

Энергетические распределения рассеянных на графене атомов углерода в зависимости от угла их скользящего падения

А.М. Расулов¹, А.А. Джуррахалов^{2,3}, И.Д. Ядгаров³, Д.В. Алябьев³, В.Г. Стельмах³

¹Андижанский Государственный Университет, г. Андижан, Узбекистан

²University of Antwerp, Antwerp, Belgium

³Институт ионно-плазменных и лазерных технологий АН РУз, г. Ташкент, Узбекистан

Аннотация: Методом компьютерного моделирования исследованы процессы рассеяния атомов углерода на графене при скользящем падении, получены энергетические распределения рассеянных атомов углерода.

Ключевые слова: Компьютерное моделирование, графен, рассеяние, потенциал Бреннера.

ВВЕДЕНИЕ

Графен представляет собой однослойную двумерную углеродную структуру, поверхность которой состоит из правильных шестиугольников со стороной 0,142 нм и атомами углерода в вершинах. Изучение графена является одной из важнейших задач физики твердого тела. Это связано с уникальными свойствами этой структуры. С прикладной точки зрения, графен интересен как материал для создания наноэлектронных устройств. Это связано с тем, что, являясь плоской двумерной системой, графен может обеспечить возможность создания активных элементов сверхмалых размеров электронных компонентов и устройств. Кроме этого, следует ожидать, что графен и графеноподобные структуры могут обладать уникальными механическими свойствами.

В нашей работе исследуется вопрос, какую информацию можно определить, исследуя рассеяние ионов поверхностью графена. В практической работе это известно как ионная спектроскопия, когда ускоренный пучок ионов определенной энергии направляют на поверхность твердого тела и, регистрируя и анализируя энергетический и угловой спектр рассеянных первичных ионов, определяют определенные свойства поверхности.

Возможности и задачи ионной спектроскопии определяются первоначальной кинетической энергией E_0 ионов, которую обычно измеряют в электрон-вольтах - эВ. Если эта энергия ионов в пределах

$100 \text{ эВ} > E_0 < 1000 \text{ эВ}$, то говорят о спектроскопии рассеяния медленных ионов (т. е. *LEIS* – *Low Energy Ion Scattering spectroscopy*). В случае больших значений E_0 , а именно $10^3 \text{ эВ} > E_0 < 2 \cdot 10^6 \text{ эВ}$, то говорят о спектроскопии рассеяния быстрых ионов (т. е. *HEIS* – *High Energy Ion Scattering spectroscopy*), а если $E_0 > 2 \cdot 10^6 \text{ эВ}$ - спектроскопии обратного резерфордского рассеяния (*RBS* – *Rutherford Backscattering Spectroscopy*). Если регистрируется спектр вторичных ионов, выбитых первичным пучком с поверхности образца, говорят о вторичной ионной масс-спектрометрии. В условиях применения ионной спектроскопии для графена надо, чтобы графен не разрушался под действием ионного воздействия, поэтому вторичная ионная спектроскопия и спектроскопии *HEIS* и *RBS* не приемлемы.

В нашей работе, следуя спектроскопии рассеяния медленных ионов, моделируется рассеяние атомов углерода, представляющих собой сколламированный моноэнергетический поток, и далее анализируется энергетической спектр рассеянных атомов.

Обычно на практике с помощью спектроскопии рассеяния медленных ионов удается получить следующие сведения:

1. химический элементный состав поверхности образца;
2. относительная концентрация поверхностных атомов;
3. данные о поверхностной решетке, адсорбированных атомах и дефектах;
4. данные о химическом состоянии поверхностных атомов.

Полученные с помощью компьютерного моделирования энергетические спектры помогут в решении задач спектроскопии рассеяния медленных ионов.

1. КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ГРАФЕНА

Модель графена прямоугольной формы,

состоящая из 112 атомов углерода (см. цветную часть Рис. 1), строилась с наложением периодических условий на граничные атомы вдоль плоскости этой структуры. Затем эта модель графена прошла процесс дампования

(введения сил взаимодействия при $T = 0 \text{ }^\circ\text{K}$) и процесс термализации дампованной структуры, в результате чего модель графена «разогрели» до $300 \text{ }^\circ\text{K}$.

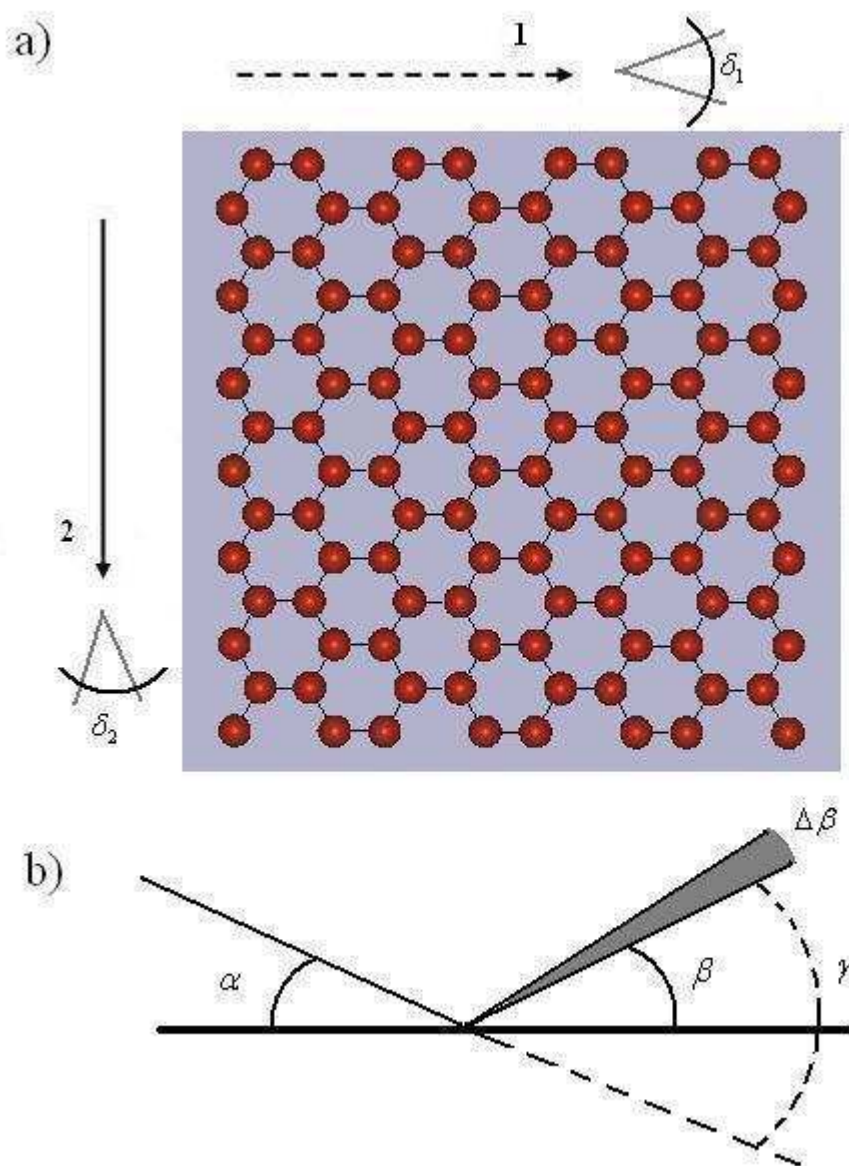


Рис. 1. а) Участок графена из 112 атомов углерода, показанный в плане. Пунктирная стрелка 1 указывает «armchair»-направление графена, сплошная стрелка 2 - «zigzag»-направление, δ_1 и δ_2 разброс по азимуту рассеянных атомов углерода соответственно в «armchair»-направлении графена и «zigzag»-направлении; б) Углы падения α , рассеяния γ , наблюдения β и разрешения детектора $\Delta\beta$; плоскость графена перпендикулярна рисунку, в плоскости которого лежат вектор падения и его проекция на графен

Для описания межатомного взаимодействия использовался потенциал Бреннера второго поколения (REBO), который хорошо описывает углеродные и водород-углеродные структуры [1]. Этот потенциал имеет вид суммы по всем связям:

$$E_b = \sum_i \sum_{j(>i)} [V^R(r_{ij}) - b_{ij}V^A(r_{ij})] \quad (1)$$

где E_b - средняя энергия связи в электрон-вольтах (эВ), r_{ij} - расстояние между атомами i

и j . Функции $V^R(r_{ij})$ и $V^A(r_{ij})$ являются парно-аддитивными взаимодействиями, представляющими все межатомные отталкивания (между ионными остовами и т.д.) и притяжения между валентными электронами соответственно. Эти функции задаются следующим образом:

$$V^R(r) = f^C(r)(1+Q/r)A \cdot \exp(-\alpha \cdot r), \quad (2)$$

$$V^A(r) = f^C(r) \sum_{n=1,3} B_n \cdot \exp(-\beta_n \cdot r), \quad (3)$$

где функция обрезания $f^C(r)$ имеет вид:

$$f^C(r) = \begin{cases} 1 & r < D_{ij}^{\min} \\ \left\{ 1 + \cos \left[\frac{(r - D_{ij}^{\min})}{(D_{ij}^{\max} - D_{ij}^{\min})} \right] \right\} / 2 & D_{ij}^{\min} < r < D_{ij}^{\max} \\ 0 & r > D_{ij}^{\max} \end{cases}$$

а величины A , Q , α , B_n и β_n ($1 \leq n \leq 3$) - это параметры для связей между двумя атомами углерода. Здесь n тип химической связи (т.е. одинарная, двойная или тройная связи).

Эмпирическая функция кратности связи, отражающая тип химической связи между атомами i и j , записывается как

$$b_{ij} = \frac{1}{2} [b_{ij}^{\sigma-\pi} - b_{ji}^{\sigma-\pi}] + b_{ij}^{\pi} \quad (3)$$

где функции $b_{ij}^{\sigma-\pi}$ и $b_{ji}^{\sigma-\pi}$ зависят от места и углов связи, определяемых взаиморасположением каждого атома (i -го и j -го, соответственно), и регулируют гибридизацию орбиталей атомов углерода. В нашей работе рассматриваются плоскостные структуры, поэтому согласно [2]

$$b_{ij}^{\sigma-\pi} = \left\{ 1 + \sum_{k(\neq i, j)} f_{ij}^C(r_{ij}) G[\cos(\theta_{ijk})] \right\}^{-1/2} \quad (4)$$

Здесь угловая функция $G[\cos(\theta_{ijk})]$ модулирует распределение всех ближайших соседей и определяет косинус угла связи между атомами $i - j - k$. Эта функция была получена в [1].

Для углов $0^\circ \leq \theta \leq 109.47^\circ$ вместо вышеупомянутой угловой функции использовалось другое выражение, которое даёт более точные результаты:

$g_C = G_C(\cos(\theta)) + Q(N_i^C) \{ \gamma_C[\cos(\theta)] - G_C[\cos(\theta)] \}$
где

$$Q(N_i^C) = \begin{cases} 1 & N_i^C < 3.2 \\ \left\{ 1 + \cos[2\pi(N_i^C - 3.2)] / 2 \right\} & 3.2 < N_i^C < 3.7 \\ 0 & N_i^C > 3.7 \end{cases}$$

где N_i^C число соседей атома углерода i . О функции $\gamma_C[\cos(\theta)]$ подробнее говорится в статье [3].

Функция $b_{ij}^{\sigma-\pi}$ описана в [1], в которой также приведены величины для всех параметров, используемых в наших расчётах.

2. КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ РАССЕЙЯНИЕ АТОМОВ УГЛЕРОДА НА ГРАФЕНЕ

После того как была получена компьютерная модель графена, разогретого до $300^\circ K$, изучались процессы столкновения атомов углерода с кинетической энергией 100 эВ с этим графеном с использованием молекулярной динамики. Углы скользящего падения атомов

углерода, отсчитываемые от плоскости графена, задавались в 5° , 10° и 20° , направления скорости падающих атомов углерода выбиралось либо вдоль «zigzag»-направления либо вдоль «armchair»-направления графена (см. Рис. 1). Для каждого угла и направления скользящего падения атомов углерода было моделировано 100 случаев, причем точка падения на графен каждый раз задавалась случайным образом.

Результаты, полученные компьютерным моделированием, сравниваются с абстрактным «идеальным упругим» случаем. В «идеальном упругом» случае атомы углерода считаются идеально твердыми шарами абсолютно упруго взаимодействующими с абсолютно ровной неразрушающейся поверхностью – графеном. В таком случае угол рассеяния падающего атома γ равен удвоенному значению его угла падения α , т.е. $\gamma = 2 \cdot \alpha$ (см. рис.1). Кроме того, рассеянные атомы углерода будут наблюдаться только под углом наблюдения β , равным углу падения, т.е. $\beta = \alpha$, и разброс по азимуту δ_1 и δ_2 рассеянных атомов углерода будет равным нулю (см. Рис. 1).

3. РЕЗУЛЬТАТЫ И ОБСУЖДЕНИЕ

Как показали результаты компьютерного моделирования рассеяние атомов углерода на графене при углах скользящего падения отличается от рассеяния в «идеальном упругом» случае, т.е. эти рассеиваемые атомы «чувствуют» структуру графена, а именно, появляется разброс рассеянных атомов по азимуту их движения (δ_1 или δ_2 не равно нулю) и по углам рассеяния. Углы рассеяния характеризуем, во-первых, средним углом рассеяния $\gamma_{\text{ср}}$ как среднеарифметическое всех углов рассеяния, а во-вторых, минимальным и максимальным углами наблюдения (β_{min} и β_{max}), которые связаны с минимальными и максимальными углами рассеяния (γ_{min} и γ_{max}) соотношением $\gamma_{\text{min(max)}} = \beta_{\text{min(max)}} + \alpha$, где α – угол падения. Так, как углы наблюдения рассеиваемых атомов β лежат в пределах от β_{min} до β_{max} , то детектор будет регистрировать в этих же угловых пределах рассеиваемые атомы углерода. Разрешение детектора $\Delta\beta = \beta_{\text{max}} - \beta_{\text{min}}$ – это необходимое условие, чтобы зарегистрировать все рассеиваемые атомы. Величины $\gamma_{\text{ср}}$, β_{min} , β_{max} , δ_1 и δ_2 определяют условия наблюдения энергетических спектров рассеянных на графене атомов углерода, которые приведены в Таблице 1.

На рис. 2 показаны энергетические спектры рассеянных графеном атомов углерода в таких условных единицах, что максимальное значение каждого спектра равняется 100.

В Таблице 2 приведено сопоставление энергетических спектров рассеянных на графене атомов углерода.

Таблица 1. Условия наблюдения энергетических спектров рассеянных на графене атомов углерода

	«armchair»-направление			«zigzag»-направление			идеальный случай
	5°	10°	20°	5°	10°	20°	
Скользющие углы падения, α	5°	10°	20°	5°	10°	20°	все углы
Средний угол рассеяния $\gamma_{\text{ср}}$	3.69°	9.67°	19.8°	4.99°	10.04°	19.59°	$=2\cdot\alpha$
Максимальный угол наблюдения β_{max}	6.70°	13.6°	27.0°	8.02°	13.7°	23.4°	$=\alpha$
Минимальный угол наблюдения β_{min}	1.08°	6.3°	11.9°	1.43°	6.8°	14.3°	$=\alpha$
$\Delta\beta = \beta_{\text{max}} - \beta_{\text{min}}$	5.62°	7.3°	15.1°	6.59°	6.9°	9.1°	0
Разброс по азимуту δ	8.69°	8.9°	21.8°	9.31°	12.4°	29.2°	0
Процент распыленных атомов графена	0	0	17	0	0	7	0

Таблица 2. Сопоставление энергетических спектров рассеянных на графене атомов углерода

Величины, характеризующие энергетический спектр рассеянных атомов водорода	«armchair»-направление			«zigzag»-направление			идеальный случай
	5°	10°	20°	5°	10°	20°	
Углы скользящего падения	5°	10°	20°	5°	10°	20°	все углы
Количество пиков	3	1	2	3	2	2	1
Средняя кинетическая энергия, эВ	98.12	95.66	85.01	97.11	95.79	88.03	100
Значение кинетической энергии в максимальном пике (подчеркнуто – пологий пик), эВ	96.86	<u>95.51</u>	89.20	96.82	95.59	<u>89.11</u>	100
Ширина энергетического спектра, эВ	2.51	2.23	31.66	3.30	2.19	17.09	0

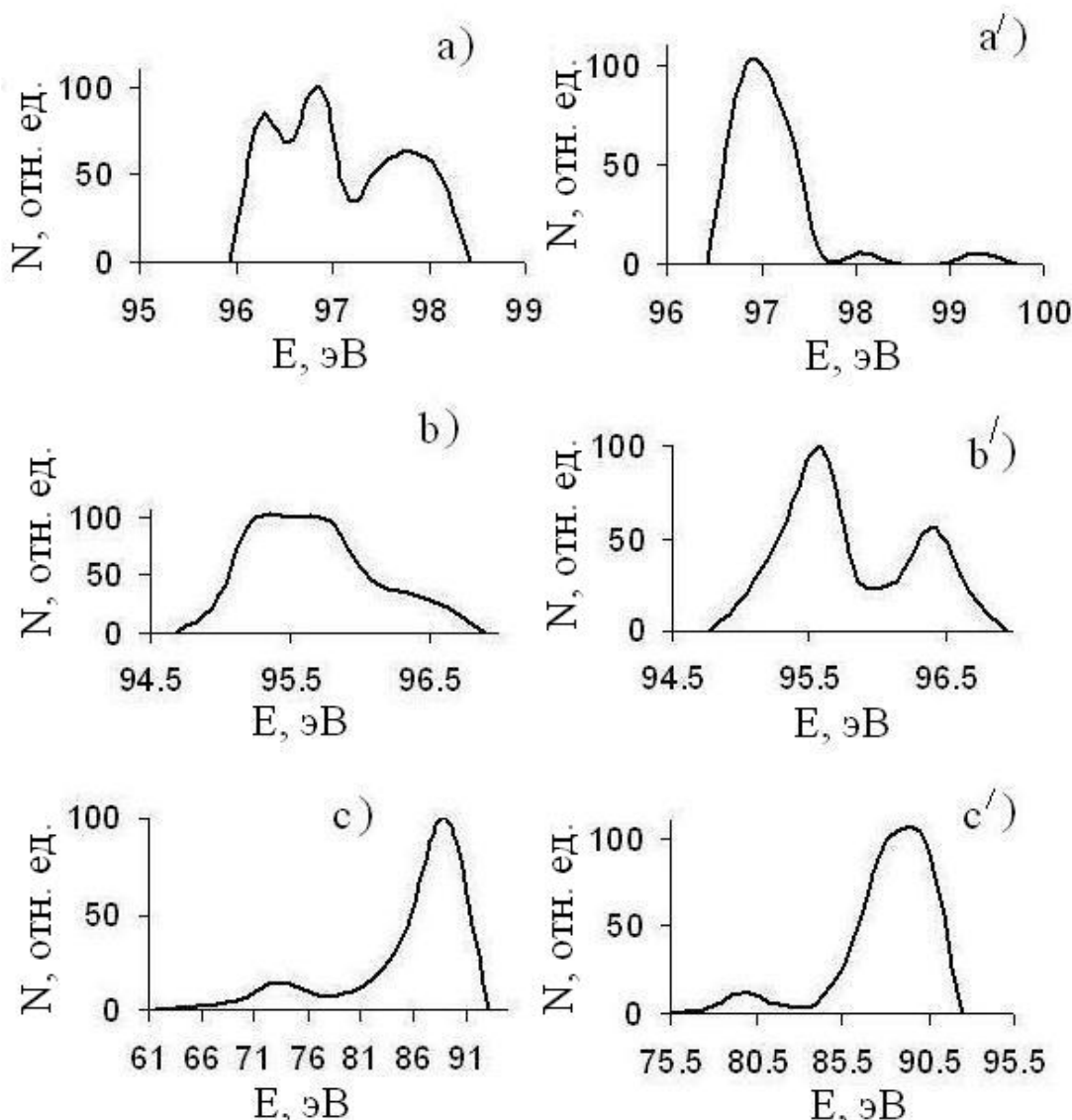
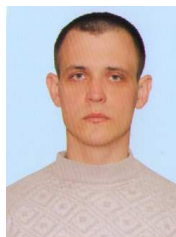


Рис. 2 Энергетические спектры в условных единицах рассеянных графеном атомов углерода, падавших с энергией 100 эВ на графен; а), b) и c) – атомы углерода двигались в «armchair»-направлении графена, а'), b') и c') – в «zigzag»-направлении. Углы падения: для а) и а') 5°; для b) и b') 10°; для c) и c') 20°

Таким образом, компьютерным моделированием найдено, что энергетические спектры рассеянных на графене атомов углерода имеют свои индивидуальные характеристики, зависящие от направления и угла скользящего падения атомов.

ЛИТЕРАТУРА

[1] D.W. Brenner, O.A. Shenderova, J.A. Harrison, S.J. Stuart, B. Ni, S.B. Sinnott, J. Phys: Condens. Matter. № 14. С. 783-802; 2002
 [2] C. Zhang, X. Xu, H. Wu, and Q. Zhang, Chem. Phys. Lett. 364, 213; 2002.
 [3] D. P. Kosimov, A. A. Dzhurakhalov and F. M. Peeters Phys. Rev. B 81, 195414; 2010



Алябьев Д.В. н.с. ,
 Институт ионно-плазменных
 и лазерных технологий АН
 РУз
 E-mail: wside@mail.ru



Стельмах В.Г. – н.с.,
 Институт ионно-плазменных
 и лазерных технологий АН
 РУз
 E-mail: vasilyicat17@rambler.ru



Расулов А.М. – д.ф.-м.н., профессор кафедры «Информатика» Андижанского Государственного Университета
E-mail: arasulov59@mail.ru



Джурахалов А.А. – д.ф.-м.н., профессор University of Antwerp
E-mail: dzhurakhalov@mail.ru



Ядгаров И.Д. – к.ф.-м.н., с.н.с., Институт ионно-пазменных и лазерных технологий АН РУз
E-mail: iyadgarov@mail.ru

Energy distribution of scattered on graphene carbon atoms depending on their grazing incidence angle

A.M. RASULOV, A.A. DZHURAKHALOV, I.D. YADGAROV, D.V. ALYABYEV, V.G. STELMAKH

Abstract: Scattering processes of carbon atoms on graphene at grazing incidence have been investigated by computer simulation and the energy distribution of scattered atoms were obtained.

Key words: Computer simulations, graphene, scattering, Brenner potentia