

Взаимодействие низкоэнергетических димеров Cu_2 с кластерами меди на поверхности графита

© В.Г. Корнич¹, G. Betz², Г.В. Корнич³, В.И. Шульга⁴

¹ Санкт-Петербургский государственный университет,
Санкт-Петербург, Россия

² Technische Universität Wien,
Wien, Austria

³ Запорожский национальный технический университет,
Запорожье, Украина

⁴ Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова,
Москва, Россия

E-mail: gkornich@zntu.edu.ua

(Поступила в Редакцию 25 декабря 2009 г.
В окончательной редакции 17 марта 2010 г.)

Проведено молекулярно-динамическое моделирование распыления кластеров, состоящих из 13, 27 и 75 атомов Cu , с поверхности (0001) графита при бомбардировке димерами Cu_2 с энергиями 100, 200 и 400 eV. Выполнен сравнительный анализ распределений обратнорассеянных частиц и их энергий по полярным углам, а также распыленных атомов по энергиям. Обсуждаются причины большего выхода распыления из поверхностных кластеров при их бомбардировке димерами по сравнению с мономерами Cu и Xe . Показано, что в случае бомбардировки димерами существенную роль в распылении поверхностных кластеров играет наложение каскадов соударений, инициированных каждым из атомов падающего димера. Различия распыления при кластерной и атомной бомбардировках особенно сильно проявляются в случае больших поверхностных кластеров.

Работа выполнена при частичной финансовой поддержке Министерства образования и науки Украины (тема ДБ 04317).

1. Введение

За последние пятнадцать лет появилось большое число публикаций, в которых обсуждается эффект синергизма, т.е. усиления столкновительных процессов вблизи поверхности при бомбардировке твердотельных материалов многоатомными частицами (кластерами) по сравнению с отдельными атомами той же скорости. Этот эффект проявляется, например, в резком увеличении выхода распыленных частиц в случае бомбардировки поверхности нанокластерами металлов [1,2] и фуллеренами [3,4] с энергиями от одного до сотен keV. Более интенсивное распыление поверхности кластерами позволяет повысить чувствительность вторично-ионной масс-спектрометрии [5–7], усилить перемешивание атомов вблизи поверхности [8], оптимизировать методы послойного анализа [9] и модификации поверхности [10,11].

В связи с развитием нанотехнологий большой интерес представляет также обратная задача — взаимодействие пучков атомных частиц с нанокластерами, расположенными на поверхности твердого тела [12–14]. В качестве бомбардирующих частиц могут выступать как отдельные атомы, так и многоатомные частицы (димеры, тримеры, крупные кластеры атомов, фуллерены, молекулы и т.д.). В литературе довольно подробно рассмотрены механизмы десорбции поверхностных нанокластеров и больших молекул, активируемых высокоэнергетическими одно- и многоатомными частицами [15–20], моделировалось

распыление кластеров, состоящих из тысяч атомов [21]. Вместе с тем многие вопросы фрагментарного распыления поверхностных нанокластеров и влияния многоатомности бомбардирующих частиц на соответствующие каскадно-столкновительные процессы в настоящее время изучены слабо, особенно при энергиях пучка до нескольких сотен eV.

В настоящей работе на основе молекулярно-динамической модели [22–27] рассмотрено распыление кластеров, состоящих из 13, 27 и 75 атомов меди, с поверхности (0001) графита при бомбардировке димерами Cu_2 с начальной энергией 100, 200 и 400 eV. Результаты моделирования сравниваются с расчетами по распылению аналогичных мишеней близкими по массе ионами Xe при тех же энергиях [24,26] и отдельными атомами Cu с энергиями 50, 100 и 200 eV соответственно.

2. Модель

В работе графитовая подложка (0001) моделировалась двумя атомными слоями, каждый из которых состоял из 792, 960 и 1500 атомов углерода для кластеров Cu_{13} , Cu_{27} и Cu_{75} соответственно. Атомы Cu взаимодействовали между собой согласно многочастичному потенциалу [28], сопряженному при больших энергиях взаимодействием с потенциалом Борна–Майера [29]. Взаимодействие атомов углерода описывалось потенциалом

Терсоффа [30], который при больших энергиях взаимодействия соединялся посредством функции связи с потенциалом отталкивания Зиглера–Бирзака–Литмарка (ЗБЛ) [31]. Взаимодействие Cu – C описывалось потенциалом Леннарда–Джонса [32] с радиусом обрезания 3.75 Å, соединенным посредством функции связи при больших энергиях с потенциалом ЗБЛ. Потенциал ЗБЛ использовался и для описания взаимодействия Xe с атомами Cu и C . По периметру слоев графита задавались периодические граничные условия [33] и вводился диссипативный слой [34] без учета тепловых колебаний атомов. Моделируемое время развития одного каскада столкновений составляло 2 ps. Системы кластер–подложка создавались путем релаксации в течение 10 ps первоначально уединенных и минимизированных по энергии (за счет сил межатомного взаимодействия) кластеров меди на свободной поверхности (0001) графита. Методика построения модельных систем медный кластер–подложка графита более подробно изложена в [22–24].

Для каждого кластера и начальной энергии было выполнено по 2000 испытаний падения димеров Cu_2 (или мономеров Cu) на мишень по нормали относительно подложки. При этом начальное положение димера в пространстве относительно мишени определялось генератором случайных чисел с таким расчетом, чтобы энергия взаимодействия хотя бы одного из атомов димера с атомами поверхностного кластера могла превысить в процессе эволюции системы некоторый заданный порог, гарантировавший моделирование 99% актов распыления. Подобный критерий при бомбардировке поверхностных кластеров одноатомными частицами аргона и ксенона был использован в [22–26], а также в настоящей работе для мономеров Cu .

3. Результаты и их обсуждение

3.1. Потери энергии бомбардирующих частиц в мишени. Моделирование показало качественное подобие послыных распределений упругих потерь энергии и конечных положений налетающих частиц Cu и Cu_2 для всех рассматриваемых кластеров. На рис. 1 приведены распределения по слоям мишени конечного положения атомов и упругих потерь энергии этих атомов для трех типов бомбардирующих частиц: Cu_2 , Xe и Cu в случае поверхностного кластера Cu_{75} . Сравнение результатов расчета для димеров Cu_2 и одиночных атомов Xe , имеющих практически равные массы и одинаковые начальные энергии, показывает, что различия столкновительных процессов вызваны взаимодействием поверхностного кластера одновременно с двумя налетающими атомами Cu вместо одного атома Xe . Большинство атомов Xe отражается от кластера при низких энергиях (за счет коллективных взаимодействий с атомами кластера) или проникает в подложку мишени при больших энергиях [26]. Димер Cu_2 распадается при

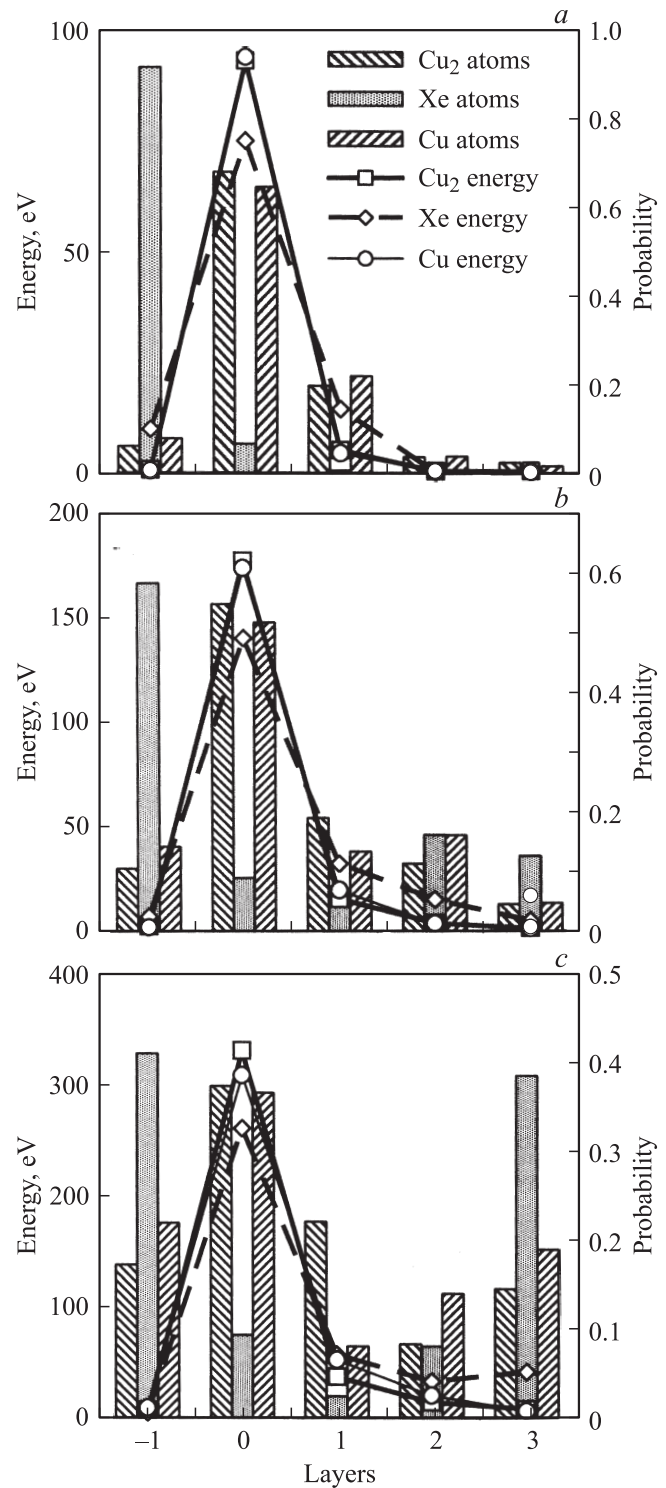


Рис. 1. Вероятность распределения упругих потерь энергии и атомов бомбардирующих частиц Cu_2 , Xe с начальными энергиями 100 (a), 200 (b) и 400 eV (c) и Cu с начальными энергиями 50 (a), 100 (b) и 200 eV (c) в слоях мишени (кластер Cu_{75} на поверхности (0001) графита). Слои мишени, указанные по оси абсцисс: –1 — пространство перед мишенью; 0 — кластер; 1, 2 — слои атомов углерода, 3 — пространство за мишенью. Значения потерь энергии для налетающих мономеров Cu удвоены.

столкновении с поверхностным кластером на составляющие его атомы, каждый из которых первоначально имеет половину исходной энергии; при этом значительная часть налетающих атомов остается в кластере за счет сил притяжения в системе Cu–Cu [27,28]. Большинство внедрившихся в кластер атомов Хе, взаимодействие которых с атомами мишени моделируется только потенциалом отталкивания (см. раздел 2), выдавливается из кластера силами притяжения атомов кластера. С ростом энергии налетающего димера вероятность остаться в кластере уменьшается, а вероятность отражения или проникновения в подложку возрастает. Для одноатомных налетающих частиц Cu вероятность остаться в поверхностном кластере только немного меньше по сравнению со случаем бомбардировки димерами. Небольшие отличия, очевидно, возникают за счет случаев, когда димер падает на кластер так, что ось симметрии, проходящая через его атомы, близка к нормали к плоскости подложки. Это обстоятельство практически исключает их независимое взаимодействие с атомами кластера на стадии рассеяния. Коэффициент отражения при бомбардировке одиночными атомами Cu, как правило, больше, чем в случае бомбардировки димерами Cu₂.

Упругие потери энергии димеров в кластерах во всех случаях превышают те, что наблюдаются для атомов Хе (рис. 1, см. также [27]). Упругие потери энергии мономеров Cu (на рис. 1 эти потери удвоены с целью сравнения с потерями частиц Cu₂ и Хе, имеющих вдвое большую начальную энергию) близки к потерям энергии димеров Cu₂. Это объясняется тем, что при столкновении с кластером налетающие димеры диссоциируют и их атомы практически перестают взаимодействовать друг с другом. При этом они теряют энергию раньше, чем искажения исходного кластера, вызванные двумя одновременными последовательностями атомных столкновений, перекроют друг друга и приведут к таким изменениям структуры кластера, которые могли бы существенно повлиять на соотношение потери энергии налетающих одно- и двухатомных частиц.

3.2. Полярные распределения обратнорассеянных частиц. На рис. 2 и 3 представлены полярные распределения обратнорассеянных атомов Cu в случаях бомбардировки поверхностных кластеров Cu₁₃ и Cu₇₅ димерами Cu₂ и одиночными атомами Cu различных энергий. Поскольку на этих рисунках приводятся средние значения в расчете на одно испытание, для одноатомных бомбардирующих частиц Cu интенсивность обратного рассеяния удваивалась для сравнения с результатами рассеяния атомов налетающих димеров Cu₂. Расчет показал, что при энергиях падающих частиц 50–100 eV для Cu и 100–200 eV для Cu₂ интенсивность обратного рассеяния максимальна в интервале углов 85–95°. При этом максимумы интенсивности обратного рассеяния для одиночных бомбардирующих частиц в 1.2–1.5 раза больше, чем для димеров.

В случае наибольших энергий бомбардировки (200 eV для Cu и 400 eV для Cu₂) наблюдается

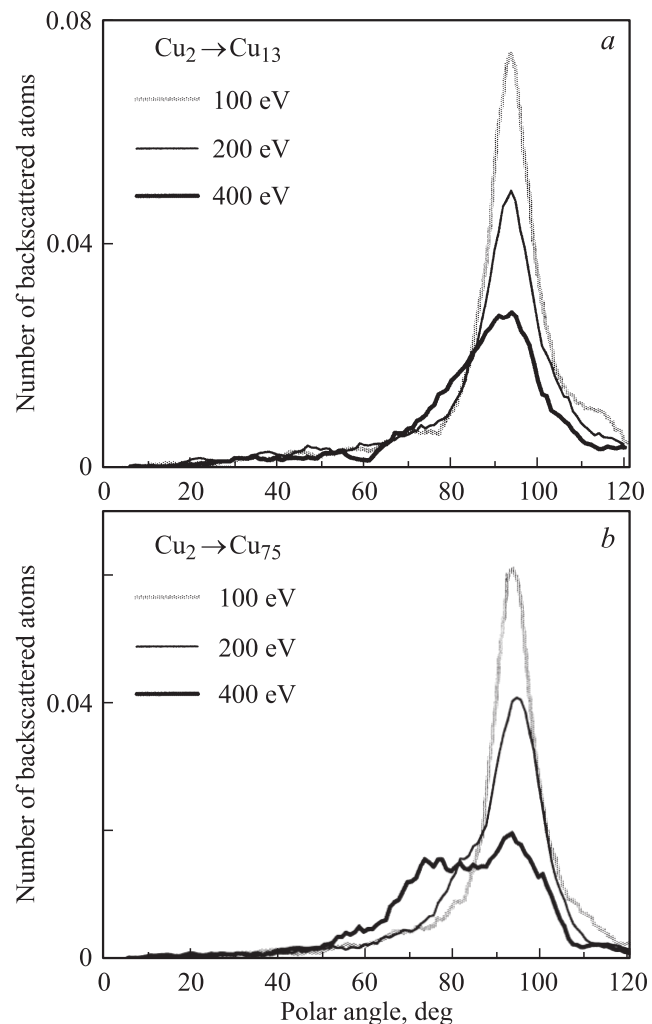


Рис. 2. Интенсивность обратного рассеяния атомов Cu в зависимости от угла отражения при бомбардировке поверхностных кластеров Cu₁₃ (a), Cu₇₅ (b) димерами Cu₂ с энергиями 100, 200 и 400 eV.

расщепление пика интенсивности обратного рассеяния на два максимума при углах $\sim 75^\circ$ и $\sim 95^\circ$ (рис. 2 и 3). При углах $\sim 75^\circ$ основную роль в формировании максимума интенсивности играет рассеяние на кластере с последующим скользким отражением от подложки. При углах $\sim 95^\circ$ основной вклад дает рассеяние на кластере с последующим торможением рассеянной частицы в силовом поле подложки. При указанных начальных энергиях значительная часть падающих атомов проникает в подложку, что приводит к снижению интенсивности максимумов отражения по сравнению с малыми начальными энергиями. Появление максимума при углах $\sim 75^\circ$ обусловлено большой перпендикулярной составляющей скорости отраженной частицы, а также малым временем пролета частицы вдоль поверхности, с постепенным уходом из области взаимодействия с атомами подложки. Эти причины не позволяют силам притяжения со стороны подложки существенным образом отклонить

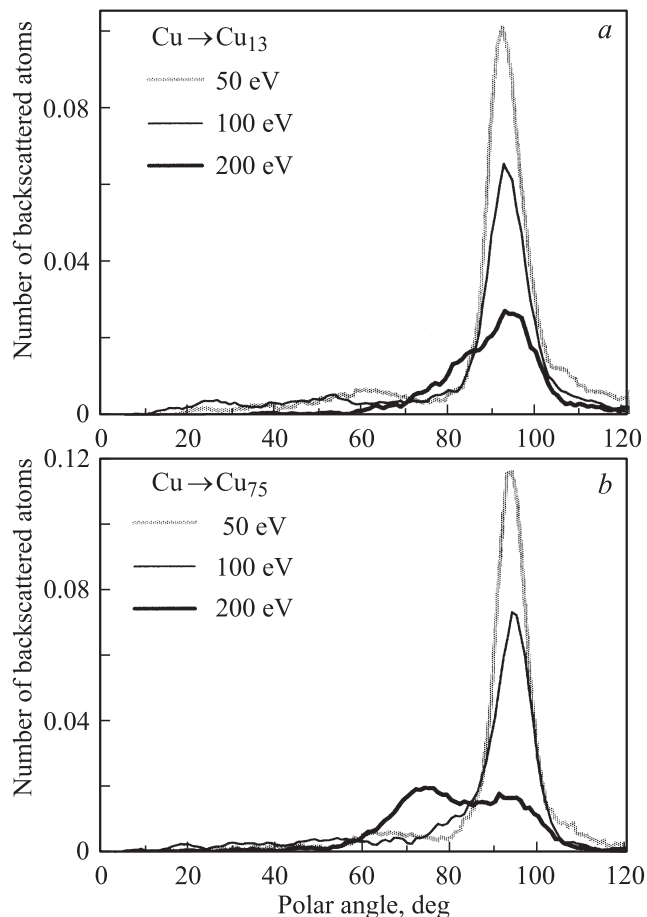


Рис. 3. Интенсивность обратного рассеяния атомов Cu в зависимости от угла отражения при бомбардировке поверхностных кластеров Cu_{13} (a), Cu_{75} (b) атомами Cu с энергиями 50, 100 и 200 eV.

траекторию рассеянных атомов Cu в область углов, близких к 90° . При меньших энергиях бомбардировки частицы, отраженные первоначально под углами менее 90° за счет сил притяжения подложки, изменяют свою траекторию настолько, что оба максимума интенсивности сливаются при углах $\sim 95^\circ$. Для кластера Cu_{13} расщепление максимума интенсивности на два пика не наблюдается ни при каких энергиях вследствие малости размеров кластера и обусловленной этим близости области рассеяния на кластере к подложке.

Рис. 4 и 5 аналогичны рис. 2 и 3, но показывают угловые распределения средней энергии рассеянных атомов. Видно, что и в этом случае увеличение энергии бомбардировки и размера поверхностного кластера приводит к двухпиковой структуре распределений. При этом пик, расположенный при меньших углах рассеяния, смещен в сторону нормали к подложке. Сравнение углового положения пиков средней энергии и интенсивности (рис. 2–5) показывает, что пик энергии рассеяния, расположенный в интервале углов $60\text{--}95^\circ$, формируется за счет вторичного отражения атомов

налетающих димеров Cu_2 или отдельных налетающих атомов Cu от подложки после их взаимодействия с кластером. Многократное рассеяние атомов на малые углы позволяет сохранить им значительную энергию.

Из рис. 2–5 видно, что максимум интенсивности рассеяния при углах $\sim 95^\circ$ соответствует наименьшей средней энергии обратного рассеяния. Как отмечено выше, этот максимум возникает за счет отраженных атомов, попадающих в поле подложки и движущихся в этом поле практически параллельно ее поверхности. Такие атомы теряют значительную энергию, чем и объясняется наличие при этих углах минимума средней энергии. При больших углах рассеяния и больших начальных энергиях, в особенности для случаев рассеяния в верхних атомных слоях больших кластеров, атомы уходят мимо модельной подложки вследствие ограниченности ее размеров, сохраняя при этом значительную энергию. Такие атомы образуют в некоторых случаях пик средней энергии при углах, превышающих 95° .

Из рис. 2–5 также видно, что формы распределений интенсивностей и средних энергий отраженных атомов

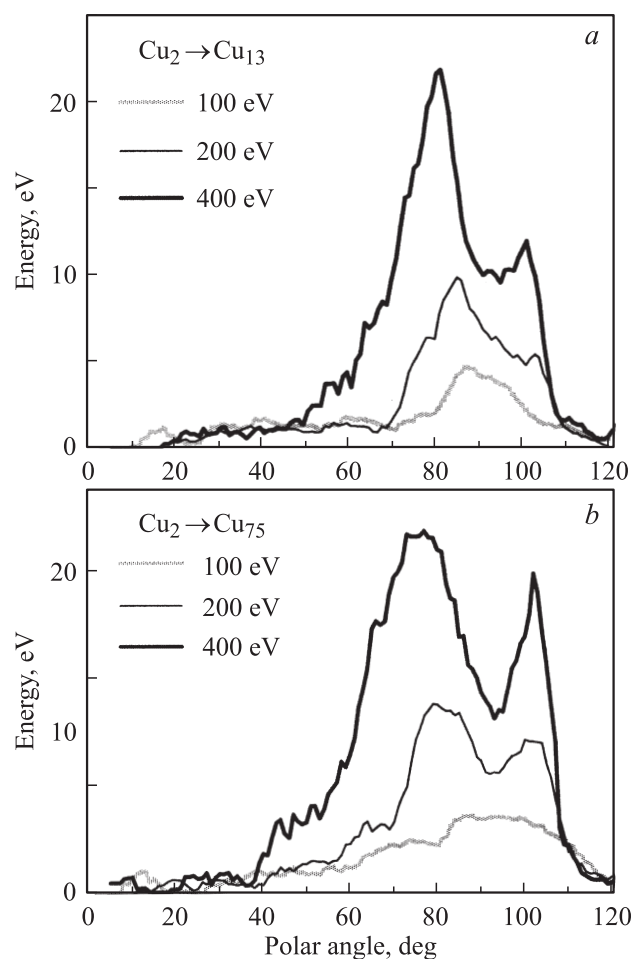


Рис. 4. Средняя энергия обратнорассеянных атомов Cu в зависимости от угла отражения при бомбардировке поверхностных кластеров Cu_{13} (a), Cu_{75} (b) димерами Cu_2 с энергиями 100, 200 и 400 eV.

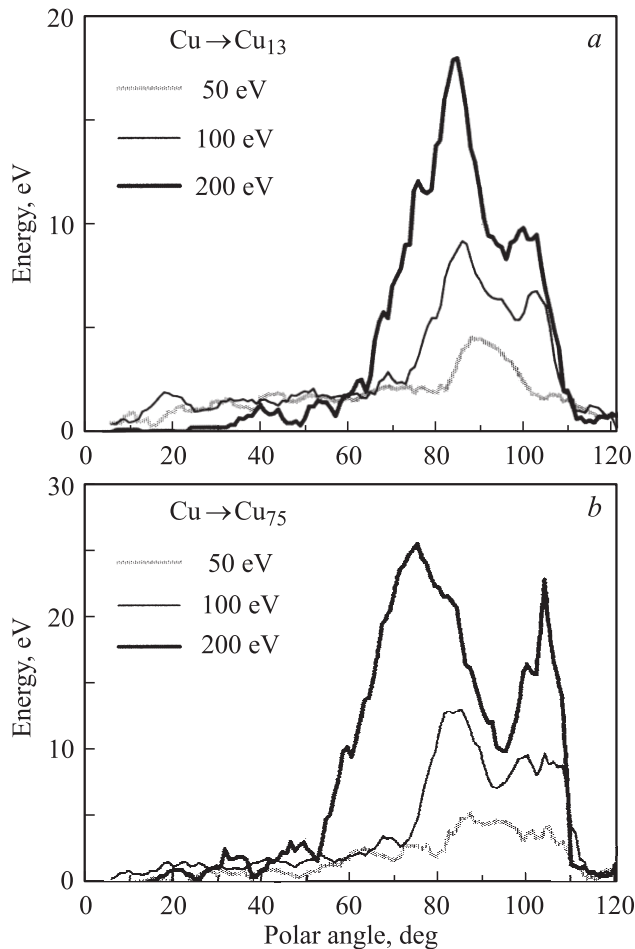


Рис. 5. Средняя энергия обратнорассеянных атомов Cu в зависимости от угла отражения при бомбардировке поверхностных кластеров Cu_{13} (a), Cu_{75} (b) атомами Cu с энергиями 50, 100 и 200 eV.

по полярным углам для налетающих частиц Cu_2 и Cu во всех характерных деталях повторяют друг друга. Отсюда можно заключить, что для обоих типов бомбардирующих частиц действуют одни и те же механизмы рассеяния. Это подтверждает сделанное ранее заключение о том, что для атомов димеров процессы рассеяния и торможения в большинстве случаев происходят практически независимо друг от друга, и до того момента, как поверхностный кластер будет существенно искажен за счет одновременного взаимодействия с двумя налетающими частицами.

3.3. Выход распыления поверхностных кластеров. На рис. 6 представлены результаты расчета коэффициента распыления поверхностных кластеров при бомбардировке частицами Cu_2 , Cu и Xe различных энергий. Удвоенный коэффициент распыления одиночными атомами Cu позволяет оценить составляющую распыления димерами Cu_2 без учета нелинейных эффектов, т.е. перекрытия каскадов столкновений в кластере, инициированных атомами димера независимо друг от друга.

Из рис. 6 следует, что отношение полных коэффициентов распыления $Y_{\text{Cu}_2, \text{tot}}$ и $Y_{\text{Xe, tot}}$ и их одноатомных составляющих (вклад одиночных распыленных атомов Cu) $Y_{\text{Cu}_2, \text{unit}}$ и $Y_{\text{Xe, unit}}$ для всех моделируемых поверхностных кластеров и начальных энергий составляет 1.3–1.5. С ростом размера кластера отношение $Y_{\text{Cu}_2}/Y_{\text{Xe}}$ увеличивается как для распыления мономеров, так и для полных выходов распыления. Естественно предположить, что это связано с относительным уменьшением роли граничных попаданий димера Cu_2 на край поверхностного кластера так, что один из атомов димера взаимодействует преимущественно с подложкой, а также с возможным перекрытием каскадов столкновений, инициированных обоими атомами димера. Косвенным подтверждением этого может служить тот факт, что удвоенный полный коэффициент распыления $2Y_{\text{Cu}_2, \text{tot}}$ в случае налетающих частиц Cu при энергиях 50 и 100 eV практически совпадает с полным коэффициентом распыления $Y_{\text{Cu}_2, \text{tot}}$ для частиц Cu_2 с энергиями 100 и 200 eV, бомбардирующих поверхностный кластер Cu_{13} . Для больших кластеров

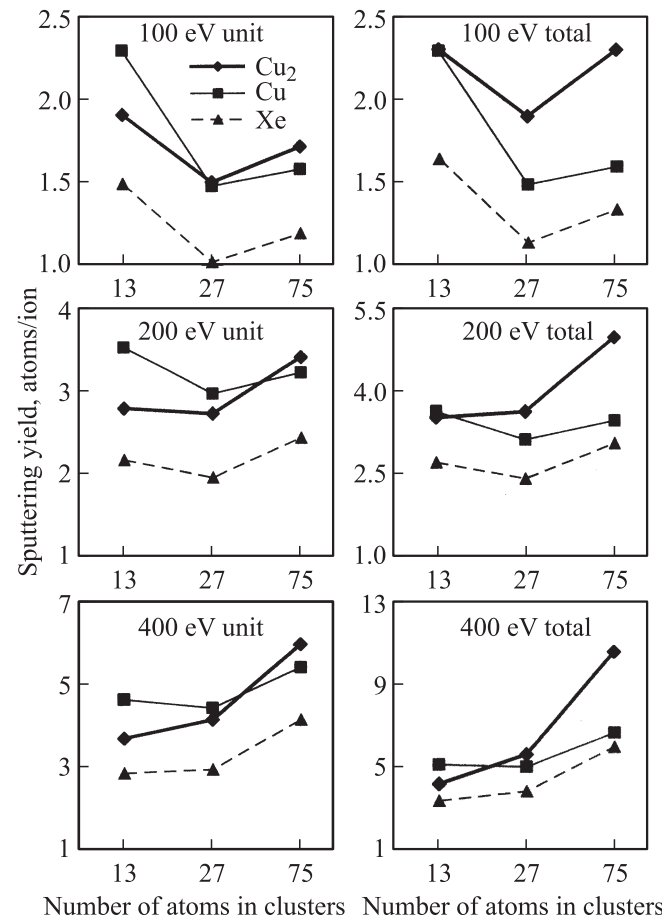


Рис. 6. Зависимость полного коэффициента распыления и его одноатомной составляющей от размера кластера для различных начальных энергий бомбардирующих частиц Cu_2 , Cu и Xe. В случае налетающих мономеров Cu значения коэффициента распыления удвоены и расположены в соответствии с их удвоенными начальными энергиями.

$Y_{\text{Cu}_2, \text{tot}}$ заметно превосходит $2Y_{\text{Cu}, \text{tot}}$. Аналогичная тенденция наблюдается и при энергии 400 eV. Единственным исключением является кластер Cu_{13} , для которого указанные коэффициенты распыления заметно различаются. Моноатомные составляющие выхода распыления не слишком различаются для случаев бомбардировки частицами Cu_2 и Cu , хотя в целом наблюдается та же тенденция преимущественного роста коэффициента распыления для налетающих димеров. Из приведенных на рис. 6 данных для общего и одноатомного выходов распыления можно заключить, что основной причиной усиления распыления для налетающих частиц Cu_2 по сравнению с Cu являются многоатомные фрагменты кластеров (прежде всего распыленные димеры Cu_2). Это особенно очевидно в случае максимальной энергии бомбардировки (400 eV) и кластера Cu_{75} (рис. 6). Отметим, что выходы распыления при бомбардировке атомами Хе во всех случаях заметно меньше, чем при бомбардировке димерами Cu_2 . Значительны также различия полных коэффициентов распыления для димеров и одиночных атомов Cu равных энергий. В обоих случаях минимум распыления лежит в районе кластера размером в 27 атомов, что коррелирует с данными работ [24,26], в которых изучалось распыление большого набора кластеров при бомбардировке ионами инертных газов.

Анализ результатов показал, что заметно больший коэффициент распыления кластеров Cu_{75} , бомбардируемых димерами Cu_2 , по сравнению с удвоенным коэффициентом распыления отдельными атомами Cu обусловлен перекрытием каскадов столкновений, генерируемых каждым из атомов димера. В менее массивных кластерах различия общих коэффициентов распыления не столь значительны, поскольку с уменьшением размера кластера снижается вероятность распыления многоатомных фрагментов кластеров. При этом различия потерь энергии в кластере для обоих типов частиц (с учетом их удвоения для налетающих мономеров Cu) крайне незначительны (см. подраздел 3.1) и не могут быть причиной заметно различающихся выходов распыления. Очевидно, в зоне перекрытия каскадов столкновений происходит нарушение атомной структуры кластера и ослабление межатомных связей, что увеличивает вероятность выталкивания какого-либо многоатомного фрагмента кластера или отдельного атома за его пределы. При этом вылет частицы из кластера, формально принадлежащей одному каскаду столкновений, может стимулироваться передачей энергии в процессе развития другого каскада.

При сравнении результатов бомбардировки димерами Cu_2 и одиночными атомами Хе можно заключить, что еще одной причиной большого различия коэффициентов распыления является разница потерь энергии налетающих частиц в кластере (рис. 1). В случае димеров потери энергии в кластере, практически равные удвоенным потерям энергии одиночных атомов Cu , превышают потери энергии атомов Хе примерно в 1.2–1.3 раза. Очевидно, это связано с меньшей средней глубиной проникновения

атома Cu в мишень и более эффективной передачей энергии в столкновениях Cu – Cu по сравнению со столкновениями Хе– Cu .

3.4. Распределения распыленных атомов по энергиям. На рис. 7 приведены энергетические распределения распыленных одиночных атомов, образующихся при бомбардировке поверхностных кластеров Cu_{13} и Cu_{75} димерами Cu_2 и отдельными атомами Cu различных энергий. Для атомов Cu выбраны предельные комбинации модельных параметров: большая начальная энергия, малый кластер, и малая начальная энергия, большой кластер. Сравнение распределений показывает, что в случае большого кластера и малой начальной энергии значительный вклад создают низкоэнергетические распыленные атомы, тогда как в случае малого кластера и большой энергии бомбардировки — высокоэнергетические атомы. Очевидно, что в последнем случае возможности для развития каскадов столкновений ограничены и каскады просто не доходят до низкоэнергетической стадии в пределах кластера.

Следует также отметить, что во всех моделируемых случаях прослеживается общая закономерность: одноатомные налетающие частицы порождают больше распыленных атомов с энергиями до 5 eV, чем двухатомные. Это можно объяснить перекрытием каскадов столкновений, как обсуждалось выше.

В работе были выполнены также расчеты, в которых время развития столкновительных процессов было увеличено до 20 ps, что позволило более полно учесть вклад в распыление частиц с энергиями ниже 0.5 eV. Моделировались случаи бомбардировки кластеров Cu_{13} и Cu_{75} димерами Cu_2 с энергиями 100 и 400 eV. Расчет показал, что в случае малого кластера и начальной энергии 400 eV низкоэнергетический максимум (энергии

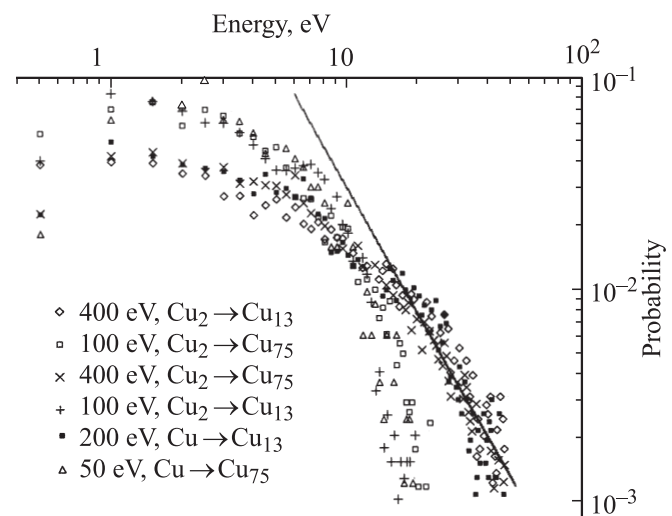


Рис. 7. Энергетические спектры атомов меди для случаев бомбардировки кластеров Cu_{13} и Cu_{75} димерами Cu_2 с энергиями 100 и 400 eV, а также мономерами Cu с энергиями 50 и 200 eV. Прямая — распределение $1/E^2$.

$\sim 1-2\text{ eV}$) выражен очень слабо и находится практически на уровне статистической ошибки. Относительное влияние энергии бомбардировки на форму максимума на фоне роли размера кластера выглядит при этом вторичным. В случае малой энергии бомбардировки (100 eV) и большого кластера максимум в области энергий $\sim 2-3\text{ eV}$ четко проявляется на фоне случайных статистических отклонений. Очевидно, что в случае малого кластера и относительно большой энергии налетающей частицы приближение плоского поверхностного потенциального барьера и, как следствие, распределение Томпсона–Зигмунда [35] неприменимы. В случае же относительно большого кластера отдельные участки его поверхности в области падения ионов могут быть интерпретированы как локально плоские. Для такого кластера и энергий бомбардировки в интервале $100-400\text{ eV}$ наблюдается четко выраженный максимум энергетического распределения при энергиях, превышающих $2-3\text{ eV}$. В целом можно заключить, что в рассмотренных случаях появление большого числа распыленных атомов в области энергий $1-3\text{ eV}$ определяется в основном размерами кластера и практически не зависит от энергии бомбардирующих мономеров или димеров меди.

Из рис. 7 видно, что во всех случаях в интервале $3-10\text{ eV}$ распределения спадают экспоненциально. При энергиях распыления больше 10 eV и начальной энергии димеров 400 eV (200 eV для мономеров) наблюдается замедление спада функции распределения, тогда как при начальной энергии 100 eV (50 eV для мономеров) — ускорение, причем независимо от типа бомбардирующей частицы. При энергии 400 eV высокоэнергетические части спектров стремятся к распределению $\sim E^{-2}$, что соответствует случаю полубесконечной среды с плоской поверхностью [35]. Этого не наблюдается при низких энергиях бомбардировки и любых размерах кластера (рис. 7).

4. Заключение

В работе выполнено молекулярно-динамическое моделирование распыления кластеров меди, находящихся на поверхности графита, при бомбардировке димерами Cu_2 и мономерами Cu . Показано, что характеристики торможения и поверхностного рассеяния при бомбардировке поверхностных кластеров частицами Cu_2 и Cu близки, что указывает на идентичность механизмов рассеяния в обоих случаях.

Относительно большой коэффициент распыления при бомбардировке кластеров димерами Cu_2 по сравнению с удвоенным коэффициентом распыления для мономеров Cu обусловлен перекрытием каскадов столкновений, создаваемых каждым из атомов налетающего димера. Различия коэффициентов распыления при кластерной и атомной бомбардировке особенно сильно проявляются при распылении больших кластеров.

Во всех рассмотренных случаях при бомбардировке мономерами Cu вероятность образования распыленных атомов с энергиями до 10 eV несколько больше, чем в случаях бомбардировки димерами Cu_2 , что также является следствием перекрытия каскадов столкновений. Форма низкоэнергетической части энергетического спектра распыленных атомов определяется в основном размером кластера, тогда как функциональная зависимость его высокоэнергетической части — энергией бомбардировки.

Список литературы

- [1] S. Bouncau, A. Brunelle, S. Della-Negra, J. Depauw, D. Jacquet, Y. Le Beyec, M. Pautrat, M. Fallavier, J.C. Poizat, H.H. Andersen. *Phys. Rev. B* **65**, 144 106 (2006).
- [2] A. Brunelle, S. Della-Negra, J. Depauw, D. Jacquet, Y. Le Beyec, M. Pautrat, Ch. Schoppmann. *Nucl. Instrum. Meth. Phys. Res. B* **125**, 207 (1997).
- [3] Z. Postawa, B. Czerwinski, M. Szweczyk, E.J. Smiley. *J. Phys. Chem. B* **108**, 7831 (2004).
- [4] A. Delcorte, B.J. Garrison. *Nucl. Instrum. Meth. Phys. Res. B* **255**, 223 (2007).
- [5] J.E. Locklear, C. Guillemier, S.V. Verkhoturov, E.A. Schweikert. *Appl. Surf. Sci.* **252**, 6624 (2006).
- [6] A. Wucher. *Appl. Surf. Sci.* **252**, 6482 (2006).
- [7] Z. Postawa, B. Czerwinski, M. Szweczyk, E.J. Smiley, N. Winograd, B.J. Garrison. *Anal. Chem.* **75**, 4402 (2003).
- [8] Ping Shi, Fu-Rong Ding, Yao Wang, Rui Nie, Hong Ji Ma. *Nucl. Instrum. Meth. Phys. Res. B* **251**, 306 (2006).
- [9] J. Cheng, N. Winograd. *Anal. Chem.* **77**, 3651 (2005).
- [10] I. Yamada, J. Matsuo, Z. Insepov, T. Aoki, T. Seki, N. Toyoda. *Nucl. Instrum. Meth. Phys. Res. B* **164-165**, 944 (2000).
- [11] T. Seki, T. Kaneko, D. Takeuchi, T. Aoki, J. Matsuo, Z. Insepov, I. Yamada. *Nucl. Instrum. Meth. Phys. Res. B* **121**, 498 (1997).
- [12] A. Iwamoto, T. Okazawa, T. Akita, I. Vickridge, Y. Kido. *Nucl. Instrum. Meth. Phys. Res. B* **266**, 965 (2008).
- [13] L.H. Zhou, C.H. Zhang, Y.T. Yang, B.S. Li, L.Q. Zhang, Y.C. Fu, H.H. Zhang. *Nucl. Instrum. Meth. Phys. Res. B* **267**, 58 (2009).
- [14] F. Zeng, R.L. Zong, Y.L. Gu, F. Lv, F. Pan, J. Wang, W.S. Yan, B. He, Y.N. Xie, T. Liu. *Nucl. Instrum. Meth. Phys. Res. B* **260**, 547 (2007).
- [15] I. Baranov, A. Brunelle, S. Della-Negra, D. Jacquet, S. Kirillov, Y. Le Beyec, A. Novikov, V. Obnorskii, A. Pchelintsev, K. Wien, S. Yarmijchuk. *Nucl. Instrum. Meth. Phys. Res. B* **187**, 451 (2002).
- [16] I. Baranov, M. Galaktionov, G. Gusinsky, S. Kirillov, V. Naidenov, V. Obnorskii, S. Yarmijchuk. *Nucl. Instrum. Meth. Phys. Res. B* **263**, 389 (2007).
- [17] Е.Е. Журкин. *Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования* **3**, 24 (2009).
- [18] A. Delcorte, B.J. Garrison. *Nucl. Instrum. Meth. Phys. Res. B* **180**, 37 (2001).
- [19] L. Rzeznik, B. Czerwinski, R. Paruch, B.J. Garrison, Z. Postawa. *Nucl. Instrum. Meth. Phys. Res. B* **267**, 1436 (2009).
- [20] C. Anders, H.M. Urbassek. *Nucl. Instrum. Meth. Phys. Res. B* **267**, 3227 (2009).

- [21] R. Kissel, H.M. Urbassek. *Int. J. Mass Spectrometry* **208**, 1–3, 29 (2001).
- [22] Г.В. Корнич, Г. Бетц, В.И. Запорожченко, А.И. Бажин. *Письма в ЖТФ* **29**, 22, 33 (2003).
- [23] Г.В. Корнич, Г. Бетц, В.И. Запорожченко, А.И. Бажин. *Изв. РАН. Сер. физ.* **68**, 3, 304 (2004).
- [24] G.V. Kornich, G. Betz, V. Zaporozhchenko, A.I. Bazhin, F. Faupel. *Nucl. Instrum. Meth. Phys. Res. B* **227**, 1–4, 261 (2005).
- [25] Г.В. Корнич, Г. Бетц, В.И. Запорожченко, Ф. Фаупел, Л.И. Лозовская. *ФТТ* **47**, 10, 1907 (2005).
- [26] G.V. Kornich, G. Betz, V. Zaporozhchenko, K.V. Pugina. *Surf. Sci.* **601**, 209 (2007).
- [27] Вал.Г. Корнич, G. Betz, Г.В. Корнич. *Письма в ЖТФ* **34**, 12, 21 (2008).
- [28] H. Gades, H.M. Urbassek. *Nucl. Instrum. Meth. B* **69**, 232 (1992).
- [29] В. Экштайн. *Компьютерное моделирование взаимодействия частиц с поверхностью твердого тела*. Пер. с англ. Мир, М. (1995). 321 с.
- [30] J. Tersoff. *Phys. Rev. B* **39**, 5566 (1989).
- [31] J.P. Biersack, J.F. Ziegler. *Nucl. Instrum. Meth. B* **141**, 93 (1982).
- [32] S. Dorfman, K.C. Mundim, D. Fuks, A. Berner, D.E. Ellis, J. Van Humbeeck. *Mater. Sci. Eng. C* **15**, 191 (2001).
- [33] J.M. Haile. *Molecular dynamics simulation — elementary methods*. Wiley-Interscience, N.Y. (1992). 386 p.
- [34] H.J. Berendsen, J.P.M. Postma, W.F.V. Gunsteren, A. Di-Nola, J.R. Haak. *J. Chem. Phys.* **81**, 3684 (1984).
- [35] Р. Бериш, П. Зигмунд, М. Робинсон, Х. Андерсен, Х. Бай, Х. Розендал. В сб.: *Распыление твердых тел ионной бомбардировкой*. В. I / Под ред. Р. Бериша. Мир, М. (1984). 336 с.