

02;11

## Распыление поверхностных кластеров меди димерами $\text{Cu}_2$ низких энергий

© Вал.Г. Корнич, G. Betz, Г.В. Корнич

Запорожский национальный технический университет,  
Запорожье, Украина  
E-mail: gkornich@zntu.edu.ua  
Inst. für Allgemeine Physik, Technische Universität Wien,  
A-1040, Wien, Austria

Поступило в Редакцию 6 ноября 2007 г.

Выполнено молекулярно-динамическое моделирование распыления кластера, состоящего из 27 атомов Cu, с поверхности (0001) графита двухатомными частицами  $\text{Cu}_2$  с энергиями 100, 200 и 400 eV. Обсуждаются причины большего выхода распыления из кластера  $\text{Cu}_{27}$  при бомбардировке димерами  $\text{Cu}_2$  по сравнению с мономерами Xe и Cu.

PACS: 02.70.Ns, 07.50.Tr, 68.47.De, 68.49.Sf, 68.55.Jk, 81.15.Aa, 81.15.Cd

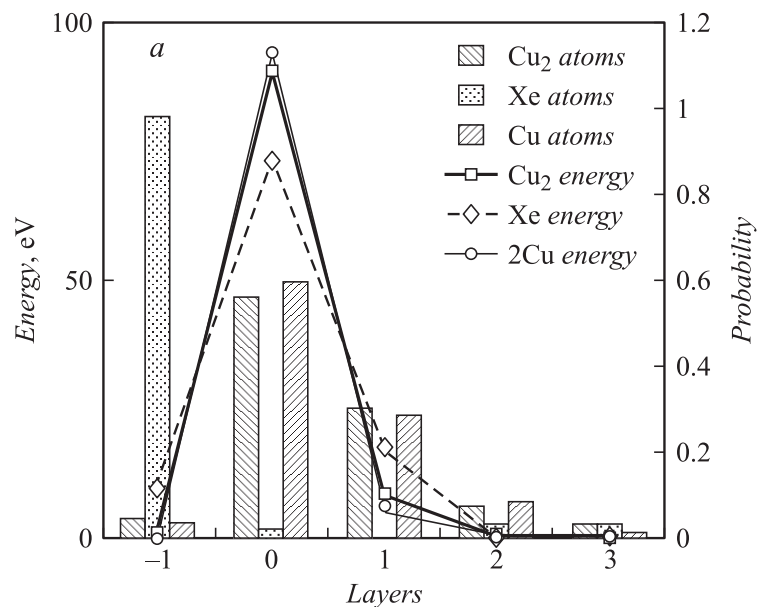
За последнее десятилетие появилось много работ, в которых обсуждается активизация приповерхностных столкновительных процессов при бомбардировке мишеней многоатомными частицами keV-ных энергий по сравнению с одноатомными, в том числе кластерами атомов [1,2] и фуллеренами [3,4]. Большой выход распыления в случае многоатомных налетающих частиц — одно из проявлений этого эффекта, который уже используется для повышения чувствительности вторично-ионной масс-спектрометрии [5–7], интенсификации перемешивания [8] и оптимизации послойного анализа [9], а также в технологиях модификации поверхности [10,11].

Несмотря на большое число публикаций, практически отсутствуют систематические сравнительные модельные исследования влияния многоатомности бомбардирующих частиц на каскадные процессы в нанобъектах и их внешние проявления, в частности на распыление поверхностных нанокластеров при начальных энергиях до нескольких сотен электрон-вольт. В настоящей работе на основе молекулярно-динамической модели [12–16] рассмотрено распыление поверхностного

кластера, состоящего, как и в [14], из 27 атомов меди  $\text{Cu}_{27}$ , димерами  $\text{Cu}_2$  с энергиями 100, 200 и 400 eV. Модельные результаты сравниваются с ранее полученными расчетными данными бомбардировки аналогичной мишени, близкими по массе ионами Хе при тех же энергиях [14,16] и с результатами распыления кластера одноатомными частицами Си с энергиями соответственно 50, 100 и 200 eV.

В работе графитовая подложка (0001) моделировалась двумя атомными слоями, каждый из которых включал по 960 атомов углерода. Поверхностный кластер  $\text{Cu}_{27}$  состоял из трех атомных слоев, которые включали 14, 10 и 3 атома Си по мере удаления от подложки. Методика создания двухкомпонентных систем медный кластер–подложка графита, а также используемый молекулярно-динамический алгоритм подробно изложены в [14]. Для каждой начальной энергии было выполнено по 2000 испытаний падения димеров  $\text{Cu}_2$  и по 500 испытаний падения мономеров Си на мишень нормально относительно подложки. При этом начальное положение димера в пространстве относительно мишени определялось генератором случайных чисел таким образом, чтобы энергия взаимодействия хотя бы одного из атомов димера с атомами поверхностного кластера  $\text{Cu}_{27}$  могла бы превысить 37 eV в процессе эволюции системы. Подобный критерий для одноатомных бомбардирующих частиц аргона и ксенона был использован в [12–16], а также в этой модели для мономеров Си.

При сравнении результатов бомбардировки частицами  $\text{Cu}_2$  и Хе с близкими массами и равными начальными энергиями различия в значениях выхода распыления возникают за счет взаимодействия поверхностного кластера сразу с двумя налетающими атомами Си вместо одного Хе. Димер  $\text{Cu}_2$  распадается при столкновении с кластером  $\text{Cu}_{27}$  на составляющие атомы, каждый из которых имеет первоначально половину исходной энергии. Частица  $\text{Cu}_2$  демонстрирует большие упругие потери энергии в кластере по сравнению с Хе (рис. 1). В то же время упругие потери энергии налетающих мономеров Си в кластере и атомных слоях подложки, удвоенные на рис. 1 для сравнения с потерями частиц  $\text{Cu}_2$  и Хе, имеющих по условиям сравнения вдвое большую начальную энергию, почти идентичны потерям энергии  $\text{Cu}_2$ . Как видно из рис. 1, значительная часть атомов налетающих димеров остается в кластере благодаря притягивающей части потенциала Си–Си [17], тогда как большинство частиц Хе, взаимодействие которых с атомами мишени моделируется отталкивающим потенциалом



**Рис. 1.** Вероятность распределения по слоям мишени бомбардирующих частиц  $\text{Cu}_2$ , Cu, Xe и их упругих потерь энергии для начальных энергий:  $a$  — 100,  $b$  — 200 и  $c$  — 400 eV ( $\text{Cu}_2$ , Xe), а также  $a$  — 50,  $b$  — 100 и  $c$  — 200 (Cu). Упругие потери энергии для налетающих мономеров Cu удвоены на рисунке.

Зиглера–Бирзака–Литтмарка (Ziegler–Biersack–Littmark) [18], отражаются или проникают сквозь мишень. С ростом энергии вероятность остаться в кластере для атомов налетающего димера  $\text{Cu}_2$  уменьшается, а вероятность отражения возрастает из-за усиления роли подложки в столкновительных процессах.

На рис. 2 представлены зависимости коэффициента распыления кластера  $\text{Cu}_{27}$  от начальной энергии для случаев бомбардировки частицами  $\text{Cu}_2$ , Cu и Xe. Налетающие мономеры Cu брались с энергиями 50, 100 и 200 eV с целью фактического моделирования вклада в распыление одного атома димера при общей энергии димера 100, 200 и 400 eV. Удвоенный средний коэффициент распыления в случае налетающих мономеров Cu дает составляющую распыления для налетающего

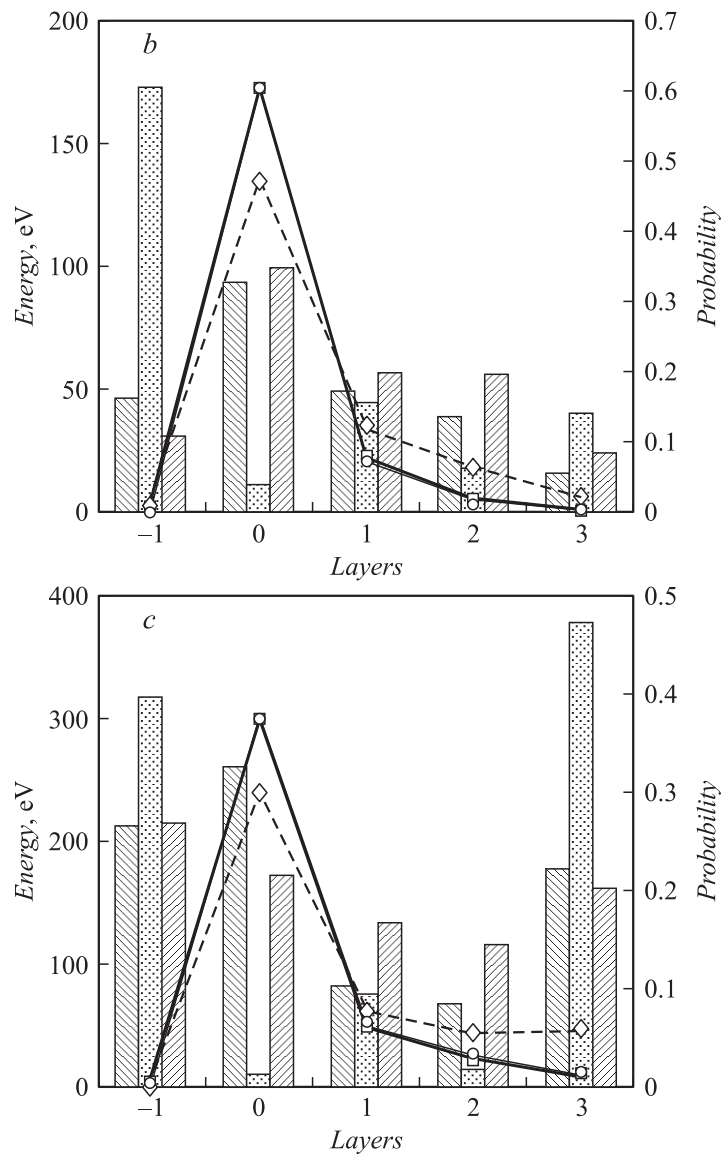
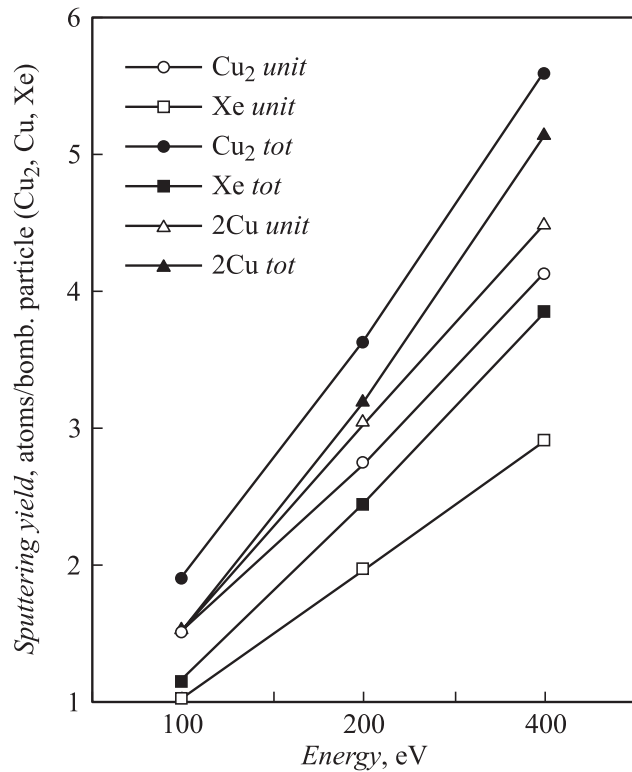


Рис. 1 (продолжение).



**Рис. 2.** Зависимость коэффициента распыления и его одноатомной составляющей для кластера  $\text{Cu}_{27}$  от начальных энергий бомбардирующих частиц  $\text{Cu}_2$ ,  $\text{Cu}$ ,  $\text{Xe}$ . В случае налетающих мономеров  $\text{Cu}$  значения коэффициента распыления удваиваются и на рисунке соответствуют их удвоенным начальным энергиям.

димера  $\text{Cu}_2$  без учета нелинейных эффектов перекрытия каскадов, инициированных атомами димера  $\text{Cu}_2$ .

Одноатомная составляющая коэффициента распыления (вклад распыленных одиночных атомов  $\text{Cu}$ )  $Y_{\text{Cu}_2, \text{unit}}$  поверхностного кластера при бомбардировке димерами  $\text{Cu}_2$  для всех начальных энергий больше в  $\sim 1.4$  раза, чем в случае  $\text{Xe}$   $Y_{\text{Xe}, \text{unit}}$ . Полные коэффициенты распыления  $Y_{\text{Cu}_2, \text{tot}}$  и  $Y_{\text{Xe}, \text{tot}}$  соотносятся как 1.45–1.66 для различных начальных

энергий (рис. 2). При этом абсолютная разность увеличивающихся с ростом начальной энергии значений коэффициента распыления для обоих типов бомбардирующих частиц возрастает. Видно также, что удвоенная одноатомная составляющая коэффициента распыления в случае налетающих частиц  $\text{Cu}$   $2Y_{\text{Cu},\text{unit}}$  при энергии 50 eV практически совпадает с одноатомной составляющей коэффициента распыления  $Y_{\text{Cu}_2,\text{unit}}$  для случая бомбардирующих частиц  $\text{Cu}_2$  с энергией 100 eV, однако для больших энергий наблюдаются заметные различия. Полный удвоенный коэффициент распыления  $2Y_{\text{Cu},\text{tot}}$  в случае бомбардирующих мономеров  $\text{Cu}$  возрастает, как видно из рис. 2, быстрее с ростом начальной энергии, чем его одноатомная составляющая  $2Y_{\text{Cu},\text{unit}}$ . При этом он меньше, чем полный коэффициент распыления  $Y_{\text{Cu}_2,\text{tot}}$  в случае налетающих частиц  $\text{Cu}_2$ , практически, на одну и ту же абсолютную величину независимо от начальной энергии бомбардирующих частиц. Еще более значительными выглядят различия коэффициентов распыления кластера  $\text{Cu}_{27}$  для налетающих частиц  $\text{Cu}_2$  и  $\text{Cu}$  с равными энергиями: 100 eV — 1.9 atoms/ion ( $\text{Cu}_2$ ) и 1.6 atoms/ion ( $\text{Cu}$ ); 200 eV — 3.63 atoms/ion ( $\text{Cu}_2$ ) и 2.57 atoms/ion ( $\text{Cu}$ ). Эти результаты согласуются качественно с данными [7,19], демонстрирующими существенно большие значения выхода распыления при бомбардировке поверхностей многоатомными частицами по сравнению с одноатомными.

Анализ результатов показывает, что больший коэффициент распыления в случае  $\text{Cu}_2$  по сравнению с удвоенным коэффициентом распыления для бомбардирующих мономеров  $\text{Cu}$  обусловлен перекрытием столкновительных атомных последовательностей от обоих атомов налетающего димера  $\text{Cu}_2$ . Отличия потерь энергии в кластере для обоих типов частиц с учетом их удвоения для налетающих мономеров  $\text{Cu}$  пренебрежимо малы (см. выше) и не могут быть причиной заметных различий выходов распыления. Очевидно, в зоне перекрытия каскадов происходят нарушение атомной структуры кластера и ослабление межатомных связей, что увеличивает вероятность выталкивания какой-либо частицы кластера за его пределы. Значительный вклад в различие выходов распыления в данных условиях вносят многоатомные фрагменты кластера.

Еще одна причина увеличения коэффициента распыления в случае  $\text{Cu}_2$  при сравнении с  $\text{Xe}$  проявляется в различии результатов распыления для бомбардирующих мономеров  $\text{Cu}$  и  $\text{Xe}$  (см. рис. 2) и

связана с отличием потерь энергии налетающих частиц в кластере. Потери энергии в кластере в случае димеров Cu<sub>2</sub>, практически равные удвоенным значениям потерь частиц Cu, больше в ~ 1.2–1.3 раза по сравнению с потерями энергии частиц Xe. Очевидно, это связано с меньшей средней глубиной проникновения атома Cu в мишень и более эффективной передачей энергии между одинаковыми атомами, один из которых — бомбардирующий, чем между атомами Cu и Xe.

## Список литературы

- [1] Bouneau S., Brunelle A., Della-Negra S., Depauw K., Jacquet D. et al. // *Phys. Rev.* 2006. B. 65. P. 144106–144112.
- [2] Brunelle A., Della-Negra S., Depauw J., Jacquet D., Le Beyec Y., Pautrat M., Schoppmann Ch. // *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research.* B. 1997. V. 125. P. 207–213.
- [3] Postawa Z., Czerwinski B., Szewczyk M., Smiley E.J. // *J. Phys. Chem.* 2004. V. B108. P. 7831–7838.
- [4] Delcorte A., Garrison B.J. // *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research.* B. 2007. V. 255. P. 223–228.
- [5] Locklear J.E., Guillermier C., Verkhoturov S.V., Schweikert E.A. // *Applied Surface Science.* 2006. V. 252. P. 6624–6627.
- [6] Wucher A. // *Appl. Surf. Sci.* 2006. V. 252. P. 6482–6489.
- [7] Postawa Z., Czerwinski B., Szewczyk M., Smiley E.J., Winograd N., Garrison B.J. // *Anal. Chem.* 2003. V. 75. P. 4402–4407.
- [8] Ping Shi, Fu-Rong Ding, Yao Wang, Rui Nie, Hong Ji Ma // *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research.* B. 2006. V. 251. P. 306–309.
- [9] Cheng J., Winograd N. // *Anal. Chem.* 2005. V. 77. P. 3651–3659.
- [10] Yamada I., Matsuo J., Insepov Z., Aoki T., Seki T., Yoyoda N. // *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research.* B. 2000. V. 164–165. P. 944–959.
- [11] Seki T., Kaneko T., Takeuchi D., Aoki T., Matsuo J., Insepov Z., Yamada I. // *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research.* B. 1997. V. 121. P. 498–502.
- [12] Корнич Г.В., Бетц Г., Запорожченко В.И., Бажин А.И. // *Письма в ЖТФ.* 2003. Т. 29. В. 22. С. 33–38.
- [13] Корнич Г.В., Бетц Г., Запорожченко В.И., Бажин А.И. // *Известия РАН. Сер. физ.* 2004. Т. 68. № 3. С. 304–307.
- [14] Kornich G.V., Betz G., Zaporozhchenko V., Bazhin A.I., Faupel F. // *Nuclear Instruments and Methods.* B. 2005. V. 227. N 1–4. P. 261–270.
- [15] Корнич Г.В., Бетц Г., Запорожченко В.И., Фаупел Ф., Лозовская Л.И. // *ФТТ.* 2005. Т. 47. В. 10. С. 1907–1913.

- [16] Kornich G.V., Betz G., Zaporozhchenko V., Pugina K.V. // Surface Science. 2007. V. 601. P. 209–217.
- [17] Gades H., Urbassek H.M. // Nucl. Instr. and Meth. B. 1992. V. 69. P. 232–241.
- [18] Экутайн В. Компьютерное моделирование взаимодействия частиц с поверхностью твердого тела: Пер. с англ. М.: Мир, 1995. 321 с. (Translated from Eckstein W. Computer Simulaton of Ion-Solid Interactions. Berlin-Heidejburg: Springer-Verlag, 1991. 296 p.).
- [19] Colla T.J., Aderjan R., Kissel R., Urbassek H.M. // Phys. Rev. B. 2000. V. 62. N 12. P. 8487–8493.