

СТРОЕНИЕ И СВОЙСТВА НАНОРАЗМЕРНЫХ И МЕЗОСКОПИЧЕСКИХ МАТЕРИАЛОВ

PACS numbers: 34.20.-b, 36.40.Mr, 36.40.Qv, 61.46.Bc, 61.80.Az, 61.82.Bg, 68.49.Sf

Моделирование столкновительной стадии эволюции двудольных биметаллических кластеров под действием димеров аргона низких энергий

Д. В. Широкопад, Г. В. Корнич

*Запорожский национальный технический университет,
ул. Жуковского, 64,
69063 Запорожье, Украина*

Выполнено молекулярно-динамическое моделирование бомбардировки биметаллических кластеров Cu–Au и Ni–Al, состоящих из 390 атомов, частицами Ar и Ar₂ с начальными энергиями от 1 эВ до 1,4 кэВ. Для формирования исходных двудольных кластеров были использованы по два однокомпонентных кластера соответствующих элементов, состоящих из 195 атомов. Для каждой начальной энергии было выполнено по 2000 компьютерных экспериментов со временем моделирования 5 пс и различными начальными координатами частиц аргона. Моделирование проводилось в рамках классической молекулярной динамики с использованием потенциала Аккланда для описания взаимодействия между атомами металла, потенциала ZBL — для взаимодействия типа металл–аргон, HFD-V3 — для взаимодействия аргон–аргон. Исследовались изменения потенциальной энергии и температура биметаллических кластеров. Получена качественно иная форма кривых зависимостей потенциальной энергии и температуры биметаллического кластера от энергии налетающей частицы при бомбардировке димером аргона по сравнению с единичными атомами аргона в области низких энергий. Вычислены выходы распыления и их составы, а также число перемещений атомов через границу раздела

Corresponding author: Dmytro Viktorovych Shyrokopad
E-mail: slejpnir@zntu.edu.ua

*Zaporizhzhya National Technical University,
64 Zhukovsky Str., 69063 Zaporizhzhya, Ukraine*

Please cite this article as: D. V. Shyrokopad and G. V. Kornich, Simulation of Collision Stage of Evolution of Bipartite Bimetal Clusters under Impact of Low-Energy Argon Dimers, *Metallofiz. Noveishie Tekhnol.*, **39**, No. 2: 163–175 (2017) (in Russian), DOI: 10.15407/mfint.39.02.0163.

между монокомпонентными долями кластера в результате инициируемых бомбардирующими частицами столкновительных процессов. Показано значительное увеличение выходов распыления, в том числе и в составе многоатомных структур, всех компонентов мишени с увеличением размера налетающей частицы.

Ключевые слова: молекулярная динамика, потенциал Аккланда, теплота перемешивания, атомный кластер, ионная бомбардировка.

The molecular dynamics simulation of the bombardment of bimetal Cu–Au and Ni–Al clusters consisting of 390 atoms by Ar and Ar₂ particles with initial energies from 1 eV to 1.4 keV is performed. To form the initial bipartite clusters, two monocomponent clusters of relevant elements consisting of 195 atoms are used. 2000 computer experiments during 5 ps of simulation time with different initial coordinates of argon particles are carried out for each value of the initial energy. The simulation is performed within the framework of the classical molecular dynamics using Ackland potential to describe the interaction between the metal atoms, ZBL potential—for the metal–argon-type interaction, and HFD-B3 potential—for the argon–argon-type interaction. The change of the potential energy and the temperature of the bimetal clusters are investigated. In the case of bombardment with argon dimers, in comparison with bombardment by single argon atoms with low energies, the qualitative difference in form of the dependences of potential energy and temperature of the bimetal clusters on the energy of the incident particle is shown. The sputtering yields and their compositions as well as the number of displacements of atoms across the interface between monocomponent parts of the cluster initiated by bombarding particle collision processes are calculated. The significant increase in sputtering yields and in the number of sputtered polyatomic structures with the increase of the incident-ions' size is shown.

Key words: molecular dynamics, Ackland potential, heat of mixing, atomic clusters, ion bombardment.

Виконано молекулярно-динамічне моделювання бомбування біметалевих кластерів Cu–Au і Ni–Al, що складаються з 390 атомів, частинками Ar і Ar₂ з початковими енергіями від 1 еВ до 1,4 кеВ. Для формування вихідних дводольних кластерів були використані по два однокомпонентних кластера відповідних елементів, що складаються зі 195 атомів. Для кожної початкової енергії було виконано по 2000 комп'ютерних експериментів з часом моделювання у 5 пс і різними початковими координатами частинок Аргону. Моделювання проводилося в рамках класичної молекулярної динаміки з використанням Аккландового потенціалу для опису взаємодії між атомами металу, потенціалу ZBL — для взаємодії типу метал–Аргон, HFD-B3 — для взаємодії Аргон–Аргон. Досліджувалися зміни потенціальної енергії та температура біметалевих кластерів. Одержано якісно іншу форму кривих залежностей потенціальної енергії та температури біметалевого кластера від енергії налітної частинки при бомбардуванні димером Аргону в порівнянні з поодинокими атомами Аргону в області низьких енергій. Обчислено виходи розпорошення та їхні склади, а також

число переміщень атомів через роздільчу межу між монокомпонентними частинами кластера в результаті ініційованих бомбівними частинками процесів зіткнень. Показано значне збільшення виходів розпорощення, в тому числі й у складі багатоатомових структур, всіх компонентів цілі зі збільшенням розміру налітної частинки.

Ключові слова: молекулярна динаміка, Акландів потенціал, теплота перемішування, атомовий кластер, йонне бомбування.

(Получено 14 июля 2016 г.)

1. ВВЕДЕНИЕ

Наноматериалы являются одной из наиболее исследуемых областей в последние десятилетия [1]. При этом металлические кластеры представляют особый интерес как для фундаментальных научных исследований [2, 3], так и для непосредственного технологического применения [4, 5]. Объектами изучения являются электрические, оптические, магнитные и химические свойства, которые значительно отличаются от свойств соответствующего объёмного вещества и резко меняются при незначительных изменениях размеров кластера [6]. Особый интерес представляют двухкомпонентные кластеры, которые имеют широкий спектр применения: от квантовых точек [7] до элементов солнечных батарей [8] и катализа [9]. В этом ряду находятся работы, посвящённые исследованию атомной структуры, формы и сегрегационных свойств кластеров, состоящих из пар компонентов Cu–Au и Ni–Al. Нанокластеры Cu–Au имеют практическое значение в молекулярной электронике, оптике, зондировании, фармацевтике и биомаркировке [10]. Никельалюминиевые сплавы благодаря уникальным физическим и механическим свойствам в области высоких температур и эффекту памяти формы находят широкое применение в передовых технологиях создания новых материалов [11, 12]. Изучение подобных биметаллических кластеров представляет интерес также в связи с особенностью некоторых пар металлов проявлять отличную от объёмного вещества тенденцию к взаимному перемешиванию [13].

Для исследования атомных кластеров применяются различные теоретические и экспериментальные подходы, в том числе и компьютерное моделирование методом классической молекулярной динамики (МД) [14, 15].

В существующих работах по изучению распыления кластеров под действием ионной бомбардировки [16–18] преимущественно рассматриваются однокомпонентные металлические кластеры и одноатомные налетающие ионы. Использование димеров в качестве бомбардирующих частиц приносит дополнительные механизмы распределения энергетических потерь и передачи импульса атомам

мишени.

В настоящей работе выполнено моделирование эволюции двудольных свободных биметаллических кластеров Ni–Al и Cu–Au, состоящих из 390 атомов, под действием бомбардировки мономерами и димерами аргона с энергиями от 1 эВ до 1,4 кэВ. Исследование является дальнейшим развитием работ [19, 20], в которых проводилось молекулярно-динамическое моделирование соответствующих кластеров под действием бомбардировки одноатомными ионами аргона. Использование двухатомных частиц позволяет добиться большей эффективности энергопередачи между налетающей частицей и мишенью, что, в свою очередь, способствует более активному развитию столкновительного каскада. Это даёт возможность получить большую интенсивность массопереноса атомов компонентов и значительно больший выход распыления в биметаллическом кластере по сравнению с бомбардировкой одноатомными частицами при тех же энергиях.

2. МОДЕЛЬ

Ранее полученные однокомпонентные кластеры, имевшие ГЦК-структуру и форму неидеальных усечённых октаэдров с шестиугольными {111} и квадратными {100} гранями (путём релаксации начального образца металла в форме неидеального параллелепипеда, с непрерывной диссипацией энергии за счёт сокращения свободной поверхности), состояли из 195 атомов и размещались случайным образом на расстоянии 2 \AA между их ближайшими поверхностными атомами. Под действием сил межатомного взаимодействия они сливались и релаксировали в течение 150 пс с диссипацией избыточной кинетической энергии, образуя единый устойчивый двудольный кластер, состоящий из двух однокомпонентных долей с небольшим взаимным проникновением атомов на границе раздела между долями. В результате были получены два двудольных биметаллических кластера, состоящие из 390 атомов для каждой пары элементов.

Бомбардировка проводилась частицами Ar_n ($n = 1, 2$) с энергиями от 1 эВ до 1,4 кэВ. В начальный момент времени каждого испытания частица Ar_n находилась в случайной точке пространства на расстоянии 6–7 \AA от поверхности исходной мишени. Вектор скорости всех налетающих атомов был одинаков по модулю и ориентирован параллельно вектору, направленному из центра масс частицы Ar_n в центр масс кластера $\text{Cu}_{195}\text{Au}_{195}$ или $\text{Ni}_{195}\text{Al}_{195}$. Для каждой начальной энергии проводилось по 2000 независимых испытаний. Длительность моделирования физических процессов составляла 5 пс, что позволяло рассмотреть стадию каскадов и отдачи при столкновениях и начальный этап развития термической стадии.

Моделирование проводилось в рамках метода МД, согласно кото-

рому динамика механической системы из N частиц может описываться системой уравнений движения Ньютона:

$$m_i \frac{d^2 \mathbf{r}_i}{dt^2} = \mathbf{F}_i(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N), \quad i = 1, \dots, N, \quad (1)$$

где m_i — масса частицы, \mathbf{r}_i — координата частицы. Сила \mathbf{F}_i определяется соотношением

$$\mathbf{F}_i(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N) = -\partial E(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N) / \partial \mathbf{r}_i, \quad (2)$$

где функция суммарной потенциальной энергии E обуславливает свойства исследуемой системы и может задаваться, исходя из различных теоретических и эмпирических моделей [21]. Для описания взаимодействия между атомами металла был выбран многочастичный потенциал Акланда, который представляет собой одну из реализаций модели Финниса–Синклера [22]. Согласно этим представлениям суммарная энергия системы, состоящей из N атомов, записывается в виде:

$$E = \sum_{i=1}^N \left(\sum_{j \neq i} V_{S_i S_j}(R_{ij}) / 2 - \sqrt{\rho_{S_i}} \right), \quad (3)$$

где

$$\rho_{S_i} = \sum_{j \neq i} \Phi_{S_i S_j}(R_{ij}). \quad (4)$$

Для бинарных систем Cu–Au, Ni–Al функции V_{CuCu} , V_{AuAu} , V_{CuAu} , Φ_{CuCu} , Φ_{AuAu} , Φ_{CuAu} определяются следующим образом:

$$V_{\text{AA}}(R_{ij}) = \sum_{k=1}^6 \alpha_k^{\text{AA}} H(r_k^{\text{AA}} - R_{ij})(r_k^{\text{AA}} - R_{ij})^3, \quad (5)$$

$$V_{\text{AB}}(R_{ij}) = \sum_{k=1}^3 \alpha_k^{\text{AB}} H(r_k^{\text{AB}} - R_{ij})(r_k^{\text{AB}} - R_{ij})^3, \quad (6)$$

$$\Phi_{\text{AA}}(R_{ij}) = \sum_{k=1}^2 A_k^{\text{AA}} H(R_k^{\text{AA}} - R_{ij})(R_k^{\text{AA}} - R_{ij})^3, \quad (7)$$

$$\Phi_{\text{AB}}(R_{ij}) = \sqrt{\Phi_{\text{AA}}(R_{ij})\Phi_{\text{BB}}(R_{ij})}, \quad (8)$$

где R_{ij} — расстояние между i -м и j -м атомами, α_k , A_k , r_k , R_k — известные параметры [23].

Для описания взаимодействия между атомами на расстоянии меньше 1,2–1,4 Å слагаемое $V_{S_i S_j}$ заменяется отталкивательным потенциалом Борна–Майера [24]:

$$V(R_{ij}) = A_{\text{BM}} e^{-R_{ij}/a_{\text{BM}}}. \quad (9)$$

Связь двух потенциалов осуществляется полиномом третьей степени, коэффициенты которого выбираются из условий гладкости функции парного взаимодействия.

Взаимодействие между атомами Ar описывается потенциалом HFD-B3 [25]:

$$V(r) = \varepsilon V^*(x), \quad (10)$$

где

$$V^*(x) = A^* \exp(-\alpha^* x + \beta^* x^2) - F(x) \sum_{j=0}^2 c_{2j+6} / x^{2j+6}, \quad (11)$$

$$F(x) = \begin{cases} \exp(-(D/x - 1)^2), & x < D, \\ 1, & x \geq D. \end{cases} \quad (12)$$

Здесь $x = r/r_m$, $r_m = 3,761 \text{ \AA}$, ε , c_i , A^* , α^* , β^* , D — известные параметры. На малых расстояниях между атомами потенциал HFD-B3 заменяется потенциалом Борна–Майера.

Для описания взаимодействия между атомами аргона и каждого из металлов использовался универсальный потенциал Зиглера–Бирзака–Литтмарка (ZBL) [26].

Интегрирование уравнений движения выполнялось по методу Верле, который обеспечивает оптимальное для данных условий моделирования соотношение скорости счёта, точности и устойчивости:

$$x(t + \Delta t) = 2x(t) - x(t - \Delta t) + a(t)\Delta t^2, \quad (13)$$

где Δt — шаг интегрирования, не превышающий 0,5 фс.

3. РЕЗУЛЬТАТЫ И ОБСУЖДЕНИЕ

На рисунке 1 показана относительная потенциальная энергия биметаллических кластеров, которая установилась по истечении 5 пс, в зависимости от начальной энергии и размера налетающей частицы аргона (здесь и далее косая черта на оси абсцисс означает точку изменения масштаба). Потенциальная энергия нормирована на модуль начальной потенциальной энергии мишени. При бомбардировке димерами аргона по сравнению с мономерами наблюдается преимущественный рост потенциальной энергии в зависимости от энергии налетающей частицы, начиная с 60 эВ и больше. Большие значения потенциальной энергии в случае бомбардировки димерами аргона связаны с большей степенью структурных нарушений и интенсивностью дефектообразования в мо-

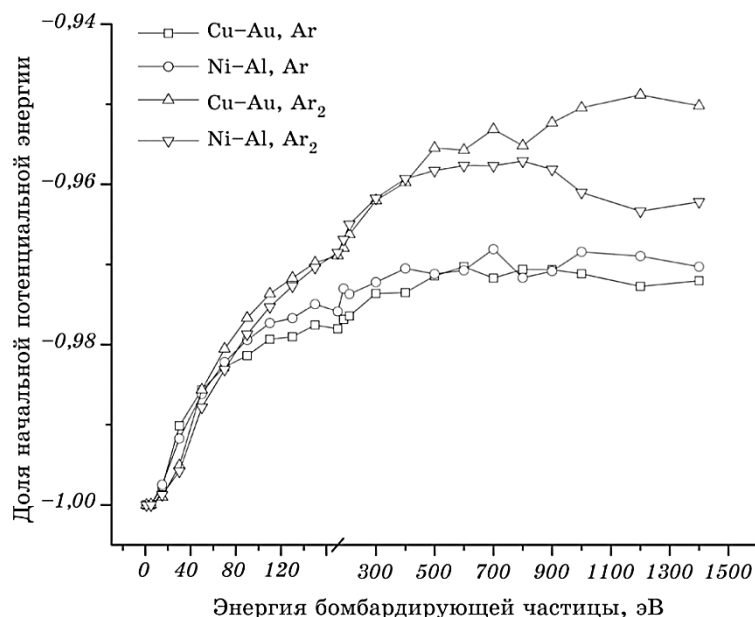


Рис. 1. Зависимость потенциальной энергии бинарного кластера от энергии и размера бомбардирующей частицы.

Fig. 1. The dependence of the potential energy of the binary cluster on the energy and the size of the bombarding particles.

нокомпонентных долях, что ведёт к увеличению средних расстояний между атомами, а также с процессом распыления.

При энергии бомбардировки до 60 эВ потенциальная энергия мишени ниже при бомбардировке частицами Ar, чем при бомбардировке Ar₂. Это объясняется относительно низкой энергией частиц аргона в расчёте на один атом в случае бомбардировки димерами. При этом уменьшается глубина проникновения атомов аргона в металлический кластер и, соответственно, инициирование столкновительных процессов происходит преимущественно в приповерхностном слое кластера-мишени. Это приводит к меньшей деформации атомной структуры и меньшему изменению потенциальной энергии кластера-мишени. При этом в случае бомбардировки с низкими энергиями большая часть передаваемой мишени энергии идёт на её поступательное движение, как целой частицы.

На рисунке 2 показана зависимость температуры биметаллического кластера, установившейся после 5 пс эволюции системы, от энергии и размера налетающей частицы аргона. Температура кластера Ni-Al превышает температуру кластера Cu-Au во всех моделируемых экспериментах. Этому способствует большая эффективность передачи энергии от атомов Ar атомам обоих металлов при

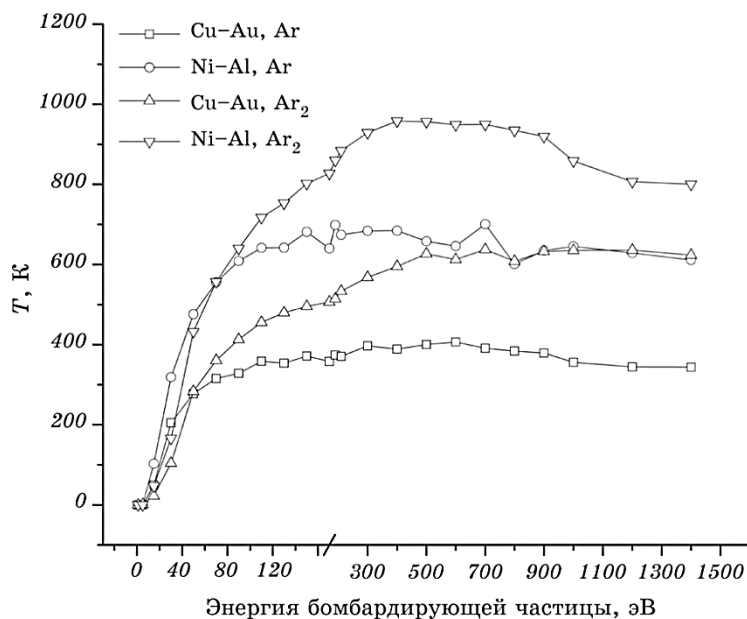


Рис. 2. Зависимость температуры бинарного кластера от энергии и размера бомбардирующей частицы.

Fig. 2. The temperature dependence of the binary cluster on the energy and the size of the bombarding particles.

первичных столкновениях, а также меньшая теплота перемешивания для пары Ni-Al. Более высокая температура при бомбардировке димерами аргона по сравнению с мономерами при энергиях 60 эВ и выше вызвана в конечном итоге большим временем взаимодействия атомов аргона, имеющих меньшие энергии в случае димера, с кластером-мишенью, что обеспечивает больше возможностей для передачи энергии. При энергиях меньше 60 эВ наблюдается картина, аналогичная поведению потенциальной энергии на рис. 1.

Также в процессе моделирования детектировались распылённые атомы монокомпонентных частей биметаллических кластеров (рис. 3). Видно, что выходы распыления больше при бомбардировке димерами Ar₂ по сравнению с бомбардировкой мономерами Ar для всех компонентов мишени при высоких энергиях, что качественно согласуется с синергетическим эффектом, полученным в [27] для случая бомбардировки поверхностных кластеров меди одноименными двухатомными частицами по сравнению с одноатомными. В области до 60 эВ вследствие малых энергий в расчёте на один атом аргона в димере количество энергии, передаваемой атомам металлического кластера, в большинстве случаев недостаточно для иницирования атомных цепочек замещения или разворота импульса.

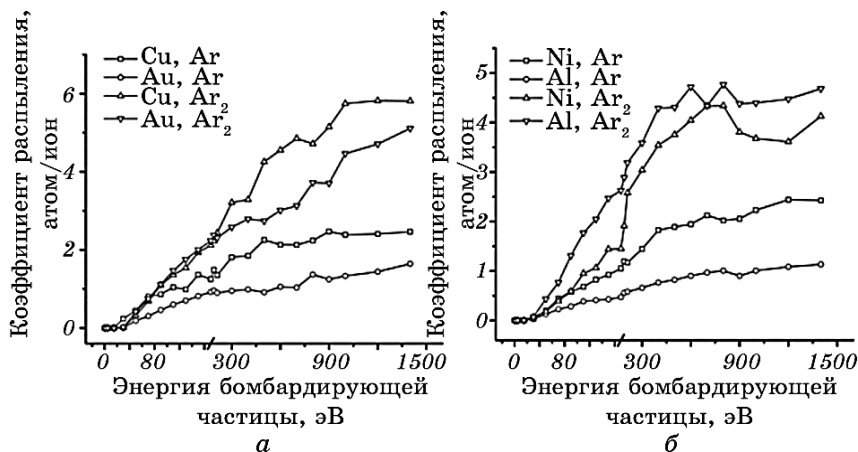


Рис. 3. Выходы распыления монокомпонентных частей кластера Cu–Au (а) и Ni–Al (б) для различных энергий и размеров бомбардирующих частиц аргона.

Fig. 3. The sputtering yields of monocomponent parts of Cu–Au cluster (a) and Ni–Al one (b) for various sizes and energies of bombarding argon particles.

Этим объясняются меньшие коэффициенты распыления компоненты Cu биметаллического кластера Cu–Au при бомбардировке димерами Ar₂ по сравнению с мономерами Ar при предельно низких начальных энергиях вблизи порога распыления около 30 эВ, как видно на рис. 3, а. Подобная зависимость в случае кластера Ni–Al для компонента Ni выглядит гораздо слабее и едва заметна на рис. 3, б. Однако, в кластере Ni–Al наблюдается другой значительный эффект, а именно, изменение преимущественно распыляемого компонента: Ni — в случае бомбардировки мономерами Ar и Al — в случае использования димеров Ar₂.

Преобладание атомов Cu над атомами Au в распылённом материале при всех условиях бомбардировки, как видно из рис. 3, а, определяется большей эффективностью передачи энергии атомам Cu от атомов Ar, что соответствует результатам, полученным для макроскопических образцов [28]. Для кластера Ni–Al при бомбардировке мономерами Ar количество распылённых атомов Ni превышает количество распылённых атомов Al. В работе [29] аналогичный эффект при бомбардировке плоских поверхностей объясняется более прозрачной атомной структурой алюминиевой мишени, через которую единичный атом аргона проходит с меньшими потерями энергии на большую глубину. В данном случае, проходя через алюминиевую часть кластера, атом аргона имеет возможность более интенсивно взаимодействовать с никелевой частью. При бомбардировке димерами Ar₂ энергии в расчёте на один атом аргона может быть недостаточно для проникновения бомбардирующих частиц

через структуру Al и последующего взаимодействия с никелевой частью. При достаточно больших энергиях бомбардирующий димер создаёт в алюминиевой части искажения решётки, которые так же препятствуют прохождению атомов аргона с малыми потерями энергии. Кроме того, большая эффективность передачи энергии металлическому кластеру в случае димера Ar_2 на фоне меньшей теплоты перемешивания приводит к более высокой температуре кластера Ni–Al. Соответственно, алюминиевая компонента мишени подвержена более активному разрушению атомной структуры и увеличению количества расплывших атомов (см. рис. 3, б), что согласуется также с меньшей энергией связи для поверхностных атомов Al по сравнению с атомами Ni. Также стоит отметить, что распыление происходит преимущественно из поверхностного слоя биметаллических кластеров, что соответствует представлениям теории распыления [30].

На рисунке 4 показано количество расплывших мономеров, димеров и тримеров в случае бинарного кластера Cu–Au, усреднённое по числу испытаний. Видно, что в расплывших частицах преобладают единичные атомы металлов. При этом вклад димеров Cu_2 существенно превышает вклад Au_2 . При увеличении размера бомбардирующей частицы увеличивается и количество расплывших многоатомных структур. Частично, это является следствием более высокой температуры металлического кластера, что понижает энергетический порог распыления. Кроме того, при бомбардировке димерами повышается вероятность придания двум и более соседним атомам мишени достаточных по величине и близких по направлению компонент импульса, что приводит к одновременному распылению этих атомов в составе многоатомной структуры. В случае

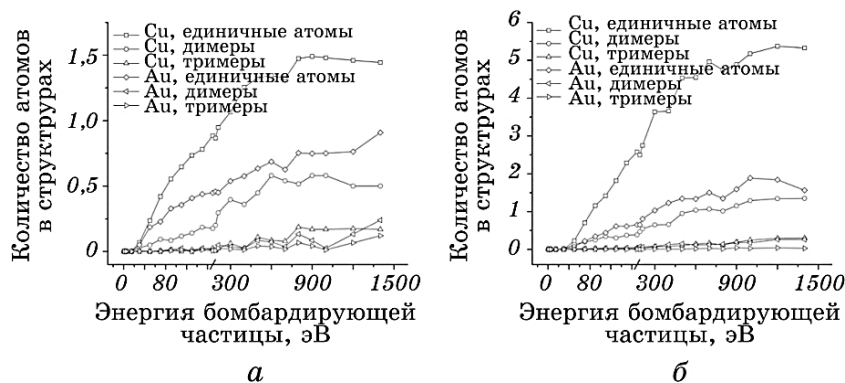


Рис. 4. Число атомов в многоатомных фрагментах расплывшего материала для кластера Cu–Au при различных энергиях бомбардировки: Ar (а), Ar₂ (б).

Fig. 4. The number of atoms in polyatomic fragments in the sputtered material for Cu–Au cluster for different bombarding energies of Ar (a) and Ar₂ (b).

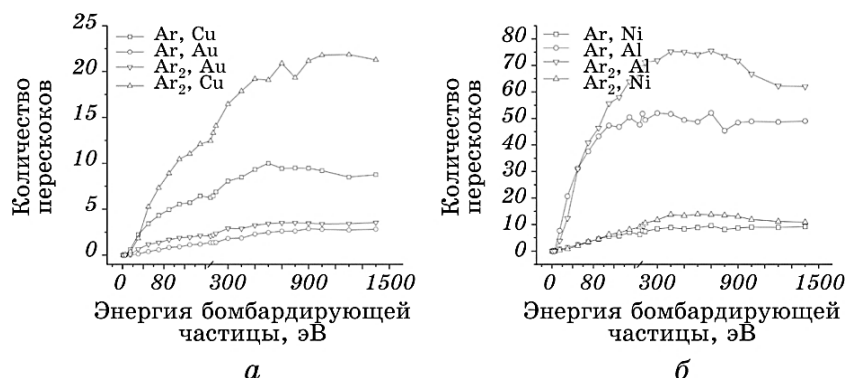


Рис. 5. Зависимость количества перескоков атомов Cu–Au (а), Ni–Al (б) через границу раздела монокомпонентных долей в металлическом кластере от энергии и размера бомбардирующей частицы аргона.

Fig. 5. The dependence of the number of atom jumps through the interface of the monocomponent parts in the metal cluster on the energy and the size of the bombarding argon particles: Cu–Au (a), Ni–Al (б).

кластера Ni–Al также наблюдается увеличение количества димеров в расплывлённом материале. При этом преобладают димеры алюминия.

На рисунке 5 показано количество перемещений атомов металла из соответствующей доли металлического кластера в другую во время столкновительного процесса. Большее количество перескоков через границу раздела монокомпонентных долей для кластера Ni–Al связано с меньшей теплотой перемешивания для этой пары металлов по сравнению с парой Cu–Au, а также с наличием лёгких атомов Al, которые в условиях столкновительных последовательностей являются в большей степени динамически подвижными по сравнению с тяжёлыми атомами Au. Стоит отметить, что для Cu и Ni, каждый из которых обладает меньшей постоянной решётки в соответствующем биметаллическом кластере, наблюдается преобладание перескоков внутренних атомов, в то время как для Au и Al большее количество перескоков совершается поверхностными атомами. Определяющую роль в возникновении подобной зависимости играют большие геометрические размеры алюминиевой и золотой частей кластера в плоскости раздела долей двухкомпонентного кластера, что способствует перемещению атомов Au на поверхность доли Cu и атомов Al на поверхность доли Ni.

4. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Выполнено молекулярно-динамическое моделирование эволюции двудольных биметаллических кластеров Cu–Au и Ni–Al в течение

5 пс под действием бомбардировки частицами Ar и Ar₂ с начальными энергиями от 1 эВ до 1,4 кэВ. Увеличение размера бомбардирующей частицы повышает эффективность энергоотдачи бомбардирующей частицы и позволяет инициировать более интенсивные процессы перемешивания в биметаллических кластерах. Более высокие значения температуры для кластера Ni–Al, а также большая интенсивность перемещений его атомов согласуются с меньшей теплотой перемешивания для этой пары элементов. Низкие значения энергии в расчёте на один атом бомбардирующей частицы в димере аргона по сравнению с единичным атомом аргона приводят к качественным различиям кривых потенциальной энергии и температуры в области низких энергий бомбардировки. Значения коэффициентов распыления для всех компонентов исходных биметаллических кластеров возрастают с увеличением размера бомбардирующей частицы. При этом в распылённом материале возрастает составляющая многоатомных структур.

Работа выполнена с использованием ресурсов суперкомпьютерного комплекса МГУ имени М. В. Ломоносова.

ЦИТИРОВАННАЯ ЛИТЕРАТУРА—REFERENCES

1. L. Zhang and E. Wang, *Nano Today*, **9**, No. 1: 132 (2014).
2. T. Tsukuda and H. Hakkinen, *Protected Metal Clusters: From Fundamentals to Applications* (Amsterdam: Elsevier: 2015).
3. *Metal Clusters at Surfaces. Structure, Quantum Properties, Physical Chemistry* (Ed. K.-H. Meiwes-Broer) (Berlin–Heidelberg: Springer-Verlag: 2000).
4. S. Guo and E. Wang, *Nano Today*, **6**, No. 3: 240 (2011).
5. A. Mathew and T. Pradeep, *Part. Part. Syst. Charact.*, **31**, No. 10: 1017 (2014).
6. *Physics and Chemistry of Metal Cluster Compounds* (Ed. L. J. De Jongh) (Dordrecht: Springer: 1994).
7. V. Biju, Y. Makita, A. Sonoda, H. Yokoyama, Y. Baba, and M. Ishikawa, *J. Phys. Chem. B*, **109**, No. 29: 13899 (2005).
8. M. Westphalen, U. Kreibitz, J. Rostalski, H. Luth, and D. Meissner, *Sol. Energy Mater. Sol. Cells*, **61**, No. 1: 97 (2000).
9. Z. A. Qiao, P. Zhang, S. H. Chai, M. Chi, G. M. Veith, N. C. Gallego, M. Kidder, and S. Dai, *J. Am. Chem. Soc.*, **136**, No. 32: 11260 (2014).
10. S. Malola, M. J. Hartmann, and H. Häkkinen, *J. Phys. Chem. Lett.*, **6**, No. 3: 515 (2015).
11. M. D. Deshpande, R. Pandey, M. A. Blanco, and A. Khalkar, *J. Nanoparticle Res.*, **12**, No. 4: 1129 (2010).
12. A. N. Mansour, A. Dmitrienko, A. V. Soldatov, and T. Ni, *Phys. Rev. B*, **55**, No. 23: 15531 (1997).
13. R. Ferrando, J. Jellinek, and R. L. Johnston, *Chem. Rev.*, **108**, No. 3: 845 (2008).
14. S. K. Mudedla, E. R. Azhagiya Singam, K. Balamurugan, and V. Subramanian, *Phys. Chem. Chem. Phys.*, **17**, No. 45: 30307 (2015).
15. H. Akbarzadeh, M. Abbaspour, S. Salemi, and M. Abroodi, *Phys. Chem. Chem.*

- Phys.*, **17**, No. 19: 12747 (2015).
16. R. Kissel and H. M. Urbassek, *Nucl. Instruments Methods Phys. Res. Sect. B: Beam Interact. Mater. Atoms*, **180**, Nos. 1–4: 293 (2001).
 17. T. T. Järvi, J. A. Pakarinen, A. Kuronen, and K. Nordlund, *Europhys. Lett.*, **82**, No. 2: 26002 (2008).
 18. L. Sandoval and H. M. Urbassek, *Nanoscale Res. Lett.*, **10**, No. 1: 314 (2015).
 19. D. V. Shyrokorad, G. V. Kornich, and S. G. Buga, *Fiz. Tverd. Tela*, **58**, No. 2: 377 (2016) (in Russian).
 20. D. V. Shyrokorad and G. V. Kornich, *Fiz. Tverd. Tela*, **56**, No. 12: 2475 (2014) (in Russian).
 21. G. E. Norman and V. V. Stegaylov, *Visnyk Kharkivs'kogo Natsional'nogo Universytetu*, **870**, No. 17 (40): 11 (2009) (in Russian).
 22. G. J. Ackland and V. Vitek, *Phys. Rev. B*, **41**, No. 15: 10324 (1990).
 23. M. Yan, M. Šob, D. Luzzi, V. Vitek, G. J. Ackland, M. Methfessel, and C. Rodriguez, *Phys. Rev. B*, **47**, No. 10: 5571 (1993).
 24. W. Eckstein, *Computer Simulation of Ion–Solid Interactions* (Berlin–Heidelberg: Springer: 2011).
 25. R. A. Aziz and M. J. Slaman, *J. Chem. Phys.*, **92**, No. 2: 1030 (1990).
 26. J. F. Ziegler, M. D. Ziegler, and J. P. Biersack, *Nucl. Instruments Methods Phys. Res. Sect. B: Beam Interact. Mater. Atoms*, **268**, Nos. 11–12: 1818 (2010).
 27. G. V. Kornich, G. Betz, V. G. Kornich, V. I. Shulga, and O. A. Yermolenko, *Nucl. Instr. Meth. Phys. Res. Sect. B: Beam Interact. Mater. Atoms*, **269**, No. 14: 1600 (2011).
 28. *Sputtering by Particle Bombardment* (Eds. R. Behrisch and W. Eckstein) (Berlin–Heidelberg: Springer: 2007).
 29. G. V. Kornich and G. Betz, *Nucl. Instruments Methods Phys. Res. Sect. B: Beam Interact. Mater. Atoms*, **143**, No. 4: 455 (1998).
 30. P. Sigmund, *Phys. Rev.*, **184**, No. 2: 383 (1969).