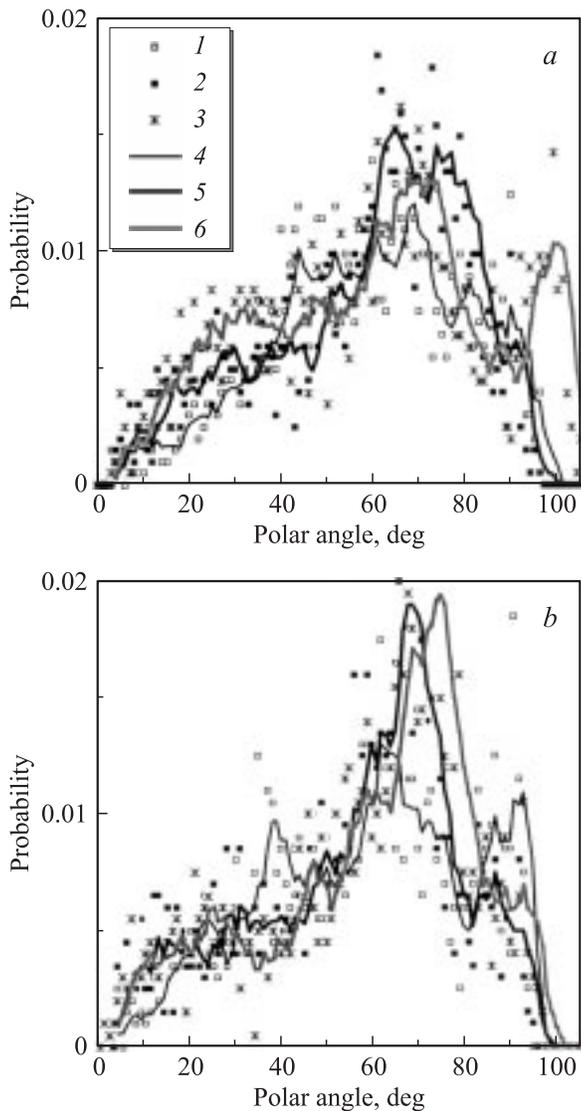


Рис. 2. Распределения вероятности рассеяния ионов Ag (a) и Хе (b) по полярным углам (с разрешением 1°) на кластерах: 1, 4 — (13 Cu); 2, 5 — (27 Cu); 3, 6 — (195 Cu); кривые 4–6 — кусочно-линейные пятиточечные аппроксимации.

ионов: вторично отраженных от подложки ионов, которые предварительно взаимодействовали с кластером, и ионов, отраженных от кластеров без значительного взаимодействия с подложкой (см. п. 3.2). Ряд локальных максимумов, как например в области углов 90°–105° в случае бомбардировки кластера (195 Cu) ионами Ag, возникает как проявление геометрических особенностей рассматриваемых модельных систем кластер/подложка.

3.2. Угловые распределения средних энергий рассеянных ионов. На рис. 3 приведены полярные угловые зависимости средних энергий рассеянных ионов Ag (a) и Хе (b). Общим для всех случаев является максимум в области полярных углов 50°–85°, что в целом совпадает с расположением основного максимума распределения вероятности рассеяния ионов на рис. 2. Таким образом, основной максимум вероятности

рассеяния ионов формируется преимущественно за счет высокоэнергетических отраженных ионов. На рис. 3, a штриховой линией показана аналитически рассчитанная энергия иона Ag после его взаимодействия с одним свободным атомом Cu при начальной энергии иона 200 eV. Из этой зависимости следует, что общая тенденция к росту средней энергии рассеянных ионов Ag с увеличением угла рассеяния определяется парным взаимодействием Ag–Cu, формирующим второй максимум в области углов 90°–105°. На парное взаимодействие накладывается существенное многочастичное взаимодействие в области углов рассеяния 50°–85°. Многочастичное взаимодействие складывается из рассеяния ионов Ag на атомах кластера и во многих случаях последующего взаимодействия иона с подложкой. Многочастичное или многократное взаимодействие иона Ag с атомами кластеров меди складывается из одновременного или соответ-

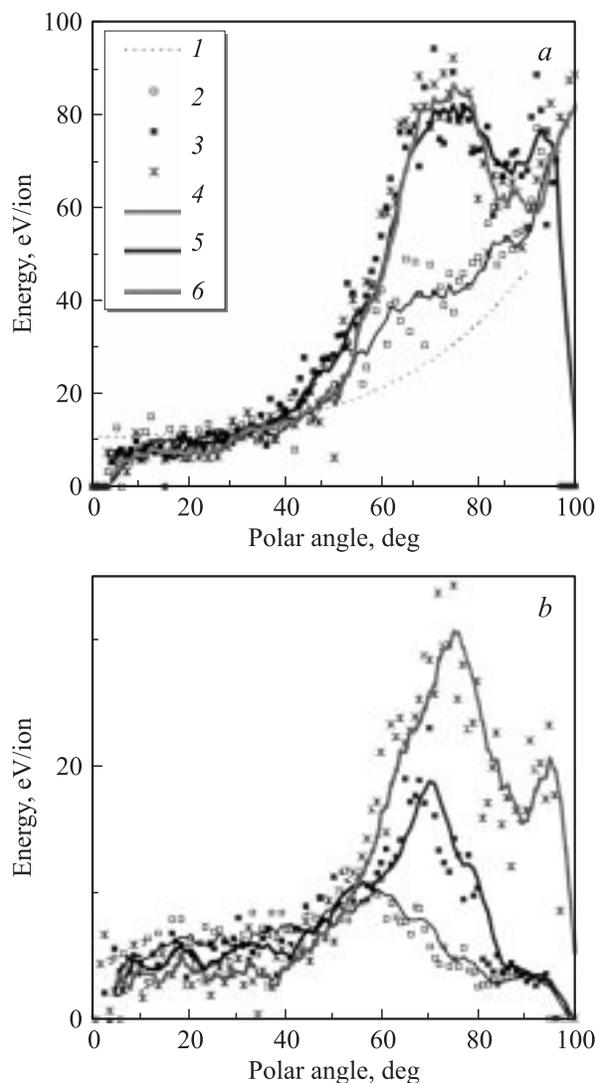


Рис. 3. Распределения средней энергии рассеянных ионов Ag (a) и Хе (b) по полярным углам отлета ионов с разрешением 1° на кластерах: 0 — один Cu атом; 1, 4 (13 Cu); 2, 5 (27 Cu); 3, 6 (195 Cu); кривые 4–6 — кусочно-линейные пятиточечные аппроксимации.

ственно последовательного взаимодействия с несколькими атомами Cu, что приводит к сохранению большей энергии иона по сравнению с энергией рассеянного иона, движущегося в том же направлении после взаимодействия с одним атомом Cu. При рассеянии ионов кластерами в направлениях с полярными углами более 90° происходит вторичное рассеяние иона на подложке (если ион попадает в пределы модельной подложки), которое также имеет многочастичный характер. Падение иона на подложку под большим углом приводит к потере небольшой доли его кинетической энергии и конечному рассеянию иона от подложки также под большим полярным углом. В результате формируется характерный максимум средней энергии рассеянных ионов Ag в области полярных углов $50\text{--}85^\circ$ (рис. 3, *a*). В случае кластера (13 Cu) максимум в области углов $50\text{--}85^\circ$ наименее выражен из-за ограниченных возможностей возникновения многочастичных или многократных взаимодействий иона Ag с атомами Cu.

При малых углах рассеяния ионов Ag доминируют низкие энергии отражения — как результат практически парного взаимодействия Ag–Cu, что подтверждается незначительностью отличий энергии рассеяния при полярных углах $10\text{--}40^\circ$ и энергий парного взаимодействия, приведенных на рис. 3, *a*. Роль графитовой подложки при таких взаимодействиях частиц остается незначительной, хотя возможны вторичные отражения ионов от подложки с низкими энергиями. В случае же сохранения большей энергии иона после взаимодействия с кластером и большого полярного угла падения на подложку происходит, как правило, внедрение иона в графит. Когда энергия иона после взаимодействия с кластером составляет $50\text{--}150\text{ eV}$, критический полярный угол падения иона Ag на подложку с ее разрушением и возможным проникновением иона в подложку, как было получено, составляет $130\text{--}160^\circ$. Эти данные согласуются с экспериментальными результатами [36], где была получена пороговая энергия 43.5 eV проникновения нормально падающих ионов Ag сквозь поверхность (0001) внутрь графитового слоя.

Разница средних энергий рассеянных ионов Ag и Xe, как видно из рис. 1, *b*, обусловлена различными механизмами отражения бомбардирующих ионов Ag и Xe, что проявляется также в совершенно разном характере поведения средних энергий отражения при полярных углах в интервале $85\text{--}105^\circ$. Ионы Xe отражаются от кластера благодаря действию механизма коллективного отражения тяжелой частицы группой более легких атомов Cu. При полярных углах рассеяния до 50° средние энергии отраженных ионов Xe относительно малы (рис. 3, *b*) и отличаются незначительно для разных кластеров, что говорит в пользу идентичности механизмов коллективного отражения тяжелых ионов 3–4 атомами кластеров на малые углы. В случае сохранения после взаимодействия с кластером энергии $\sim 50\text{--}150\text{ eV}$ при полярных углах движения более 135° ионы Xe, как показали испытания, разрушают поверхностный атомный слой графита, теряя при этом большую часть энергии, и во многих случаях

проникают в подложку. Следует отметить, что уже при полярных углах падения на поверхность (0001) графита $\sim 115\text{--}120^\circ$ ионы Ag и Xe при отражении от подложки теряют около половины своей энергии. На рис. 3, *b* прослеживается та же зависимость, что и на рис. 2, *b* — полярный угол максимума средней энергии отраженных ионов Xe возрастает с увеличением размера кластера.

3.3. Полярные и азимутальные распределения расплывленных атомов Cu. На рис. 4 представлены полярные угловые зависимости дифференциального коэффициента расплывления $dY/d\phi$, где ϕ — полярный угол, для одиночных атомов меди (без учета расплывленных димеров, тримеров и т.д.), вылетающих из кластеров (13 Cu), (27 Cu) и (195 Cu) под дей-

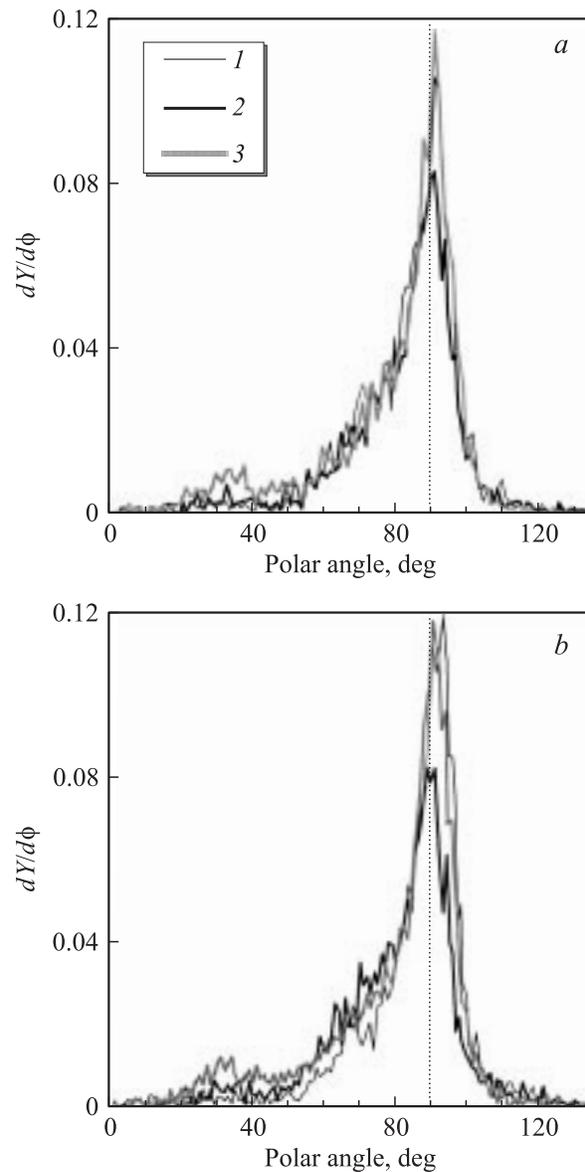


Рис. 4. Зависимость дифференциального коэффициента расплывления атомов Cu ионами Ag (*a*) и Xe (*b*) от полярного угла вылета атомов с разрешением 1° . Кривые: 1 (13 Cu), 2 (27 Cu), 3 (195 Cu).

ствием ионов Ag (*a*) и Xe (*b*) с начальной энергией 200 eV. Видно, что для обоих типов ионов максимум распределения $dY/d\phi$ находится вблизи нормального полярного угла независимо от размера кластера. Не наблюдается принципиальной разницы между полярными распределениями $dY/d\phi$ распыленных атомов в случаях ионов Ag и Xe. Для обоих типов ионов имеют место, по крайней мере, два механизма распыления: механизм атомов отдачи (1–2 столкновения атомов Cu) со случайным и фокусированным направлениями вылета распыленных частиц из кластеров во всем интервале полярных углов и механизм последовательных столкновений (2–4 столкновения атомов Cu в кластерах (27 Cu) и (195 Cu)), часть которых являются фокусированными. Эффективная работа второго механизма определяется наличием свободной поверхности боковых сторон кластеров, через которые осуществляется вылет большей части распыленных атомов меди, и прямолинейных параллельных подложке цепочек атомов (3–6 атомов Cu) в кластерах. Как видно из рис. 4, не существует прямой зависимости между формой полярного распределения и атомной структурой кластера, поскольку не наблюдается качественных различий между полярными распределениями для кластера (13 Cu), с одной стороны, и кластеров (27 Cu) и (195 Cu) — с другой, несмотря на принципиальные различия их атомных структур. В случае кластера (13 Cu) первый механизм определяет распыление во всем диапазоне полярных углов. Некоторое количество распыленных атомов покидает кластеры в направлениях с полярными углами более 90°. Часть этих атомов, как видно из рис. 4, не отражается от модельной подложки вследствие ее пространственной ограниченности.

На рис. 5 представлены азимутальные угловые зависимости дифференциального коэффициента распыления для одиночных атомов $dY/d\theta$, где θ — азимутальный угол отлетающих Cu атомов, для кластеров (13 Cu), (27 Cu) и (195 Cu), бомбардируемых ионами Ag и Xe. Азимутальный угол отсчитывался от направления [1000] против часовой стрелки в плоскости (0001) поверхности графита. Для всех кластеров характерные составляющие формы профилей распределений соответствуют друг другу для случаев ионов Ag и Xe (хотя и могут отличаться по интенсивности), что говорит об аналогичности механизмов распыления кластеров ионами различных типов.

Для кластера (13 Cu) на рис. 5, *a* нет угловой азимутальной периодичности в распределениях распыленных частиц. На рис. 5, *b, c* для кластеров (27 Cu) и (195 Cu) в секторах вблизи углов 30, 90, 150, 210, 270 и 330° видны максимумы дифференциальных коэффициентов распыления для обоих типов ионов. Направления преимущественного распыления атомов Cu по азимуту для кластеров (27 Cu) и (195 Cu) практически совпадают с направлениями $\langle 1100 \rangle$ подложки графита. Наибольшая открытость атомных структур этих поверхностных кластеров обнаружена соответственно в направлениях $\langle 1100 \rangle$,

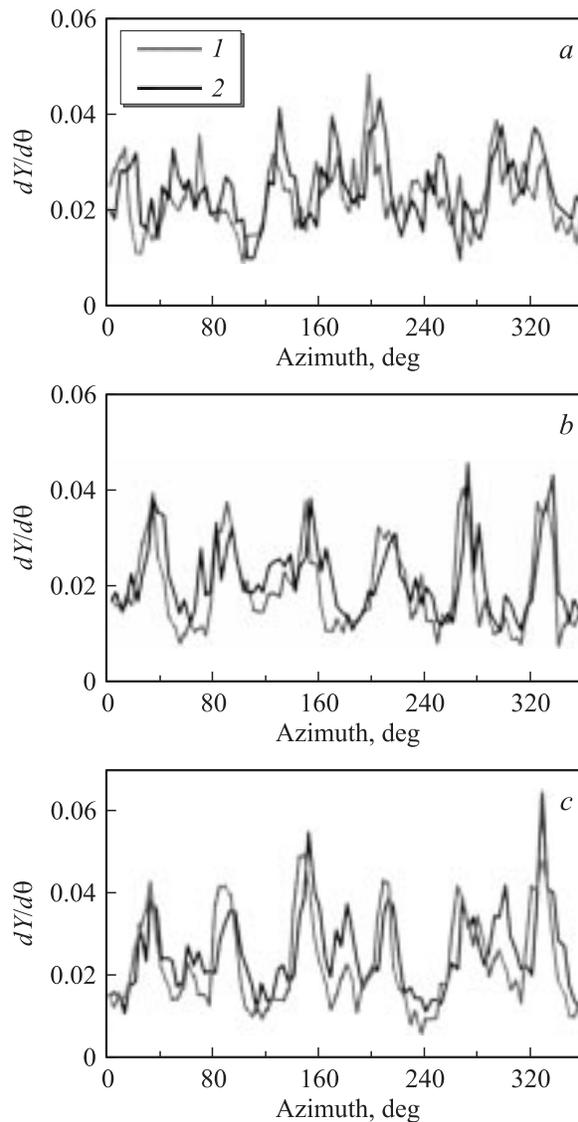


Рис. 5. Зависимость дифференциального коэффициента распыления атомов Cu из кластеров: *a* — (13 Cu), *b* — (27 Cu), *c* — (195 Cu) ионами Ag (кривая 1) и Xe (кривая 2) от азимутального угла вылета атомов с разрешением 4°.

вдоль которых формируются параллельные последовательности из 3–6 атомов Cu (ориентированные по азимуту атомной плоскостью графита (0001)). Таким образом, преимущественное распыление поверхностных кластеров меди (27 Cu) и (195 Cu) в направлениях $\langle 1100 \rangle$ связано с генерацией в кластерах 2–4 атомных фокусированных столкновений. Для кластера (13 Cu) отсутствие азимутальной периодичности интенсивности распыления связано с малым числом атомов Cu и отличной от больших кластеров атомной структурой. Кластер (13 Cu) и на подложке остается практически идеальным кубооктаэдром.

Из рис. 5, *b, c* видно, что в случае бомбардировки кластеров (27 Cu) и (195 Cu) ионами Xe рядом с основными пиками распыления, которые совпадают по

азимуту с пиками, возникающими в случае бомбардировки ионами Ar, в некоторых случаях возникают дополнительные максимумы. Например, два пика для кластера (195 Cu) имеют место в области азимутальных углов 180° и 300° . В случае ионов Ar при этих азимутальных углах также имеют место незначительные всплески интенсивности распыления, однако они малы по сравнению с основными максимумами. Предположительно, ионы Xe, внедряясь в кластер, увеличивают открытость его атомной структуры, что приводит к возрастанию интенсивности распыления в направлениях, остающихся более закрытыми при бомбардировке ионами Ar.

3.4. Коэффициенты распыления. На рис. 6 представлены значения коэффициентов распыления рассмотренных кластеров с учетом одиночных атомов, димеров, тримеров и т.д. при бомбардировке ионами Ar (кривые 1, 2) и Xe (кривые 3, 4). Многоатомные распыленные частицы Cu составляют по числу атомов 10–20% от всех распыленных атомов Cu и в случае ионов Ar (10% для (13 Cu) и 20% для (195 Cu)) и $\sim 20\%$ для всех кластеров в случае ионов Xe. Отличия значений модельных коэффициентов распыления для частиц Cu, покидающих кластеры в диапазоне полярных углов до 90° (кривые 1 (Ar), 4 (Xe)) и для всех полярных углов (кривые 2 (Ar), 3 (Xe)), достигают 50%. С учетом возможного прилипания некоторых распыленных атомов кластера к подложке при полярных углах их отлета от кластера более 90° истинные значения коэффициента распыления находятся между полным коэффициентом распыления атомов Cu и коэффициентом распыления атомов Cu для углов менее 90° . Значения коэффициента распыления для ионов Xe больше, чем

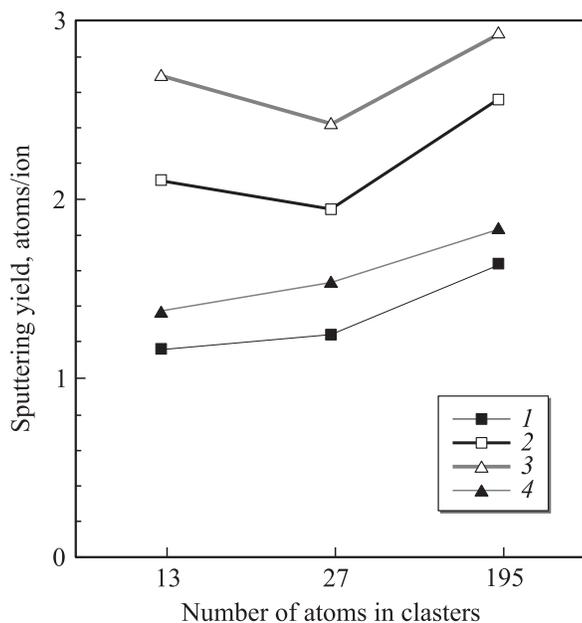


Рис. 6. Значения коэффициента распыления кластеров (13 Cu), (27 Cu), (195 Cu) в диапазоне полярных углов вылета атомов Cu до 90° (кривые 1 (Ar), 4 (Xe)) и для всего диапазона полярных углов (кривые 2 (Ar), 3 (Xe)) при начальной энергии ионов 200 eV.

Энергетические и размерные параметры кластеров

Параметры кластеров	(13 Cu)	(27 Cu)	(195 Cu)
$U_{\text{sub}}, \text{eV}$	2.57	2.65	3.08
$U_{\text{coh}}, \text{eV}$	2.58	9.89	22.65
N_a	3	14	32
$H_n, \text{\AA}$	5.8	5.9	14.2

для ионов Ar, во всех рассмотренных случаях. Очевидно, это следствие различия упругих потерь энергии ионов Ar и Xe в кластерах (см. п. 3.1). Полные коэффициенты распыления поверхностных кластеров имеет незначительные минимумы в случае кластера (27 Cu) и максимальные значения для кластера (195 Cu) для обоих типов ионов. Коэффициент распыления графита при энергии ионов Ar и Xe 200 eV оказался незначительным и не обсуждался в работе.

В таблице приведены энергетические и размерные параметры моделируемых кластеров. Энергия сублимации U_{sub} кластеров незначительно возрастает с увеличением числа атомов, составляющих кластер. Энергия когезии U_{coh} модельных кластеров с подложкой прямо пропорциональна числу атомов Cu N_a , находящихся на границе раздела медь/графит (см. раздел 2). Высота кластера H_n определялась как расстояние от подложки графита до максимально удаленного от нее атома кластера. Уменьшение значения полного коэффициента распыления кластера (27 Cu) по сравнению с (13 Cu), очевидно, обусловлено изменением характера присоединения кластера к подложке с увеличением его размера, что видно из значений параметров N_a и U_{coh} . Рост значения N_a способствует более эффективной передаче энергии, привнесенной бомбардирующим ионом, от кластера в подложку, уменьшая долю энергии иона, идущую на распыление кластера. Высоты H_n кластеров (13 Cu) и (27 Cu) практически не отличаются, и поэтому их разница не влияет на изменение коэффициента распыления. Большой коэффициент распыления кластера (195 Cu) по сравнению с коэффициентом распыления кластера (27 Cu) обусловлен значительно большей высотой кластера (195 Cu). Энергия иона, передаваемая верхним атомам такого кластера, состоящего из более чем трех атомных слоев, не достигает подложки за характерное время распыления, которое одного порядка с периодом колебания атома в решетке ($\sim 10^{-13}$ s). Поэтому в кластерах с большой высотой H_n роль площади границы раздела медь/графит в распылении незначительна, что видно из данных таблицы и рис. 6.

4. Заключение

В работе выполнено молекулярно-динамическое моделирование взаимодействия ионов Ar и Xe, имеющих начальную энергию 200 eV, с поверхностными кластерами меди, состоящими из 13, 27 и 195 атомов Cu. Показано, что коэффициенты отражения ионов Ar и

Хе от кластеров меди отличаются незначительно, хотя энергия отраженных ионов Хе значительно меньше, чем ионов Ag. Значения коэффициента распыления кластеров ионами Хе больше, чем ионами Ag. Идентифицировано два механизма распыления кластеров, приводящих к максимуму интенсивности распыления при полярных углах вблизи нормального, а также к возникновению периодичности максимумов в азимутальных распределениях интенсивности распыления с периодом 60° . Азимутальная периодичность в распылении кластеров определяется наиболее открытыми направлениями $\langle 1100 \rangle$ их атомной структуры, возникающими при взаимодействии поверхностных кластеров с подложкой (0001) графита.

Один из авторов (Г.В.К.) считает своим приятным долгом выразить признательность Technische Universität Wien (Венский технический университет, Вена, Австрия) и Christian-Albrechts-Universität (Университет Кристиана Альбрехта, Киль, Германия) за финансовую поддержку во время работы в Institut für Allgemeine Physik (Институт общей физики) и Lehrstuhl für Materialverbund (Кафедра многокомпонентных материалов) соответственно.

Список литературы

- [1] W.F. Egelhoff, Jr., G.G. Tibbetts. *Phys. Rev. B* **19**, 5028 (1979).
- [2] I. Jurka. *Surf. Sci.* **232**, 307 (1990).
- [3] S.Di Nardo, L. Lozzi, M. Passacantando, P. Picozzi, S. Santucci, M.De Crescenzi. *Surf. Sci.* **307–309**, 922 (1997).
- [4] P. Marcus, C. Hinnen. *Surf. Sci.* **392**, 134 (1997).
- [5] D.-Q. Yang, E. Sacher. *Appl. Surf. Sci.* **195**, 187 (2002).
- [6] V. Zaporotchenko, K. Behnke, T. Strunskus, F. Faupel. *Surf. Interf. Anal.* **30**, 439 (2000).
- [7] Y. Tai, J. Murakami, C. Majumder, V. Kumar, H. Mizuseki, Y. Kawazoe. *J. Chem. Phys.* **117**, 9, 4317 (2002).
- [8] J. Lehmann, M. Merschedorf, W. Pfeiffer, A. Thon, S. Voll, G. Gerber. *J. Chem. Phys.* **112**, 12, 5428 (2000).
- [9] R. Anton, I. Schneiderei. *Phys. Rev. B* **58**, 20, 13 874 (1998–II).
- [10] R. Smith, K. Beardmore. *Thin Solid Films* **272**, 255 (1996).
- [11] K. Nordlund, J. Keinonen, T. Mattila. *Phys. Rev. Lett.* **77**, 4, 699 (1996).
- [12] R.P. Webb, I.H. Wilson. *Nucl. Instr. and Meth. B* **202**, 217 (2003).
- [13] Z.Y. Pan, Z.Y. Man, M. Hou. *Z. Phys. D* **41**, 275 (1997).
- [14] H. Rafii-Tabar, H. Kamiyama, M. Cross. *Surf. Sci.* **385**, 187 (1997).
- [15] J.W. Kang, H.J. Hwang. *Comp. Mater. Sci.* **23**, 105 (2002).
- [16] F.J. Palacios, M.P. Iniguez, M.J. Lopez, J.A. Alonso. *Comp. Mater. Sci.* **17**, 515 (2000).
- [17] D. Pantelios, G.A. Evangelakis. *Comp. Mater. Sci.* **25**, 493 (2002).
- [18] G.W. Wu, K.Y. Chan. *Surf. Sci.* **365**, 38 (1996).
- [19] G. Betz, W. Husinsky. *Nucl. Instr. and Meth. B* **122**, 311 (1997).
- [20] I. Yamada, J. Matsuo, N. Toyoda. *Nucl. Instr. and Meth. B* **206**, 820 (2003).
- [21] Z. Insepov, L.P. Allen, C. Santeufemio, K.S. Jones, I. Yamada. *Nucl. Instr. and Meth. B* **202**, 261 (2003).
- [22] X.M. Wang, H. Chen, L. Shao, J.R. Liu, W.K. Chu. *Nucl. Instr. and Meth. B* **196**, 100 (2002).
- [23] M. Henkel, H.M. Urbassek. *Nucl. Instr. and Meth. B* **145**, 503 (1998).
- [24] G. Betz, W. Husinsky. *Nucl. Instr. and Meth. B* **102**, 281 (1995).
- [25] Z. Postawa, K. Ludwig, J. Piaskowy, K. Krantzman, N. Winograd, B.J. Garrison. *Nucl. Instr. and Meth. B* **202**, 168 (2003).
- [26] J.M. Haile. *Molecular Dynamics Simulation—Elementary Methods*. Wiley–Interscience, N. Y. (1992). 386 p.
- [27] Г.В. Корнич, Г. Бетц, В.И. Запорожченко, А.И. Бажин. Письма в ЖТФ **29**, 22, 33 (2003).
- [28] Г.В. Корнич, Г. Бетц, А.И. Бажин. ФТГ **43**, 1, 30 (2001).
- [29] Г.В. Корнич, Г. Бетц, А.И. Бажин, В.Г. Корнич. Изв. АН. Физическая серия **66**, 1, 89 (2002).
- [30] H. Gades, H.M. Urbassek. *Nucl. Instr. and Meth. B* **69**, 232 (1992).
- [31] G. Betz, R. Kirchner, W. Husinsky, F. Rüdener, H.M. Urbassek. *Rad. Eff. and Def. in Solids.* **130–131**, 251 (1994).
- [32] В. Экштайн. Компьютерное моделирование взаимодействия частиц с поверхностью твердого тела. Пер. с англ. Мир, М. (1995). 320 с.
- [33] J. Tersoff. *Phys. Rev.* **39**, 5566 (1989).
- [34] S. Dorfman, K.C. Mundim, D. Fuks, A. Berner, D.E. Ellis, J. Van Humbeeck. *Mat. Sci. and Eng. C* **15**, 191 (2001).
- [35] H.J. Berendsen, J.P.M. Postma, W.F.V. Gunsteren, A. Di-Nola, J.R. Haak. *J. Chem. Phys.* **81**, 3684 (1984).
- [36] D. Marton, H. Bu, K.J. Boyd, S.S. Todorov, A.H. Al-Bayati, J.W. Rabalais. *Surf. Sci. Lett.* **326**, 489 (1995).