

Краевые столкновения медленных атомов с двумерной гексагональной структурой

А.С. Долгов, М.С. Чередниченко

Национальный аэрокосмический университет, ул. Чкалова, 7, 61070 Харьков, Украина

(Получено 27.05.2014; опубликовано online 29.11.2014)

Рассматриваются особенности столкновений с атомами, представляющими край двумерной гексагональной структуры, когда направление воздействия совпадает с ориентацией больших диагоналей гексагонов.

Показано, что размещение атомов мишеней, задаваемое геометрией структуры, определяет распределение параметров удара и передач энергии, существенно отличающиеся от того, что имеет место при случайном размещении объектов воздействия. В рамках модели твердых шаров определяется энергетический спектр отраженных атомов и вероятности однократных, либо многократных соударений со структурой. Установлено повышение эффективности передачи энергии объекту сравнительно со случаем неупорядоченной структуры. Показана возможность столкновений с атомами второго слоя, минуя первый, и определяются условия реализации таких же взаимодействий.

Ключевые слова: Столкновения, Медленные атомы, Граница структуры, Передача энергии, Нанотрубки, Графен.

PACS number: 34.10. + x

1. ВВЕДЕНИЕ

Открытие фуллеренов, нанотрубок, графена резко повысило интерес к двумерным гексагональным структурам. При этом внимание исследователей обращается не только на свойства и явления, присутствующие названным объектам как таковым, но и на разнообразные, казалось бы, хорошо изученные процессы в их трансформации применительно к таким структурам. К числу таких эффектов принадлежат и столкновения атомных частиц.

Опубликованы теоретические исследования, охватывающие как высокие энергии бомбардировки [1], так и низкие [2, 3], использующие как относительно детальные, так и сугубо модельные концепции, в применении к свободному графену [1], так и к иным форм мишеней [2-4]. Отдавая должное усилиям авторов названных и других работ, следует всё же констатировать, что они не создают сколько-нибудь целостной картины, что объясняется, разумеется, широким – не только количественным, но и качественным разнообразием предполагаемых в теории или имеющих место в реальности условиям.

В настоящей работе обсуждается особенность столкновения медленных атомов с атомами, представляющими край гексагональной структуры. Несмотря на то, что количество таких атомов, как правило, относительно невелико, роль этих атомов может быть весьма существенной, так как они более других чувствительны к воздействию окружающей среды. Речь может идти, например, об атомах на срезе нанотрубки, бомбардировка которых другими атомами, поступающими извне, может иметь место в условиях формирования этих трубок, и в определенных режимах их применения [5]. Впрочем, в гипотетических устройствах, содержащих большое количество трубок малого диаметра, именно крайние атомы будут представлять торцевую макроповерхность. Аналогично обстоит дело в применении к многослойным трубкам и, возможно, к ещё менее изученным объектам – графену [6], силициду [5], фосфорену [7].

2. СХЕМА АНАЛИЗА

Принимаем, что непосредственному воздействию со стороны налетающих атомов подвержен слой атомов, представляющих край обсуждаемой структуры («ребро» двумерного образования), причём направление бомбардировки совпадает с плоскостью. Геометрия бомбардируемой структуры определяет особенности размещения атомов относительно условной границы структуры. Разумеется, для непрерывного набора вариантов случайной ориентации границы относительно кристаллографических осей характер позиционирования также содержит ряд индивидуальных особенностей. Однако подобное многообразие едва ли может рассматриваться в качестве обстоятельства преимущественного интереса для столь совершенных объектов, какими является, например, углеродные нанотрубки. В силу этого мы предполагаем «правильный» срез, сообразованный с направлениями в структуре.

Возникают два неидентичных варианта размещения атомов на границе структуры. Если направление нормали к поверхности совпадает с ориентацией больших диагоналей шестиугольников, то внешний ряд представляет собой совокупность равностоящих атомов, а поверхность в целом имеет пилообразный вид («пила», «гребенка»). Если же нормаль ориентирована вдоль малых диагоналей гексагонов, то крайний ряд представлен правильным набором атомных пар с промежутками между ними, что создаёт иной общий рельеф поверхности («двойная гребенка», «кресло»). Здесь мы ограничиваемся первым из названных вариантов.

Выполняемые ниже построения предполагают упругое взаимодействие и используют представления об атомах как недеформируемых шарообразных объектах. Разумеется, модель твердых шаров не может претендовать на предсказания строго количественного характера, однако, как показывает история становления представлений физики столкновений [8], вполне пригодна для качественного или

полуколичественного анализа применительно к высоким энергиям столкновения. Ради определенности принимается представление об идентичности атомов-снарядов и атомов-мишеней. Возникающие при этом упрощения малозначительны, так что смысл этого дополнительного ограничения – в особом значении именно этих соударений в различных процессах, связанных с формообразованием структур, - наращиванием структуры либо уменьшением объекта. Радиусом шара считается половина межатомного удаления между ближайшими атомами, что обычно и квалифицируется как «атомный радиус».

3. ВАРИАНТЫ СТОЛКНОВИТЕЛЬНЫХ ВЗАИМОДЕЙСТВИЙ

Строгая геометрия объекта воздействия формирует определённую структуру качественно различающихся вариантов взаимодействия, отсутствующую при случайном размещении мишеней или(и) в случае высокой проникающей способности. Налетающие атомы непосредственно взаимодействуют как с атомами фронтального ряда, так и с подстилающим вторым слоем. Эти варианты ниже рассматриваются особо с учётом, разумеется, их взаимообусловленности.

Рисунок 1 представляет вид на структуру со стороны бомбардировки. Выделен фрагмент, охватывающий весь набор геометрических соответствий, присутствующих в обсуждаемой структуре. Все численные значения, обозначающие характерные позиции заданы как отношение соответствующей величины к межатомному размеру «а». Дуги радиуса $a/2$ означают контуры атома первого слоя и частично затенённого второго. Дуги радиуса a определяют области прицельных параметров, допускающих столкновения с теми или другим атомами. Область параметров удара фронтального атома, размещённого в позиции $(\sqrt{3}/2 a, 0, a/2)$ закрывает преобладающую часть аналогичной зоны для атома второго слоя с координатами $(0, 0, 0)$. Открыт для таких столкновений криволинейный треугольник, ограниченный двумя дугами радиуса a . Однако и область перекрытия зон, соответствующих двум мишеням, не всегда обеспечивает приоритет фронтального атома. Для значений x, y в области перекрытия акт столкновения реализуется для той из мишеней, для которой отвечающее контакту удаление a достигается при более высоком значении z . Это обстоятельство в качестве условия столкновения с атомом второго слоя определяет требование

$$\sqrt{a^2 - x^2 - y^2} > \frac{a}{2} + \sqrt{a^2 - \left(x - a \frac{\sqrt{3}}{2}\right)^2 - y^2}. \quad (1)$$

Условие (1) переписывается в форме

$$y > y_0, \quad (2)$$

$$y_0 = \sqrt{2\sqrt{3}ax - 4x^2}, \quad x < \frac{\sqrt{3}}{6}a,$$

(Кривая 2 представлена на рисунке 1)

Таким образом, область параметров удара для второго слоя охватывает и криволинейную фигуру с

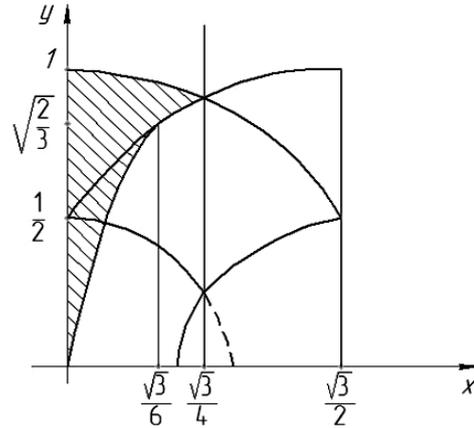


Рис. 1 – Области параметров удара для двуслойной структуры

вершинами $(0,0; 0, a/2; \sqrt{3}/6 a, \sqrt{3}/2 a)$. Составленная из двух участков граница между зонами столкновений с той или другой мишенью скачкообразно разграничивает и закономерности столкновения – передача энергии, угол отклонения, сценарий последующих событий. Получается, что малое смещение проекции падающего атома может повлечь за собой весьма существенное изменение результатов воздействия. Позиции x, y вблизи от разграничивающей кривой преимущественно соответствуют периферийной зоне параметров удара для фронтального атома и центральной для атома подстилающего слоя. Это значит, что в первом случае передача энергии не велика, а во втором приближается к максимальной. Направления отражения падающего атома кардинально различаются. При этом общая передача энергии структуре существенно зависит от возможности и особенностей второго столкновения.

3.1 Столкновение с атомами внешнего слоя

Функция распределения параметров удара определяется как

$$f(\rho) = \frac{l(\rho)}{S_1} \quad (3)$$

где S_1 – площадь области соударения с фронтальным атомом, l – длина дуги, имеющей центр в точке $(\sqrt{3}/2 a, 0)$ и ограниченной контуром области соударений: $x = \sqrt{3}/2 a$ – с одной стороны и уровнем $y = 0$, или кривой (2) – с другой.

При этом

$$l(\rho) = \begin{cases} \frac{\pi}{2} \rho, & \rho < \frac{\sqrt{3}}{2} a, \\ \rho \arcsin \frac{\sqrt{3} a + \sqrt{a^2 - \rho^2}}{2\rho}, & \frac{\sqrt{3}}{2} a < \rho < a, \end{cases} \quad (4)$$

$$S_1 = \left(\frac{\pi}{6} + \frac{\sqrt{3}}{8}\right) a^2 - S_{12}, \quad (5)$$

$$S_{12} = \int_0^{\frac{\sqrt{2}}{2}} \left(\sqrt{\frac{a^2}{4} + \sqrt{3}ax - x^2} - \sqrt{2\sqrt{3}ax - 4x^2} \right) dx.$$

Впрочем, поправка S_{12} невелика – составляет не более $0,03 a^3$. Энергия бомбардирующего атома после акта соударения зависит от прицельного расстояния по закону:

$$\varepsilon_1 = \varepsilon_0 \frac{\rho^2}{a^2}. \quad (6)$$

Выражение (6) вместе с соотношениями (3-5) позволяет записать функцию распределения энергий после столкновения (энергетический спектр)

$$f(\varepsilon_1) = \begin{cases} \frac{\pi a^2}{4\varepsilon_0 S_2}, & 0 < \varepsilon_1 < \frac{3}{4} \varepsilon_0, \\ \frac{a^2}{2\varepsilon_0 S_2} \arcsin \frac{\sqrt{3} \varepsilon_0^{1/2} + \sqrt{\varepsilon_0 - \varepsilon_1}}{\varepsilon_1^{1/2}}, & \frac{3}{4} \varepsilon_0 < \varepsilon_1 < \varepsilon_0, \end{cases} \quad (7)$$

Выражение в первой строке (7), соответствующее относительно малым энергиям и параметрам удара – константа, а в области относительно невысоких передач энергии (большие ε_0 , вторая строка (7)) имеет место убывание с ростом энергии.

Первое из выражений (7) превосходит (приблизительно на $1/10$) величину ε_0^{-1} – значение $f(\varepsilon_1)$ для изолированного атома. Второе из выражений (7) в среднем заметно уступает указанному значению. Это означает, что характер взаимного расположения атомов в изучаемой структуре определяет увеличение относительно низкоэнергетической составляющей спектра, т.е. повышению эффективности передачи энергии.

Средняя энергия после столкновения с фронтальным атомом при линейной аппроксимации зависимости (7) для относительно больших энергий записывается так:

$$\varepsilon_1 = \frac{1}{2} f_1 \varepsilon_0^2 \left(1 - \frac{11}{24} \frac{f_1 - f_2}{f_1} \right),$$

где f_1, f_2 значения функции $f(\varepsilon_1)$ (7) при $\varepsilon_1 \leq 3/4 \varepsilon_0$ и $\varepsilon_1 = \varepsilon_0$, что составляет приблизительно

$$\varepsilon_0 \approx 0,4 \varepsilon_0.$$

Напомним, что аналогичная величина для столкновения со свободным составляет точно $1/2 \varepsilon_0$, констатируем заметное усиление эффекта передачи энергии.

3.2 Столкновения со вторым слоем

Область параметров удара, соответствующих столкновению с атомами второго слоя обозначена на рис.1 штриховкой. Длины дуг, имеющих центр в начале координат и задающих распределение параметров удара следующие

$$l_1 = \rho \arcsin \frac{\sqrt{3} a - \sqrt{a^2 - \rho^2}}{\rho}, 0 < \rho < \frac{\sqrt{3}}{2} a, \quad (8)$$

$$l = \rho \arcsin \frac{\rho^2 - \frac{a^2}{4}}{\sqrt{3} a \rho}, \frac{\sqrt{3}}{2} a < \rho < a.$$

Выражения (8) позволяют определить энергетическое распределение после столкновения. При некотором огрублении (линеаризация на отдельных участках) получается

$$f(\varepsilon_1) = \frac{A}{S_2} \gamma \varepsilon_1^{1/2}, \varepsilon < \frac{3}{4} \varepsilon_0, \quad (9)$$

$$f(\varepsilon_1) = \frac{A}{\gamma S_2} \left(2\varepsilon_1^{1/2} - \frac{1}{2} \frac{\varepsilon_0}{\varepsilon_1^{1/2}} \right), \frac{3}{4} \varepsilon_0 < \varepsilon < \varepsilon_0.$$

Здесь

$$A = \frac{\sqrt{3} a^2}{12 \varepsilon_0^{3/2}},$$

γ – поправочный множитель, компенсирующий погрешность линеаризации ($\gamma \leq 1,15$), S_2 – площадь заштрихованной фигуры. Значение S_2 находится вычислением

$$S_2 = \frac{a^2}{2} \arcsin \frac{\sqrt{3}}{4} + \frac{\sqrt{39}}{8} a^2 - \int_0^{\frac{\sqrt{3}}{6} a} \sqrt{2\sqrt{3}ax - 4x^2} dx - \int_{\frac{\sqrt{3}}{6} a}^{\frac{\sqrt{3}}{4} a} \sqrt{\frac{1}{4} a^2 + \sqrt{3}ax - x^2} dx \quad (10)$$

что составляет приблизительно $0,092a^2$. В отличие от закономерностей, даваемых формулами (7) (столкновение с фронтальным атомом), выражения (9) устанавливают рост $f(\varepsilon_1)$ с увеличением энергии приблизительно по корневому закону. Это свидетельствует об увеличении относительной роли невысоких передач энергии, что не исключает, разумеется, наличия относительно редких соударений с большим энергообменом, вплоть до полной отдачи. Средняя энергия атома составляет здесь около $0,7\varepsilon_0$, что существенно выше, чем в варианте фронтальных соударений.

Обсуждаемые столкновения соответствуют, как правило, небольшим, почти скользящим, углам столкновения, что также определяет толчок под большим углом к направления бомбардировки. Это выглядит как выбивание атомов из-под первого слоя. Эти столкновения во всём диапазоне энергий соответствуют возбуждению второго и более глубоких слоёв, минуя первый.

4. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Рассмотрение кинематики столкновения налетающего атома со срезом двумерной гексагональной структуры выявляет отличия как количественного, так и качественного характера от картины взаимодействия со случайно размещенными мишенями. Обнаруживается тенденция к повышению эффективности передачи энергии.

С другой стороны принятый к изучению вариант условий бомбардировки включает в себя возможности соударения как с атомами внешнего (фронтального) ряда, так и с атомами второго (подстилающего) слоя.

При этом закономерности распределения параметров удара, и, значит, также передач энергии для двух

названных возможностей почти альтернативны, в силу чего возникают две парциальные формы энергетического спектра отражённых частиц и особенностей отражения. Экспериментальное различие двух указанных версий столкновения может быть затруднительным, но их наличие будет проявляться не столько в свойствах отражённого потока атомов, сколько в условиях возбуждения поверхности. Непосредственное инициирование атомов второго слоя без прямого воздействия на первый создаёт особые формы возбуждения приповерхностного слоя, что, несомненно, сыграло свою роль в важнейших наблюдаемых эффектах – осаждении атомов или распылении.

Разумеется, содержание данного рассмотрения не исчерпывает картину взаимодействия. В частности, вне обсуждения оставлена кинематика процессов в более поздние сроки, нежели акт первого столкновения. В этой связи следует указать, что преобладающая часть столкновений связана с уходом падающего атома от объекта воздействия. Вероятность второго столкновения атома со структурой значительно (особенно при взаимодействии со вторым слоем) уступает вероятности отражения после первого соударения. С другой стороны, выполненные здесь построения, могут служить платформой для расчётов особенностей вторых и последующих соударений, когда таковые возможны.

Boundary Collisions of Slow Atoms with Two-dimensional Hexagonal Structure

A.S. Dolgov, M.S. Cherednichenko

National Aerospace University, 7, Chkalov Str., 61070 Kharkiv, Ukraine

Features of collisions with boundary atoms of two-dimensional hexagonal structure, when direction of the interaction coincides with orientation of main diagonals of hexagons, are considered.

It is shown that location of target atoms, specified by the structure geometry, define the distribution of impact parameters and energy transfer which strongly differs from the distribution of random location of targets. Considering model of solid spheres, energy spectrum of reflected atoms and probability of single or multiple collisions with the structure are found. Increase in the energy efficiency with respect to the disordered structure is established. Possibility and conditions of realizations of collisions with the second layer atoms omitting first ones are demonstrated.

Keywords: Boundary collisions, Slow atoms, Energy transfer, Nanotubes, Graphene.

Зіткнення повільних атомів з краєм двовимірної гексагональної структури

А.С. Долгов, М.С. Чередниченко

Національний аерокосмічний університет, вул. Чкалова, 7, 61070 Харків, Україна

Розглядаються особливості зіткнень з атомами, які являють собою край гексагональної структури, коли напрям впливу співпадає з орієнтацією великих діагоналей гексагонів.

Показано, що розміщення атомів-мішеней, яке задається геометрією структури, визначає розподіл параметрів удару і передачі енергій, які суттєво відрізняються від розподілу параметрів удару і передачі енергій при випадковому розміщенні об'єктів впливу. В рамках моделі твердих шарів був знайдений спектр відбитих атомів і вірогідності одноразових або багаторазових контактів зі структурою. Встановлене збільшення ефективності передачі енергії об'єкту в порівнянні з випадком непорядкованої структури. Показана можливість зіткнень з атомами другого прошарку, оминаючи перший, і визначаються умови реалізації таких взаємодій.

Ключові слова: Зіткнення, Повільні атоми, Границя структури, Передача енергії, Нанотрубки, Графен.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. S. Bubin, B. Wang, S. Pantelides, K. Varga, *Phys. Rev. B* **85**, 235435 (2012).
2. И.К. Гайнуллин, *Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования* № 2, 28 (2012).
3. Ю.А. Косевич, *УФН* **178** № 8, 884 (2008) (Yu.A. Kosevich, *Phys. Usp.* **51**, 848 (2008)).
4. В.В. Евстифеев, А.М. Костина, И.А. Егоров, *Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные* № 8, 21 (2012).
5. Ю.Е. Лозовик, А.М. Попов, *УФН* **177** № 7, 786 (2007) (Yu.E. Lozovik, A.M. Popov, *Phys. Usp.* **50** 749 (2007)).
6. D.W. Boukhvalov, M.I. Katsnelson, A.I. Lichtenstein, *Phys. Rev. B* **77**, 035427 (2008).
7. L. Han, T. Adam, Zhen Zhu, D. Tomanek, D. Ye Peide, *ACS Nano* **8**, 4033 (2014).
8. J.D. Bernal, J. Mason, *Nature* **188**, 910 (1990).