МОДЕЛИРОВАНИЕ РАСПЫЛЕНИЯ W АТОМАМИ Ne МЕТОДОМ МОЛЕКУЛЯРНОЙ ДИНАМИКИ

Д.С. Мелузова, П.Ю. Бабенко, А.Н. Зиновьев

ФТИ им. А.Ф. Иоффе, Санкт-Петербург, Россия

Разработан код для моделирования распыления методом молекулярной динамики (MD). Для описания взаимодействия атомов твёрдого тела-вольфрама был использован многочастичный потенциал “EAM-4” из [1]. Взаимодействие между атомами Ne и W описывалось потенциалом, полученным в рамках теории функционала плотности [2]. Для описания структуры вольфрама была использована модель идеального аморфного тела [3]. Расстояние между частицами было выбрано равным 0.266 нм, что соответствует плотности W. Рассчитанные с помощью разработанного кода коэффициенты распыления Y находятся в хорошем согласии с экспериментом [4].

Рис.1 Зависимость коэффициента распыления Y от энергии налетающих частиц для Ne-W. Экспериментальные данные из работы [4].

1. Marinica M-C. et.al. //J.Phys.Cond.Matt. 2013 v.25 p.395502.

2. Meluzova D.S et.al. // NIMB 2019 v.460 p.4.

3. https://users.cecs.anu.edu.au/~u9300839/

4. Behrisch R., Eckstein W. Sputtering by Particle Bombardment. Berlin. Springer. 2007.