Uniwersytet Jagielloński w Krakowie

Wydział Fizyki, Astronomii i Informatyki Stosowanej

Sebastian Kusyk

Nr albumu: 2011101527

Zbadanie możliwości zastosowania pocisków Ar2000 do określenia chropowatości powierzchni Ag(111)

Praca magisterska na kierunku Zaawansowane Materiały i Nanotechnologia

> Praca wykonana pod kierunkiem prof. dr hab. Zbigniewa Postawy Instytut Fizyki

Kraków 2020

Oświadczenie autora pracy

Świadom odpowiedzialności prawnej oświadczam, że niniejsza praca dyplomowa została napisana przeze mnie samodzielnie i nie zawiera treści uzyskanych w sposób niezgodny z obowiązującymi przepisami.

Oświadczam również, że przedstawiona praca nie była wcześniej przedmiotem procedur związanych z uzyskaniem tytułu zawodowego w wyższej uczelni.

Kraków, dnia

Podpis autora pracy

Oświadczenie kierującego pracą

Potwierdzam, że niniejsza praca została przygotowana pod moim kierunkiem i kwalifikuje się do przedstawienia jej w postępowaniu o nadanie tytułu zawodowego.

Kraków, dnia

Podpis kierującego pracą

Chciałbym złożyć serdeczne podziękowania Promotorowi, Panu Prof. Dr hab. Zbigniewowi Postawie, za umożliwienie mi napisania pracy licencjackiej w Zakładzie Fizyki Nanostruktur i Nanotechnologii, za nieocenioną opiekę merytoryczną, cenne porady i sugestie, a także za poświęcony czas, życzliwość, wyrozumiałość i cierpliwość podczas moich zmagań z tematem.

Równocześnie dziękuję Kolegom z grupy Pana Profesora za okazane wsparcie i przyjacieską atmosferę podczas powstawania mojej pracy.

Spis treści

1 Wstęp	5
2 Sposób prowadzenia badań	8
1 Wygenerowanie pocisku	9
2 Wygenerowanie próbki	11
3 Dobór optymalnej energii kinetycznej	16
4 Stosunek wymiarów struktur powierzchniowych do średnicy pocisku	17
3 Analiza wyników	19
1 Dobór optymalnej energii kinetycznej pocisku	19
2 Widma masowe	19
$1 Ar_2/(Ar_1+Ar_2)$	19
2 Bezwzględne liczby rozpylanych cząstek Ar ₁ i Ar ₂	27
3 Ciężkie klastery	28
3 Widma kątowe	30
1 Widma polarne	30
2 Widma azymutalne	35
4 Widma energetyczne	36
1 Widma energetyczne atomów rozpraszanych pod wszystkimi kątami	36
2 Widma energetyczne atomów rozpraszanych pod wybranymi kątami polarnymi	37
4 Podsumowanie	38
5 Bibliografia	39

1 Wstęp

Istnieją metody badawcze, w których powierzchnia próbki bombardowana jest wiązką jonów, atomów lub klastrów. W wyniku zderzenia tego typu pocisków z próbką może dojść do emisji jej fragmentów (rozpylanie, ang. sputtering) lub zmiana kierunku toru cząstek, z których jest zbudowany pocisk (rozpraszanie, ang. scattering). W przypadku pocisków zbudowanych z wielu atomów, rozpraszanie może być związane z rozpadem pocisku na atomy lub cząstki o różnych kierunkach, zwrotach i wartościach prędkości. Rejestruje się widma masowe, energetyczne oraz kątowe emitowanych w ten sposób cząstek.

Przykładem technik badawczych, w których wykorzystuje się zjawisko rozpraszania do badania właściwości bombardowanej próbki, są spektroskopia rozpraszania jonów (ISS – ang. *ion scattering spectroscopy*) oraz rozpraszanie wsteczne Rutherforda (RBS – ang. *Rutherford backscattering spectroscopy*). W przypadku ISS energia rozproszonego jonu zależy m.in. od masy atomu próbki, z którym doszło do oddziaływania, co umożliwia wykorzystanie tej metody do badania składu chemicznego powierzchni [HER]. Takie samo zjawisko wykorzystuje się w metodzie RBS, jednak ze względu na zastosowanie wiązki o większej energii pociski docierają również do głębszych warstw próbki – uzyskiwany sygnał zależy również od znajdujących się tam atomów. Celem niniejszej pracy jest natomiast sprawdzenie możliwości zastosowania zjawiska rozpraszania do badania topografii powierzchni.

W niniejszej pracy badane jest zjawisko rozpraszania klasterów złożonych z 2000 atomów argonu padających prostopadle na powierzchnie srebra (111) o różnym ukształtowaniu. Ze względu na słabe wiązania pomiędzy atomami argonu (van der Waalsa) oraz silne wiązania pomiędzy atomami próbki (metaliczne), przy zastosowaniu odpowiednio niskiej prędkości pocisku nie dochodzi do rozpylania próbki, a jedynie do rozpraszania atomów.

Motywacją do prowadzenia niniejszych badań jest rozwinięcie metody badania ukształtowania i właściwości mechanicznych powierzchni materiałów polegającej na bombardowaniu wybranej próbki klastrami argonu i analizie uzyskanych widm. Wcześniejsze badania naukowe wykazały, iż możliwe jest uzyskanie informacji o strukturach znajdujących się na powierzchniach metali poprzez zbadanie zjawiska rozpraszania na nich pocisków zbudowanych z gazów szlachetnych. Przykładem jest publikacja D.A. Hamburgera et al. [HAM], w której wykazano, że heptamery platyny znajdujące się na powierzchni tego metalu mają wpływ na rozpraszanie atomów helu. Zaletą tej metody byłaby jej nieinwazyjność. Jak już wspomniano, ze względu na różnice w sile wiązań atomów metalicznej próbki i klastra gazu szlachetnego, możliwe jest uniknięcie zjawiska rozpylania, o ile zastosuje się niewielką energię kinetyczną pocisku na atom. Jedyna modyfikacja

powierzchni występująca w takim przypadku może polegać na zaadsorbowaniu na niej atomów pocisku, jednak energia ich wiązania również jest niewielka. Dodatkowo zaletą byłaby możliwość badania fragmentów próbki o różnym polu powierzchni (zarówno analiza wybranych struktur, jak i zbieranie informacji o większych obszarach). Problemem zaproponowanej metody jest natomiast skomplikowana analiza uzyskiwanych wyników - na trajektorie rozpraszanych atomów pocisku wpływ mają nie tylko oddziaływania z próbką, ale także z innymi atomami argonu. Jednak zastosowanie symulacji komputerowych ułatwia wyciągnięcie prawidłowych wniosków z uzyskiwanych wyników, gdyż możliwa jest obserwacja położeń i prędkości poszczególnych atomów tworzących układ oraz działających na nie sił w wybranym czasie. W dodatku można również tworzyć powierzchnie o dowolnych parametrach i kontrolowanych właściwościach. Ukształtowanie powierzchni metali w skali nanometrów determinuje jej właściwości fizyczne i chemiczne. Z tego względu ma ono duże znaczenie technologiczne, np. w procesie produkcji elementów elektronicznych.

W wyniku oddziaływania atomów z próbką następuje zmiana ich trajektorii oraz energii. Aby umożliwić oszacowanie kierunku i wartości wektora prędkości rozproszonego atomu, konieczne jest zastosowanie odpowiedniego modelu matematycznego. Opisany w pracy *Classical Theory for the Interaction of Gas Atoms with Solid Surfaces* [LOG] model *soft cube* zakłada, iż padający atom oddziaływuje w sposób bezpośredni tylko z jednym atomem powierzchni (w uproszczeniu przedstawionym jako sześcian), który wraz z pozostałą częścią próbki tworzy oscylator harmoniczny. Na pocisk znajdujący się w pobliżu powierzchni działa siła przyciągająca i odpychająca. Jeżeli powierzchnia próbki jest efektywnie płaska, pozioma składowa prędkości pocisku nie ulega zmianie.

Utworzenie modelu matematycznego pozwalającego wyznaczyć teoretyczną energię i trajektorię rozpraszanej cząstki jest nietrywialne nawet dla pocisku jednoatomowego. Wynika to z faktu, iż próbka zbudowana jest z wielu atomów. Nawet przy założeniu, że pocisk oddziałuje tylko z jednym atomem powierzchni, inne atomy próbki oddziałujące z tym atomem mogą wpływać na jego oddziaływania z pociskiem, a więc także na przebieg zjawiska rozpraszania. Jednak na przykładzie zderzenia dwóch atomów można zaobserwować, w jaki sposób zmieniają się ich wektory prędkości. Dla uproszczenia (obowiązującego jedynie w ramach tego przykładu) zastosujmy potencjał sztywnych kul. Zgodnie z jego założeniami, każdy atom jest kulą o niezerowym promieniu. Jedyne oddziaływania między atomami polegają na ich zderzeniu w infinityzemalnym czasie – w chwili zetknięcia się punktów leżących na ich powierzchniach. Jednocześnie atomy nie ulegają żadnemu odkształceniu. Załóżmy, że układ składa się z dwóch atomów, oznaczonych A i B. Posiadają one

masy odpowiednio m_A oraz m_B. Atom A porusza się początkowo z prędkością v_{A0}, natomiast atom B jest nieruchomy. Jeżeli prosta przechodząca przez środki atomów jest równoległa do v_{A0}, wektory prędkości obydwu atomów również pozostaną do niej równoległe – jest to tzw. zderzenie centralne. W pozostałych przypadkach (zderzenie niecentralne) prędkości końcowe mają kierunki różne od siebie nawzajem i od prędkości początkowej atomu A, jednak pęd oraz energia pozostają zachowane. Siła działająca w chwili zderzenia na atom B ma ten sam kierunek, co prosta przechodząca przez środki obydwu atomów w tym momencie.



Rysunek 1: Zderzenie niecentralne dwóch atomów w modelu sztywnych kul.

Wartości kątów α oraz β zależą więc od promieni atomów oraz odległości środka atomu B od prostej przechodzącej przez środek atomu A, równoległej do jego prędkości. W zilustrowanym powyżej przypadku pęd układu w kierunku pionowym pozostaje zerowy – wynika to z zasady zachowania pędu.

2 Sposób prowadzenia badań

Badania prowadzone są przy użyciu symulacji komputerowych opartych o formalizm dynamiki molekularnej, za pomocą programu LAMMPS. Wstępnie utworzony pocisk Ar₂₀₀₀ stosowany jest do bombardowania próbek srebra różniących się ukształtowaniem powierzchni (amplitudą oraz długością fali występujących na niej periodycznych struktur). Zmianom podlegają również współrzędne poziome pocisku względem komórki elementarnej struktur powierzchniowych, co ma na celu uwzględnienie możliwego wpływu miejsca zderzenia pocisku z daną próbką na proces jego rozpraszania. Podczas każdej symulacji próbka bombardowana jest jednym pociskiem. Poszczególne symulacje przebiegają niezależnie od siebie. Na początku symulacji pocisk umieszczony jest w odległości 50 Å od powierzchni próbki (mierzonej od środka klastra do maksymalnej wysokości struktur na powierzchni). Dla takiej odległości siły działające na atomy pocisku pochodzące od atomów próbki są zerowe. Pomimo nieznacznego zwiększenia czasu obliczeń zabieg ten jest konieczny, gdyż ma to na celu prawidłowe symulowanie padania pocisku na próbkę. W przypadku rzeczywistych eksperymentów pocisk początkowo znajduje się w znacznej odległości od próbki i ich oddziaływania są zaniedbywalnie słabe, a następnie zmieniają się płynnie wraz ze zbliżaniem się klastra do powierzchni próbki. Gdyby fakt ten nie został uwzględniony i symulacja rozpoczynałaby się ze współrzędną pionową pocisku, dla której jego oddziaływania z próbka byłyby znaczące, w pierwszym kroku czasowym nastąpiłoby nierealistyczne przesuniecie atomów względem ich położeń równowagi, co mogłoby zaburzyć dalsze oddziaływania pomiędzy nimi w momencie zderzenia i spowodować uzyskanie nieprawidłowych widm.

Aby symulacja przebiegała zgodnie z rzeczywistym procesem rozpraszania, konieczny jest odpowiedni dobór potencjałów oddziaływań międzyatomowych. W badanych układach występują trzy rodzaje par atomów oddziałujących ze sobą: Ar-Ar, Ar-Ag oraz Ag-Ag, co wymusza zastosowanie potencjału hybrydowego. Oddziaływania par Ar-Ar oraz Ar-Ag symulowano przy pomocy potencjału Lennarda-Jonesa o współczynnikach [AZI] [WHI] przedstawionych w poniższej tabeli:

Tabela 1: Parametry oddziaływań Lennarda-Jonesa dla par oddziałujących atomów Ar-Ar i Ar-Ag.

para atomów	ε [eV]	σ [Å]	$R_{C}[Å]$
Ar-Ag Ar-Ar	0,013	3,6	8,0
	0,010832	3,345	8,0

Dla odległości pomiędzy atomami r<r_C potencjał ma postać:

$$E = 4\epsilon \left[\left(\frac{\sigma}{r}\right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r}\right)^{6} \right], \tag{9.}$$

gdzie ϵ - σ - , natomiast dla r \geq r_c energia oddziaływania jest zerowa - jest to przybliżenie pozwalające oszczędzać moc obliczeniową.

W przypadku oddziaływań pomiędzy atomami Ag (metalicznych) zastosowano potencjał EAM (embedded-atom method). Energia i-tego atomu E_i dana jest równaniem:

$$E_i = F_{\alpha} \left(\sum_{j \neq i} \rho_{\alpha \beta}(r_{ij}) \right) + \frac{1}{2} \sum_{j \neq i} \phi_{\alpha \beta}(r_{ij})$$
(10.)

gdzie: F - energia wiązania, ρ - gęstość elektronowa atomu, ϕ - potencjał oddziaływania pary pierwiastków α i β (odpowiadających odpowiednio i-temu oraz j-temu atomowi). W niniejszym równaniu obie sumy obliczane są jedynie dla atomów, których odległość od i-tego atomu jest mniejsza niż promień odcięcia. Parametry niniejszej funkcji pochodzą z [WIL].

1 Wygenerowanie pocisku

Aby wygenerować pocisk, rozmieszczono losowo 2000 atomów argonu wewnątrz sfery o promieniu 31 Å. Wykorzystano potencjał Lennarda-Jonesa – podobnie, jak w przypadku późniejszych symulacji rozpraszania, w których wykorzystano niniejszy pocisk, zastosowano współczynniki oddziaływania par Ar-Ar równe $\varepsilon = 0,010832$ eV oraz $\sigma = 3,345$ Å. Jedyna różnica polegała na ustawieniu większego promienia odcięcia (R_C = 10,0 Å), jednak parametr ten nie wpływa na obliczane energie i siły w zakresie odległości, w którym mają one istotne znaczenie. Aby zapobiec rozpadowi formującego się klastra na skutek pojawienia się znacznych sił odpychających i energii potencjalnej pomiędzy parami atomów znajdujących się zbyt blisko siebie, zastosowano ograniczenie minimalnej odległości, o jaką atomy mogą przemieścić się w jednym kroku czasowym – nie może być ona większa niż 0,1 Å. Ze względu na jednorodny rozkład prawdopodobieństwa wygenerowania poszczególnych atomów argonu wewnątrz sfery oraz ich znaczną liczbę można przyjąć założenie, iż jej środek jest jednocześnie środkiem ciężkości pocisku.

W rzeczywistych eksperymentach, w których bada się zjawiska rozpraszania lub rozpylania z wykorzystaniem klastrów argonu, pociski formowane są w wyniku adiabatycznego rozprężania – sprężony argon przedostaje się do próżni poprzez otwór o małej średnicy, w wyniku czego następuje gwałtowny spadek jego ciśnienia, co wiąże się z jego oziębieniem. Energie kinetyczne poszczególnych atomów względem siebie nawzajem są na tyle niskie, że przyciągające siły Van der Waalsa umożliwiają utworzenie jednolitego klastra. W niniejszych symulacjach konieczne jest zastosowanie innej metody formowania pocisku, pozwalającej na znalezienie współrzędnych

atomów Ar, dla których posiadają one minimalne energie potencjalne, jednak umożliwiającej ograniczenie liczby symulowanych atomów do tych, z których zbudowany jest pocisk (nie sa symulowane atomy tworzące przegrodę z otworem ani pozostałe atomy sprężonego argonu wewnątrz zbiornika. Jednak program LAMMPS oferuje możliwość wprowadzenia lepkości, odpowiadającej za odprowadzanie energii kinetycznej z symulowanego układu lub wybranej jego części. W tym celu wprowadzana jest siła działająca na poszczególne atomy – ma ona kierunek zgodny z prędkością atomu, na który działa, ale przeciwny do niej zwrot, natomiast wartość siły jest wprost proporcjonalna do wartości prędkości. W początkowym etapie formowania pocisku zastosowano lepkość równą 0,1 poise, a po 200 krokach czasowych zmniejszono ją do 0,001 poise – symulację z tą wartością lepkości prowadzono przez 10000 kroków. Konieczność zastosowania wysokiej lepkości na początku formowania się pocisku ma na celu zapobiegnięcie oddaleniu się atomów o największej energii potencjalnej (przekształcającej się w energię kinetyczną) poza obszar formującego się pocisku – gdyby ich prędkość nie została znacząco zredukowana, działające na nie siły przyciągające mogłyby być zbyt słabe, aby przyłączyć te atomy do formującego się pocisku. Natomiast w dalszym etapie formowania pocisku konieczne jest zmniejszenie lepkości, aby atomy nie zostały unieruchomione przed osiągnięciem położeń o minimalnej energii kinetycznej – w przeciwnym wypadku powstały pocisk mógłby mieć niejednolitą budowę (nieregularny kształt, puste przestrzenie wewnątrz) lub być niestabilny. Na koniec lepkość została wyłączona, a ostatnie 1000 kroków czasowych symulacji miały na celu potwierdzenie, iż pocisk jest już stabilny i jego atomy nie ulegają przemieszczeniom przy braku oddziaływań pochodzących z zewnątrz.

Poniżej przedstawiono wizualizację gotowego pocisku, otrzymaną w programie VMD (Visual Molecular Dynamics) przy użyciu reprezentacji atomów jako punktów.



Rysunek 2: Pocisk Ar₂₀₀₀.

Aby sprawdzić, czy pocisk ma jednolitą budowę, wygenerowano jego wizualizację również z uwzględnieniem tylko atomów o współrzędnych spełniających równanie x>0.



Rysunek 3: Przekrój pocisku Ar_{2000} – widoczne jedynie atomy o współrzędnej x>0 (dla początku układu współrzędnych w środku sfery, w której rozmieszczono atomy Ar przed rozpoczęciem formowania pocisku).

2 Wygenerowanie próbki

Ze względu na konieczność ograniczenia liczby atomów podlegających symulacji, w symulacjach rozpylania bądź rozpraszania z wykorzystaniem próbek objętościowych powszechnie stosuje się podejście, w którym symulowana próbka ma kształt półkuli (lub zbliżony do niej, jeżeli powierzchnia próbki nie jest atomowo gładka) [POS1]. Wówczas trajektoria pocisku jest tak dobierana, aby punkt padania jego środka masy znajdował się w pobliżu środka niniejszej półkuli. Należy jednak pamiętać, że nieuwzględnienie oddziaływań pochodzących od atomów, które w rzeczywistej próbce znajdowałyby się poza jej symulowanym fragmentem, prowadziłoby do występowania niezgodnych z rzeczywistością zjawisk w momencie zderzenia pocisku z próbką, prowadząc do zarejestrowania nieprawidłowych widm. Mianowicie doszłoby do większego niż w rzeczywistości odkształcenia symulowanego fragmentu próbki (atomy znajdujące się na jej sferycznej powierzchni ulegałyby większemu oddaleniu od środka, ponieważ nie zatrzymywałyby ich oddziaływania odpychające pochodzące od pozostałych atomów próbki, co z kolei w podobny sposób wpływałoby na odkształcenia kolejnych warstw atomów, znajdujących się coraz bliżej środka), jak również nie byłoby możliwe odprowadzanie nagromadzonej energii kinetycznej, której część w rzeczywistości byłaby rozpraszana w pozostałej części próbki w formie fali uderzeniowej. Szczególnie w tym ostatnim przypadku możliwe jest przewidzenie błędów w uzyskiwanych widmach energetycznych i masowych rozpraszanych cząstek, do jakich mógłby prowadzić: zwiększenie średniej energii kinetycznej rozpraszanych cząstek bądź zmniejszenie ich masy (większa energia przypadająca na parę atomów pocisku oznacza wzrost prawdopodobieństwa ich rozdzielenia). Z tego względu konieczne jest odpowiednie zmodyfikowanie właściwości atomów tworzących zewnętrzne warstwy próbki. Atomy srebra znajdujące się najbliżej sferycznej powierzchni stanowią warstwę sztywną – nie podlegają one przesunięciom, co zapobiega niefizycznym odkształceniom próbki. Jednak warstwa sztywna nie absorbuje energii kinetycznej, więc powstała w wyniku bombardowania fala uderzeniowa może ulegać odbiciu po dotarciu do niej. Z tego względu konieczne jest zastosowanie kolejnej warstwy – stochastycznej. Tworzące ją atomy mogą się poruszać, jednak ustawiona jest dla nich niezerowa lepkość, co powoduje tłumienie fali uderzeniowej. Pozostałe atomy tworzące próbkę nie podlegają żadnym z powyższych ograniczeń i zachowują się tak, jak atomy tworzące rzeczywistą próbkę objętościową (jest to tzw. warstwa swobodna). W niniejszych symulacjach próbka ma promień 150 Å, natomiast grubość warstwy sztywnej wynosi 4 Å, a stochastycznej 26 Å. Lepkość warstwy stochastycznej równa jest 0,14 poise.

Aby zbadać wpływ ukształtowania powierzchni na produkty procesu rozpraszania, przeprowadzono symulacje, w których bombardowana powierzchnia była pofalowana, poprzez usunięcie atomów o współrzędnych spełniających równanie:

$$z > A * (\sin(x/l + \pi/2) * \sin(y/l - \pi/2) - 1)$$
, (11.)

gdzie: x, y – współrzędne poziome, z – współrzędna pionowa, A – amplituda fali, l – długość fali podzielona przez 2π . Stosowano różne parametry odpowiadające za amplitudę oraz długość fali. Dobrano je tak, aby były zgodne z wymiarami nierówności rzeczywistych powierzchni Ag – podobnie, jak w publikacji [POS2], wartości A mieściły się w zakresie 0-50 Å, a l 0-50 Å. Wprawdzie rzeczywiste powierzchnie ukształtowane są z reguły w sposób bardziej losowy i nie jest możliwe ich opisanie przy pomocy powyższego równania, jednakże w niniejszych symulacjach istotny jest fragment powierzchni, na który pada pocisk - oddziaływania pochodzące od sąsiednich struktur są zaniedbywalnie słabe, więc ich wymiary i ukształtowanie mogą być identyczne. Dla każdego zestawu parametrów bombardowano cztery punkty:

- *dół* punkty najniżej położone
- góra punkty najwyżej położone
- *środek1* punkty położone w połowie wysokości struktur powierzchniowych, na przecięciu linii łączących dwie pary najbliższych punktów, odpowiednio *dół* i *góra*

• *środek2* - punkty położone w połowie wysokości struktur powierzchniowych, w połowie odcinka łączącego najbliższe punkty *dół* i *góra*

Uwzględnienie zarówno punktów środek1, jak i środek2 konieczne jest ze względu na istotne różnice gradientu wysokości powierzchni dla tych punktów. W przypadku położeń środek1 istnieje taki kierunek, że oddalanie się wzdłuż niego od tego punktu powoduje wzrost wysokości dla obu zwrotów. Natomiast dla kierunku prostopadłego wysokość maleje, również niezależnie od zwrotu. Inaczej sytuacja wygląda dla punktów środek2. Wówczas istnieje taki kierunek, dla którego pochodna wysokości jest lokalnie zerowa, a w kierunku prostopadłym wysokość próbki rośnie lub maleje, w zależności od zwrotu. Różne ukształtowanie powierzchni wokół poszczególnych punktów wpływa na siły oddziałujące na poszczególne atomy pocisku, decydując o przebiegu procesu jego rozpraszania, a tym samym o rejestrowanych widmach masowych, energetycznych i kątowych.

Dodatkowo, w celu zwiększenia statystycznej dokładności otrzymywanych wyników, bombardowano również 8 punktów znajdujących się wokół każdego z wyżej wymienionych punktów, oddalonych od nich o 1 Å w jednym lub obu wymiarach poziomych. Dla każdego zestawu wartości amplitudy i długości fali przeprowadzono więc łącznie 36 symulacji bombardowania – punkty padania zostały przedstawione na rysunkach 6. i 7.



Rysunek 4: Rozmieszczenie punktów padania pocisku. W ramach każdej grupy złożonej z 9 punktów, odległości pomiędzy najbliższymi punktami wzdłuż osi x i y są zawsze równe 1 angstrem (niezależnie od parametrów ukształtowania powierzchni). Osie wykresu wyskalowano tak, aby podzielenie współrzędnych punktów wykresu przez wartość parametru l dla danej symulacji prowadziło do otrzymania fizycznych współrzędnych.



Rysunek 5: Położenia przykładowych punktów bombardowania. Dla uproszczenia zaznaczono jedynie centralne punkty należące do każdej z czterech grup.

Wraz ze zmieniającą się długością i amplitudą fali oraz współrzędnymi bombardowanego punktu, zmianie podlegają kąty nachylenia powierzchni pod poszczególnymi obszarami bombardującego ją pocisku. Im większy jest stosunek amplitudy do długości fali, tym większy kąt nachylenia powierzchni w punktach o tych samych fazach fali odpowiednio w kierunku x i y. Powoduje to

zmianę kątów odbicia padających atomów pocisku.

Warto zauważyć, iż liczby poszczególnych punktów (dół, góra, środek1, środek2) przypadające na jednostkę powierzchni są różne. Jest to istotna informacja, ponieważ należy uwzględnić ten fakt podczas analizy wyników symulacji - jeżeli powierzchnia próbki będzie bombardowana klasterami w różnych punktach, prawdopodobieństwo uzyskania rozkładów masowych, kątowych lub energetycznych odpowiadających punktom występującym częściej będzie większe, niż w przypadku tych występujących rzadziej. (Jako, że w niniejszych symulacjach klastery argonu padają na powierzchnie prostopadle, można przyjąć założenie, iż prawdopodobieństwo trafienia środkiem klastera w dany punkt zależy wyłącznie od częstości jego występowania na powierzchni wypukłe struktury powierzchniowe nie osłaniają wówczas żadnych obszarów przed padającym pociskiem). Aby wyznaczyć stosunki liczb poszczególnych punktów padających na jednostkę powierzchni próbki, należy policzyć ich liczby w ramach komórki elementarnej pofalowania powierzchni. Można w tym celu sporządzić schemat, zaznaczając ich położenia. Trzeba jednak pamiętać, iż punkty znajdujące się na krawędziach (np. punkt 1 na rysunku 5.) należą do dwóch komórek elementarnych (analizowanej w niniejszych obliczeniach oraz sąsiedniej do niej). Wyjątek stanowią punkty znajdujące się w narożach, które należą do czterech komórek (np. punkt 2 na rysunku 5.). Uwzględnienie punktu należącego do więcej niż jednej komórki stanowi więc dodanie do liczby punktów ułamku - odwrotności liczby komórek, do której on należy.



Rysunek 6: Schemat rozmieszczenia punktów bombardowania w ramach pojedynczej komórki elementarnej struktur powierzchniowych.

Stosując tę metodę, otrzymano następujące liczby punktów przypadających na komórkę

elementarną:

- dół 2
- góra 2
- środek1 4
- środek2 8

Poniżej przedstawiono przykładowy układ symulacyjny, dla A=25 Å i l=50 Å.



Rysunek 7: Układ symulacyjny w stanie początkowym, składający się z pocisku Ar_{2000} i próbki Ag (parametry pofalowania powierzchni A=25 Å i l=50 Å).

3 Dobór optymalnej energii kinetycznej

Po wygenerowaniu pocisku przeprowadzono serię symulacji bombardowania płaskiej powierzchni Ag(111) stosując różne energie kinetyczne pocisku w celu znalezienia optymalnej wartości, dla której liczba emitowanych dimerów argonu w stosunku do sumy liczb monomerów i dimerów jest jak największa. Jest to konieczne w celu uzyskania możliwie wysokiej dokładności podczas badania

zależności tej liczby od ukształtowania powierzchni. Po przeprowadzeniu symulacji dla kilku różnych energii, kolejne symulacje przeprowadzono w pobliżu dotychczasowego maksimum, aby znaleźć wystarczająco dokładną jego wartość.

4 Stosunek wymiarów struktur powierzchniowych do średnicy pocisku

Symulacje przeprowadzone w ramach niniejszej pracy magisterskiej obejmują taki zakres długości fali struktur powierzchniowych, iż w ramach obszaru, na który pada pocisk, może mieścić się różna liczba okresów fal. Dla większych długości fali będzie to niewielki ułamek okresu fali, dla większych - kilka okresów. Ma to istotne znaczenie przy analizie uzyskanych wyników. W zależności od tego, ile wzniesień i obniżeń powierzchni występuje na obszarze padania pocisku, zmianie podlegają siły działające na poszczególne jego części. Przykładowo, przewiduje się, iż zderzenie klastra z powierzchnią o długości fali znacznie mniejszą od jego średnicy będzie sprzyjało jego rozdrobnieniu – atomy padające na wyżej położone punkty powierzchni zaczynają oddziaływać z nią wcześniej, niż gdyby padały na obszary niżej położone.

Przybliżona średnica pocisku wynosi 50 Å. Zgodnie z równaniem 11., długość fali w kierunku x lub y jest 2π razy większa niż wartość parametru l. Oznacza to, iż graniczna wartość l, dla której połowa długości fali będzie równa średnicy pocisku, wynosi:

$$l_{gr} = \frac{50\,\text{\AA}}{\pi} \approx 15.9\,\text{\AA}$$
 (12.)

Na poniższym wykresie zaznaczono wartości l stosowane w symulacjach wchodzących w skład niniejszej pracy magisterskiej oraz odpowiadające im ilorazy średnicy pocisku i połowy długości fali.



Rysunek 8: Wykres przedstawiający wpływ parametru l na stosunek średnicy pocisku do połowy długości fali struktur powierzchniowych.

Dla l = 15 Å średnica pocisku jest nieznacznie większa od długości fali, natomiast dla większych l jest już od niej mniejsza.

3 Analiza wyników

1 Dobór optymalnej energii kinetycznej pocisku

Jak wspomniano w rozdziale 2.3, celem pierwszych symulacji przeprowadzonych po utworzeniu pocisku oraz próbki było znalezienie energii pocisku, dla której masa rozpraszanych dimerów argonu jest możliwie największa w stosunku do sumy mas rozpraszanych monomerów i dimerów. Jak pokazano na rysunku 8., otrzymano wynik 0,2 keV. Wartość tę stosowano podczas wszystkich kolejnych symulacji.



Rysunek 9: Stosunek masy rozpraszanych dimerów Ar do sumy mas monomerów i dimerów, w funkcji początkowej energii kinetycznej pocisku padającego na płaską powierzchnię Ag.

Proponowana interpretacja wyników przedstawionych na powyższym wykresie jest następująca:

Dla najniższych energii (0,1 keV) średnia energia przypadająca na jeden atom argonu jest na tyle mała, że tylko pojedyncze atomy odrywane są od klasteru. Natomiast w zakresie 1 – 10 keV również zawartość Ar_2 jest niewielka, ponieważ pary atomów są przy tak dużych energiach z łatwością rozrywane.

2 Widma masowe

$1 \quad Ar_2/(Ar_1+Ar_2)$

Podstawowym celem niniejszej pracy była odpowiedź na pytanie, czy możliwy jest pomiar chropowatości powierzchni próbki na podstawie stosunku liczb rozpraszanych cząstek

Ar₂/(Ar₁+Ar₂). Dla każdego zestawu wartości amplitudy i długości fali obliczono jego średnią wartość. Uśrednianie przeprowadzono z uwzględnieniem różnych liczb punktów równoważnych poszczególnym bombardowanym pozycjom w ramach komórki elementarnej struktur powierzchni (jak już wspomniano, liczba punktów *góra* i *dół* jest taka sama, punktów *środek1* jest dwukrotnie więcej, zaś liczba punktów *środek2* jest cztery razy większa). Uzyskaną zależność Ar₂/(Ar₁+Ar₂) dla próbek chropowatych przedstawiono na poniższym wykresie.



Rysunek 10: Wykres ukazujący wpływ parametrów ukształtowania powierzchni na średni stosunek liczby rozpraszanych dimerów Ar do sumy liczb rozpraszanych monomerów i dimerów. Poszczególne barwy wykresu przyporządkowane są odpowiednim wartościom na osi pionowej (dotyczy wszystkich wykresów trójwymiarowych w niniejszej pracy).



Rysunek 11: Wykres ukazujący wpływ parametrów ukształtowania powierzchni na odchylenie standardowe stosunku liczby rozpraszanych dimerów Ar do sumy liczb rozpraszanych monomerów i dimerów.

W przypadku próbki gładkiej (o zerowej amplitudzie) uzyskano wynik 0,049(7). Zgodnie

z przewidywaniami, wartość ta jest zbliżona do wyników uzyskanych dla próbek o najmniejszej amplitudzie struktur powierzchniowych.

Zgodnie z definicją, chropowatość jest parametrem zależnym w sposób bezpośredni jedynie od amplitudy struktur występujących na powierzchni próbki, nie zaś od ich długości fali. Analizując powyższy wykres można dojść do wniosku, iż znajomość Ar₂/(Ar₁+Ar₂) nie wystarczy, aby jednoznacznie wyznaczyć chropowatość powierzchni, ponieważ dla różnych zestawów parametrów (A, l) uzyskuje się identyczne lub przybliżone wyniki. Jednakże w przypadku obszarów, dla których uzyskano mniejsze niepewności pomiarowe, jest ona wystarczająca, aby znacznie zawęzić zakres chropowatości, jaką może mieć badana próbka. W dodatku zależność Ar₂/(Ar₁+Ar₂) od amplitudy jest w przybliżeniu monotoniczna – jeżeli znana byłaby długość fali, możliwe byłoby zgrubne określenie chropowatości próbki.

Podjęto próbę interpretacji uzyskanych wyników. Rozłączenie pary atomów argonu wymaga dostarczenia do niej energii, jak również oddziaływania na tworzące ją atomy sił o odpowiednio dużej wartości i znacznym kącie pomiędzy ich wektorami. Uzyskane wyniki wskazują, iż takie warunki występują dla coraz większej liczby par atomów argonu wraz ze zmniejszaniem się amplitudy struktur na powierzchni próbki. Zaproponowano następujące wyjaśnienie tego zjawiska: w przypadku pocisków bombardujących próbkę w nisko położonych obszarach powierzchni, rozpraszane dimery argonu mogą zderzać się z wyżej położonymi fragmentami próbki, a na skutek zderzenia rozpadać się na pojedyncze atomy.



Rysunek 12: Schemat dimeru argonu na monomery na skutek wtórnego zderzenia. W wyniku zderzenia klastra (oznaczonego na pomarańczowo) ulega on rozproszeniu - wyodrębnia się wówczas m.in. dimer oznaczony kolorem niebieskim, który zderza się z położonym wyżej fragmentem powierzchni próbki. Gdyby amplituda pofalowania powierzchni była mniejsza, dimer nie uległby rozpadowi na monomery.

Podobna sytuacja może mieć miejsce również w przypadku wysoko położonych punktów padania. W tym przypadku rozpad cząsteczek argonu na skutek wtórnego zderzenia z powierzchnią próbki dotyczy tych, których pionowa składowa prędkości jest zwrócona w dół. Kąty padania dimerów argonu na niżej położone fragmenty powierzchni próbki maleją wraz ze wzrostem amplitudy, co powoduje, że większa część energii kinetycznej przeznaczana jest na zrywanie wiązań.

Z drugiej strony, dla nisko położonych punktów bombardowania możliwe jest istnienie odwrotnego zjawiska: dla dużych amplitud i małych długości fali zwiększa się czas, przez który poszczególne produkty rozpraszania pocisku znajdują się w niewielkich odległościach, co sprzyja łączeniu się pojedynczych atomów argonu w pary. Jednakże znaczenie tego efektu jest prawdopodobnie niewielkie ze względu na znaczne energie kinetyczne atomów.

Podczas interpretacji uzyskanej zależności stosunku liczb zarejestrowanych cząstek Ar₂/(Ar₁+Ar₂) od amplitudy i długości fali struktur powierzchniowych, konieczne jest uwzględnienie niepewności pomiarowych, ukazanych na rysunku 11. Okazuje się, że największe bezwzględne niepewności występują dla próbek o wysokiej amplitudzie i małej długości fali - wówczas niepewność pomiaru przekracza mierzoną wielkość. W tych przypadkach występuje największe zróżnicowanie ukształtowania powierzchni dla poszczególnych punktów padania pocisku, co powoduje uzyskanie znacznego rozrzutu rejestrowanych wyników.

W celu dokładniejszego przeanalizowania wpływu ukształtowania powierzchni próbki w obszarze bombardowania na uzyskiwane widma masowe rozpraszanego argonu, sporządzono poniższe wykresy - również ukazujące zależność liczby rozpraszanych cząstek Ar₂/(Ar₁+Ar₂), jednak z uwzględnieniem wyłącznie odpowiednich grup punktów padania (*dół, środek1, środek2, góra*).



Rysunek 13: Wykres ukazujący wpływ parametrów ukształtowania powierzchni na średni stosunek liczby rozpraszanych dimerów Ar do sumy liczb rozpraszanych monomerów i dimerów dla punktów padania pocisku należących do grupy "dół".



Rysunek 14: Wykres ukazujący wpływ parametrów ukształtowania powierzchni na odchylenie standardowe stosunku liczby rozpraszanych dimerów Ar do sumy liczb rozpraszanych monomerów i dimerów dla punktów padania pocisku należących do grupy "dół".



Rysunek 15: Wykres ukazujący wpływ parametrów ukształtowania powierzchni na średni stosunek liczby rozpraszanych dimerów Ar do sumy liczb rozpraszanych monomerów i dimerów dla punktów padania pocisku należących do grupy "góra".



Rysunek 16: Wykres ukazujący wpływ parametrów ukształtowania powierzchni na odchylenie standardowe stosunku liczby rozpraszanych dimerów Ar do sumy liczb rozpraszanych monomerów i dimerów dla punktów padania pocisku należących do grupy "góra".



Rysunek 17: Wykres ukazujący wpływ parametrów ukształtowania powierzchni na o średni stosunek liczby rozpraszanych dimerów Ar do sumy liczb rozpraszanych monomerów i dimerów dla punktów padania pocisku należących do grupy "środek1".



Rysunek 18: Wykres ukazujący wpływ parametrów ukształtowania powierzchni na odchylenie standardowe stosunku liczby rozpraszanych dimerów Ar do sumy liczb rozpraszanych monomerów i dimerów dla punktów padania pocisku należących do grupy "środek1".



Rysunek 19: Wykres ukazujący wpływ parametrów ukształtowania powierzchni na o średni stosunek liczby rozpraszanych dimerów Ar do sumy liczb rozpraszanych monomerów i dimerów dla punktów padania pocisku należących do grupy "środek2".



Rysunek 20: Wykres ukazujący wpływ parametrów ukształtowania powierzchni na odchylenie standardowe stosunku liczby rozpraszanych dimerów Ar do sumy liczb rozpraszanych monomerów i dimerów dla punktów padania pocisku należących do grupy "środek2".

W przypadku najmniejszych długości fali wpływ punktu padania pocisku na uzyskiwaną wartość liczby rozpraszanych cząstek Ar₂/(Ar₁+Ar₂) jest niewielki - niezależnie od współrzędnych następuje znaczne rozdrobnienie pocisku, o czym świadczy niewielka liczba dimerów argonu.

Największą stosunkową liczbę rozpraszanych dimerów argonu zaobserwowano dla górnego położenia i parametrów próbki A=10 i l=10. Jak już wspomniano, dla takich parametrów ukształtowania powierzchni średnica pocisku jest 1,6 razy większa niż połowa długości fali oraz jej

amplituda.

2 Bezwzględne liczby rozpylanych cząstek Ar₁ i Ar₂

Podczas obliczania wartości Ar₂/(Ar₁+Ar₂) tracona jest część informacji – bezwzględne liczby rozpraszanych cząstek przypadające na jeden padający klaster. Oznaczać to może szansę na uzyskanie dodatkowych danych dotyczących ukształtowania powierzchni, na przykład oddzielnego wyznaczenia ich amplitudy i długości fali, co pozwoliłoby na obliczenie chropowatości próbki. Aby sprawdzić, czy istnieje taka możliwość, sporządzono poniższe wykresy ukazujące zależność liczby rejestrowanych cząstek, odpowiednio Ar₁ i Ar₂, od amplitudy i długości fali.



Rysunek 21: Wykres ukazujący wpływ parametrów ukształtowania powierzchni na liczbę rozpraszanych Ar₁.



Rysunek 22: Wykres ukazujący wpływ parametrów ukształtowania powierzchni na odchylenie standardowe liczby rozpraszanych Ar₁.



Rysunek 23: Wykres ukazujący wpływ parametrów ukształtowania powierzchni na liczbę rozpraszanych Ar₂.



Rysunek 24: Wykres ukazujący wpływ parametrów ukształtowania powierzchni na odchylenie standardowe liczby rozpraszanych Ar₂.

Oddzielna analiza liczby rozpraszanych cząstek Ar₁ i Ar₂ przypadających na jeden padający klaster pozwala uzyskać dodatkowe informacje na temat ukształtowania powierzchni próbki, jednak wymaga znajomości liczby klastrów bombardujących próbkę. W przeciwieństwie do symulacji komputerowych, w przypadku rzeczywistych eksperymentów wymóg ten może stanowić dodatkowe utrudnienie oraz wprowadzać dodatkowe niepewności pomiarowe.

3 Ciężkie klastery

Niekiedy wśród produktów rozpraszania pocisku oprócz pojedynczych atomów lub kilkuatomowych cząsteczek znajdowały się również klastery złożone dziesiątek, a nawet setek atomów argonu. Pojawiały się one głównie dla położeń *dół* oraz *środek2*, w których ukształtowanie powierzchni jest bardziej wklęsłe – w przeciwieństwie do punktów *góra* i *środek1*, w których wypukłe ukształtowanie powierzchni sprzyja rozdzielaniu pocisku na części. Na poniższym wykresie zaznaczono masy najcięższych produktów rozpraszania dla poszczególnych próbek.



Rysunek 25: Masy najcięższych klastrów emitowanych w wyniku rozpraszania zarejestrowane dla poszczególnych parametrów odpowiadających za amplitudę i długość fali struktur powierzchniowych.

Nie bez znaczenia są również amplituda oraz długość fali struktur na powierzchni próbki. W przypadku najniższego punktu emisji ciężkich klasterów sprzyja występowanie zagłębień dopasowanych kształtem do pocisku. Wówczas, kiedy dolny punkt pocisku zetknie się z powierzchnią próbki, jego boczne fragmenty również są przez nią zatrzymywane. Energia zderzenia jest wówczas przejmowana przez atomy znajdujące się na powierzchni pocisku, które zaczynają poruszać się wzdłuż powierzchni próbki (ze względu na niewielką siłę wiązań van der Waalsa z łatwością odrywają się od wewnętrznej części pocisku). Energia wewnętrznej części pocisku zostaje ograniczona, co zapobiega rozrywaniu jej wiązań w wyniku zderzenia, a jedynie odbicie w całości.



Rysunek 26: Wpływ parametrów ukształtowania powierzchni na możliwość rozpraszania ciężkich klastrów. W przypadku stosunkowo gładkiej powierzchni (oznaczonej linią ciągłą), atomy znajdujące się na krawędziach pocisku mogą pokonać większą drogę od chwili rozpoczęcia zderzenia, niż atomy znajdujące się na środku, co sprzyja rozpadowi pocisku na atomy bądź niewielkie cząstki. W przypadku zderzenia z powierzchnią o krzywiźnie bardziej dopasowanej do powierzchni pocisku, takie zjawisko występuje w mniejszym stopniu, więc preferowane jest rozpraszanie większych klastrów.

Inaczej jest w przypadku większych lub mniejszych długości fali. Jeżeli pocisk pada na stosunkowo płaską powierzchnię, atomy znajdujące się w jego dolnej części oraz pionowo nad nimi zostają początkowo zatrzymane, jednak te znajdujące się w bocznych częściach wciąż pozostają w ruchu. Powoduje to rozerwanie pocisku na części i brak rejestrowania cięższych klasterów. Natomiast w przypadku najmniejszych długości fali pocisk przed dotarciem do najniższego bądź środkowego położenia ociera się o powierzchnię próbki, co również zapobiega emisji wieloatomowych klastrów (atomy znajdujące się bliżej próbki są spowalniane, natomiast dalsze wciąż pozostają w ruchu).

3 Widma kątowe

1 Widma polarne

W celu wygenerowania widm kątowych zmniejszono kąt akceptacji detektora do 10° oraz zastosowano całkowanie azymutalne (dla danego kąta polarnego sumowane są sygnały rejestrowane przy wszystkich kątach azymutalnych). Zarejestrowano oddzielne widma dla cząstek Ar₁, Ar₂ oraz Ar₃. Dla każdego zestawu parametrów powierzchni (długości i amplitudy fali) zsumowano sygnały rejestrowane przy wszystkich położeniach z uwzględnieniem liczby wystąpień poszczególnych pozycji w ramach komórki elementarnej struktur powierzchniowych.



Rysunek 27: W przypadku powierzchni o niewielkiej długości fali, atomy znajdujące się na obrzeżach pocisku wcześniej zostają spowolnione na skutek ocierania o powierzchnię próbki, niż atomy znajdujące się wewnątrz klastra.

W przypadku pojedynczych atomów argonu najwięcej zliczeń występuje dla kątów bliskich 0°, a wraz ze wzrostem kąta polarnego ich liczba maleje. Inaczej jest w przypadku cząstek Ar₂ i Ar₃ – żadne z tych cząstek nie są emitowane w kierunku prostopadłym do powierzchni próbki. To zjawisko może być spowodowane dużą gęstością energii kinetycznej w obrębie pocisku zderzającego się z próbką, co sprzyja "zrywaniu wiązań" pomiędzy atomami argonu. Jednak w przypadku największych kątów liczba rejestrowanych Ar₂ oraz Ar₃ również jest niewielka. Prawdopodobnie jest to spowodowane wtórnym oddziaływaniem tych cząstek ze strukturami na powierzchni próbki, które uniemożliwiają ich emisję pod dużymi kątami.

Aby przeanalizować wpływ ukształtowania powierzchni na uzyskiwane rozkłady kątowe, dla każdego widma kątowego polarnego wyznaczono kąty odpowiadające maksymalnej liczby rejestrowanych cząstek oraz średnie. Uzyskane wyniki przedstawiono na poniższych wykresach.



Rysunek 28: Kąt odpowiadający maksimum widma polarnego rozpraszanych monomerów argonu w funkcji parametrów ukształtowania powierzchni.



Rysunek 29: Kąt odpowiadający średniej z widma polarnego rozpraszanych monomerów argonu w funkcji parametrów ukształtowania powierzchni.



Rysunek 30: Kąt odpowiadający maksimum widma polarnego rozpraszanych dimerów argonu w funkcji parametrów ukształtowania powierzchni.



Rysunek 31: Kąt odpowiadający średniej z widma polarnego rozpraszanych dimerów argonu w funkcji parametrów ukształtowania powierzchni.



Rysunek 32: Kąt odpowiadający maksimum widma polarnego rozpraszanych trimerów argonu w funkcji parametrów ukształtowania powierzchni.



Rysunek 33: Kąt odpowiadający średniej z widma polarnego rozpraszanych trimerów argonu w funkcji parametrów ukształtowania powierzchni.

Zarówno dla pojedynczych atomów argonu, jak i cząstek Ar₂ i Ar₃, kąty polarne odpowiadające największemu rozpylaniu są największe dla minimalnych amplitud pofalowania powierzchni. Oznacza to, że znaczna ich część po rozpyleniu porusza się wzdłuż powierzchni próbki - jest utrzymywana w jej pobliżu za sprawą oddziaływań przyciągających. Jednak kiedy cząstki wznoszące się po powierzchni próbki zbliżą się do najwyżej położonego punktu, mogą one uwolnić się z oddziaływań przyciągających próbki i poruszać się dalej w kierunku próżni, o ile posiadają wystarczającą energię kinetyczną.

Sytuacja jest bardziej skomplikowana w przypadku najmniejszej długości fali (dla l = 10 Å) – połowa długości fali jest wówczas 1,6 razy większa od średnicy pocisku. Wówczas kąty

odpowiadające maksymalnej i średniej emisji cząstek Ar_{1...3} są wyższe, niż dla nieco większych długości fali. Jest to spowodowane tym, że w przypadku bombardowania najniższych położeń w pierwszej kolejności z powierzchnią oddziałują atomy klastra znajdujące się na jego obrzeżach. Jako, że powierzchnia ma ukształtowanie sinusoidalne, a średnica pocisku jest większa od połowy długości fali, w punktach początkowego zetknięcia pocisku z próbką jej nachylenie jest stosunkowo zbliżone do poziomu, więc rozproszone atomy i cząstki poruszające się wzdłuż powierzchni przemieszczają się pod dużymi kątami względem normalnej.



Rysunek 34: Wpływ długości fali względem średnicy pocisku na kierunek ruchu atomów i cząstek rozpraszanych wzdłuż stycznej do powierzchni. A - długość fali jest znaczna, więc maksimum rozpraszania przypada dla dużych kątów. B - długość fali mniejsza, ale jej połowa wciąż pozostaje większa od średnicy pocisku - atomy i cząstki poruszają się wzdłuż bardziej stromej powierzchni, więc kąt rozpraszania jest mniejszy. C - długość fali na tyle mała, iż jej połowa jest mniejsza od średnicy pocisku - wiele atomów i cząstek rozpraszanych jest w wyższych częściach zagłębienia, w których powierzchnia nie jest jeszcze stroma.

2 Widma azymutalne

Zarówno ułożenie atomów na gładkiej powierzchni srebra [111], jak i wprowadzone w niniejszych symulacjach struktury powierzchniowe cechują się symetrią obrotową co 90 stopni. W swojej pracy licencjackiej wykazałem, iż w przypadku rozpylania atomowo gładkiej powierzchni Ag[111] pociskiem Ar₁₀₀₀ widma azymutalne cząstek Ag₁, Ag₂ oraz Ag₃ sporządzone dla pełnego zakresu kątów polarnych posiadają maksima oraz minima co około 90 stopni. Przewiduje się, iż podobne zjawisko będzie również obserwowane dla rozpraszanego argonu, w szczególności dla jego pojedynczych atomów oraz niewielkich cząstek (są one rejestrowane w stosunkowo dużych liczbach, co umożliwia uzyskanie dobrej statystyki). Jest to związane z ukształtowaniem płaszczyzn

potencjału odpychającego wokół pojedynczych atomów srebra oraz tworzonych przez nie większych struktur powierzchniowych, powodujących występowanie największej siły odpychającej w kierunku prostopadłym do lokalnego fragmentu powierzchni.

4 Widma energetyczne

Podczas rejestrowania widm energetycznych należy pamiętać, iż mogą one zależeć nie tylko od ukształtowania powierzchni, ale także od kątów, pod jakimi emitowane są cząstki podlegające badaniu. Z tego względu w pierwszym podrozdziale omówione zostaną widma energetyczne zarejestrowane dla wszystkich rozpraszanych atomów argonu, niezależnie od kątów, dla których są rejestrowane, natomiast w kolejnym przedstawię wpływ kątów padania rozproszonych atomów na ich widma energetyczne. W obydwu przypadkach uwzględnione zostaną atomy rozpylone we wszystkich symulacjach dla poszczególnych zestawów parametrów ukształtowania powierzchni.

1 Widma energetyczne atomów rozpraszanych pod wszystkimi kątami

W niniejszym przypadku zastosowano rozdzielczość energetyczną detektora równą 0,01 eV. Dobrano ją metodą prób i błędów - jeżeli odległość pomiędzy rozróżnianymi energiami jest zbyt duża, tracone jest dużo informacji o ukształtowaniu widma energetycznego, natomiast przy zbyt małej różnicy nie jest możliwe uzyskanie użytecznego wykresu zależności liczby rejestrowanych cząstek od ich energii.

W niniejszym przypadku analizę przeprowadzono jedynie dla pojedynczych atomów argonu, ponieważ pomimo połączenia wyników wielu symulacji liczba jego rozpylanych cząstek jest zbyt mała, aby uzyskać dobrą statystykę. Na poniższym wykresie zaprezentowano przykładowe widmo energetyczne, uzyskane dla parametrów powierzchni A = 10 Å oraz l = 20 Å.



Rysunek 35: Widmo energetyczne pojedynczych atomów argonu rozpraszanych w wyniku bombardowania powierzchni o parametrach ukształtowania A = 10 Å i l = 20 Å.

Niezależnie od parametrów ukształtowania powierzchni, maksimum widma energetycznego monomerów Ar przypada dla energii równej 0,015 eV.

2 Widma energetyczne atomów rozpraszanych pod wybranymi kątami polarnymi

Guo-Qin Xu wraz ze współpracownikami prowadzący symulacje rozpraszania na powierzchni Pt(111) klasterów Ar_n, n=5...26, zauważyli, iż średnia energia kinetyczna atomów jest największa dla tych, które podlegają rozpraszaniu w pobliżu stycznej do powierzchni i maleje wraz ze zbliżaniem się kątów do normalnej. Sprawdzono więc, czy takie zjawisko będzie występowało również w przypadku pocisków Ar₂₀₀₀. Dla wybranych zestawów parametrów powierzchni wygenerowano widma energetyczne, stosując kąty polarne równe 0°, 30°, 60° i 90°. Kąt akceptacji ustawiono na 10°, a rozdzielczość energetyczną na 0,01 eV. Okazuje się, że takie zjawisko występuje również w przypadku pocisku Ar₂₀₀₀ padającego na gładką powierzchnię Ag. Natomiast dla próbki o parametrach A = 10 Å i l = 10 Å średnia energia kinetyczna rozpraszanych atomów Ar była największa dla kąta 60°. Prawdopodobnie jest to spowodowane zderzaniem się atomów rozpraszanych pod dużymi kątami z nierównościami powierzchni, w wyniku czego tracą one część swojej energii kinetycznej (oddając ją próbce).

4 Podsumowanie

Celem niniejszej pracy magisterskiej było sprawdzenie, czy możliwe jest badanie ukształtowania powierzchni srebra poprzez rozpraszanie klastrów zbudowanych z 2000 atomów argonu, o energii kinetycznej 0,2 keV. Przeprowadzono w tym celu serię symulacji opartych o formalizm dynamiki molekularnej, wykorzystując próbki z periodycznymi strukturami powierzchniowymi. W poszczególnych symulacjach stosowano zróżnicowane amplitudy i długości fali tych struktur oraz położenia punktów bombardowania.

Zaobserwowano silny wpływ amplitudy struktur (chropowatości próbki) na stosunek liczby rozpraszanych Ar_1 do sumy liczb Ar_1 i $Ar_2 - w$ przypadku próbek o większej amplitudzie względna liczba rejestrowanych dimerów argonu jest mniejsza. Teoretycznie mógłby on posłużyć jako parametr umożliwiający obliczenie chropowatości próbki, jednak ze względu na wpływ długości fali na jego wielkość wyniki takich pomiarów nie byłyby zbyt dokładne. Aby zwiększyć dokładność uzyskiwanych wyników, można dodatkowo oddzielnie analizować liczby rejestrowanych Ar_1 i Ar_2 , jednak wymagałoby to dokładnej znajomości liczby pocisków padających na próbkę w czasie pomiaru. Innym sposobem na wyznaczanie chropowatości w wyniku rozpraszania klasterów argonu mogłaby być analiza widm kątowych atomów Ar. Sytuacja jest tutaj podobna: średni kąt rozpraszania zależy głównie od amplitudy struktur powierzchniowych (maleje wraz ze wzrostem amplitudy), jednak dokładność takich pomiarów jest znacząco ograniczona ze względu na dodatkowy wpływ długości fali na tę wielkość.

Ostatecznie można stwierdzić, iż wykorzystanie zjawiska rozpraszania klastrów Ar₂₀₀₀ do badania ukształtowania powierzchni Ag(111) jest możliwe i warto rozwijać tę technikę badawczą.

5 Bibliografia

[HER] Shirley Hercules and David M. Hercules *Surface analysis* Encyclopaedia Britannica November 21, 2018

[HAM] D.A. Hamburger et al. *He scattering from compact clusters and from diffusion-limited aggregates on surfaces: observable signatures of structure*

[LOG] R. M. Logan, J. C. Keck, *Classical Theory for the Interaction of Gas Atoms with Solid Surfaces*, Massachusetts Institute of Technology, Cambridge, Massachusetts, 5 February 1968

[AZI] Ronald A. Aziz & M.J. Slaman (1986) *The argon and krypton interatomic potentials revisited*, Molecular Physics, 58:4, 679-697, DOI: 10.1080/00268978600101501

[WHI] John A. White, *Lennard-Jones as a model for argon and test of extended renormalization group calculations*, J. Chem. Phys. 111, 9352 (1999); https://doi.org/10.1063/1.479848

[WIL] Ag EAM from P.L. Williams, et al., MSMSE 14, 817-833 (2006). LAMMPS setfl format. Conversion by C. A. Becker from Y. Mishin files. 4 February 2009. http://www.ctcms.nist.gov/potentials

[POS1] G. Palka, L. Rzeznik, R. Parucha and Z. Postawa, *Molecular Dynamics Simulations of Energetic Ar Cluster Bombardment of Ag(111)* Institute of Physics, Jagiellonian University, Kraków, Poland University of Information Technology and Management, Rzeszów, Poland

[POS2] Dawid Maciazek, Michal Kanski, Lukasz Gaza, Barbara J. Garrison, and Zbigniew Postawa, *Computer modeling of angular emission from Ag(100) and Mo(100) surfaces due to Arn cluster bombardment*