КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЯ ПРОЦЕССА РАСПЫЛЕНИЯ ИОНИЗИРОВАННOЙ ПЛЁНКИ,

ПОКРЫТОЙ НА ПОВЕРХНОСТЬ Au(111) ПРИ

БОМБАРДИРОВКЕ ИОНАМИ Ar+

У.О.Кутлиев\*), К.У.Отабаева, Д.У.Худойназарова

Ургенческий госуниверситет,Ургенч,Узбекистан

\*) e-mail: uchkun@mail.ru

Приведены результаты исследования процесса распыления пленки воды, в составе которой существует адсорбированный ион Na+. Этот процесс представляет собой весьма интересный механизм распыления молекул воды и атомов золота в виде тяжелых кластеров. Ион натрия, расположенный внутри пленки, образует ионные связи с её молекулами. Эти связи в первую очередь зависят от заряда иона, т.е. если ион положительный, то вокруг него скапливаются отрицательные компоненты молекул, или наоборот. В наших расчетах был рассмотрен случай, когда ион Na+ находится в верхней части пленки, состоящей из четырех слоёв льда на поверхности Au(111), которая состоит из 1980 атомов, расположенных в девяти слоях. Система была сбалансирована в течение 25 пикосекунд, причём внешние воздействия в данном случае не учитывались. Это время достаточно для того, чтобы ион приблизился к поверхности пленки и образовал ионные связи с атомами кислорода. В течение данного времени ион натрия полностью располагался в первом верхнем слое пленки. Визуально изучено распыление поверхности Au(111), покрытой ионизированной пленкой воды, при бомбардировке ионами Ar+ с начальной энергией Ео=700 эВ. Процесс взаимодействия мишени с падающей частицей продолжался в течение времени t=5пикосекунд. При бомбардировке этой поверхности наряду с малыми кластерами воды образуется ионный кластер воды, состоящих из иона Na+ и 45-65 молекул воды. Следует отметить, что этот большой сферический кластер не является устойчивым. Наши расчеты показали, что молекулы воды покидают ионный кластер при достижении времени столкновения порядка 3пикосекунд. В течение этого промежутка времени кластер становится более устойчивым.