



Исследование механизмов фокусировки атомов, распыленных с поверхности грани (001) Ni ионами Ar низкой энергии

А.И. Мусин¹⁾, Г.В. Корнич²⁾, В.Н. Самойлов³⁾

¹⁾Московский государственный областной университет, Москва, Россия

²⁾Национальный университет «Запорожская Политехника», Запорожье, Украина

³⁾МГУ им. М.В. Ломоносова, Москва, Россия

В настоящей работе исследовано распыление грани Ni (100) ионами Ar с энергией 200 эВ с разрешением по углам и энергии. Расчеты проведены по молекулярно-динамической модели [1,2], которая позволяет задавать произвольную температуру мишени. Ранее данная модель успешно применялась для расчетов смещений атомов и каскадного перемешивания. В настоящей работе модель была модифицирована для рассмотрения распределений распыленных атомов с одновременным разрешением по энергии E , полярному ϑ и азимутальному φ углам. Было рассчитано падение около 300 тыс. ионов.

В работе рассчитан вклад собственных, фокусированных и перефокусированных распыленных атомов в общий коэффициент распыления кристалла при комнатной температуре образца (300 K). В угловом распределении распыленных атомов наблюдались максимумы эмиссии, которые по своей угловой ширине и направлениям формирования соответствовали наблюдаемым пятнам Венера (рис. 1 слева). Распределение распыленных атомов по начальному полярному углу ϑ_0 , рассчитанному при пересечении атомом условной плоскости на высоте 0.3 \AA над усредненной поверхностью кристалла, намного более широкое в сторону больших углов (рис. 1 справа), подобно результатам [3]. Отметим, что в этом распределении не наблюдается максимума в направлении $\vartheta_0 = 45^\circ$, который бы отвечал вкладу фокусонного механизма при преимущественном распространении каскадов столкновений, приводящих к распылению, пересекающих поверхность, в направлениях $\langle 110 \rangle$. Мы подтверждаем в настоящем исследовании, что распределение распыленных атомов по $1 - \cos \vartheta$ формируется в большей степени на стадии эмиссии атомов с поверхности за счет блокировки, то есть отклонения в направлении нормали к поверхности, атомов, вылетающих под углами $\vartheta_0 > \vartheta$, и дальнейшего притяжения эмитированных атомов к поверхности в процессе вылета.

Обнаружено, что при малых энергиях максимум полярного углового распределения распыленных атомов с увеличением энергии смещается в сторону нормали к поверхности, а при энергии выше $\sim 20 \text{ эВ}$ в сторону от нормали к поверхности (рис.2), подобно результатам [3].

При температуре мишени 0 K в двумерных распределениях распыленных атомов по энергии и полярному углу для несимметричных относительно направлений $\langle 001 \rangle$ интервалов угла φ отчетливо наблюдаются характерные хребты – максимумы распределений всех распыленных и перефокусированных атомов (рис.3). Эти распределения согласуются с распределениями, рассчитанными в [4].

Работа выполнена с использованием оборудования Центра коллективного пользования сверхвысокопроизводительными вычислительными ресурсами МГУ имени М.В. Ломоносова [5].

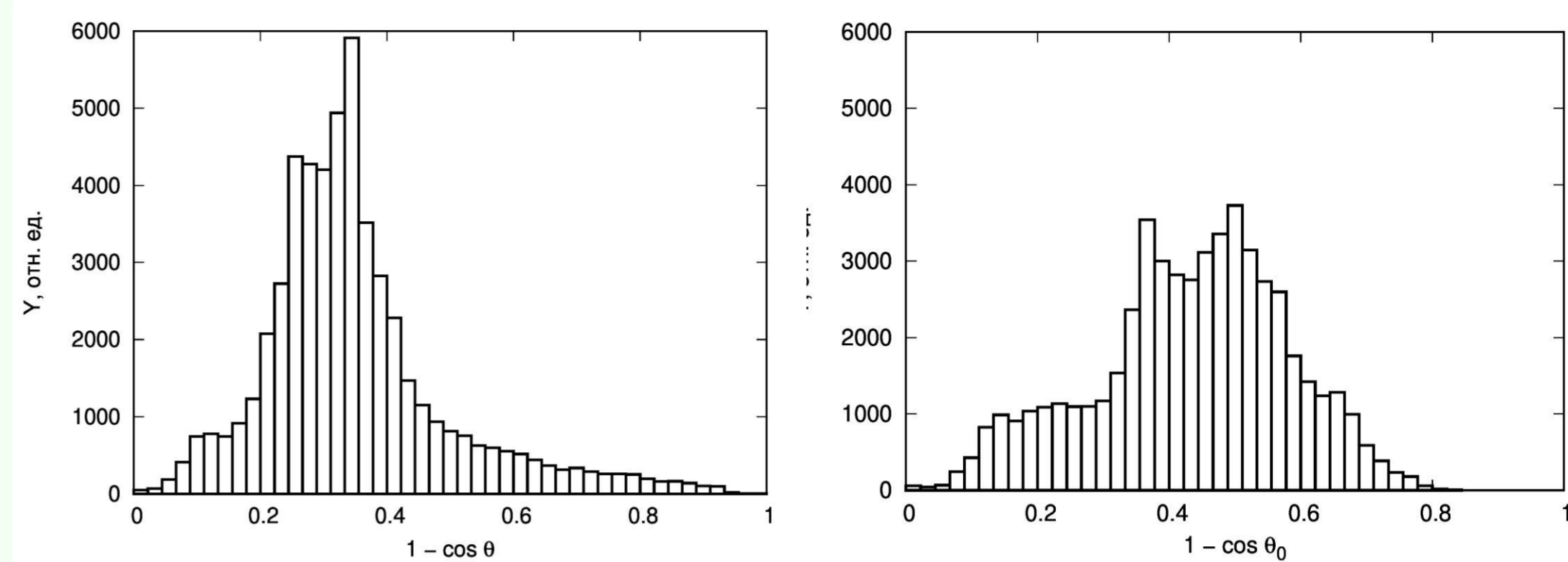


Рис. 1. Распределения распыленных атомов по $1 - \cos \vartheta$ (слева) и по $1 - \cos \vartheta_0$ (справа) для всех энергий E для интервала азимутальных углов $\varphi [88.5^\circ, 91.5^\circ]$ (в направлении $\langle 001 \rangle$).

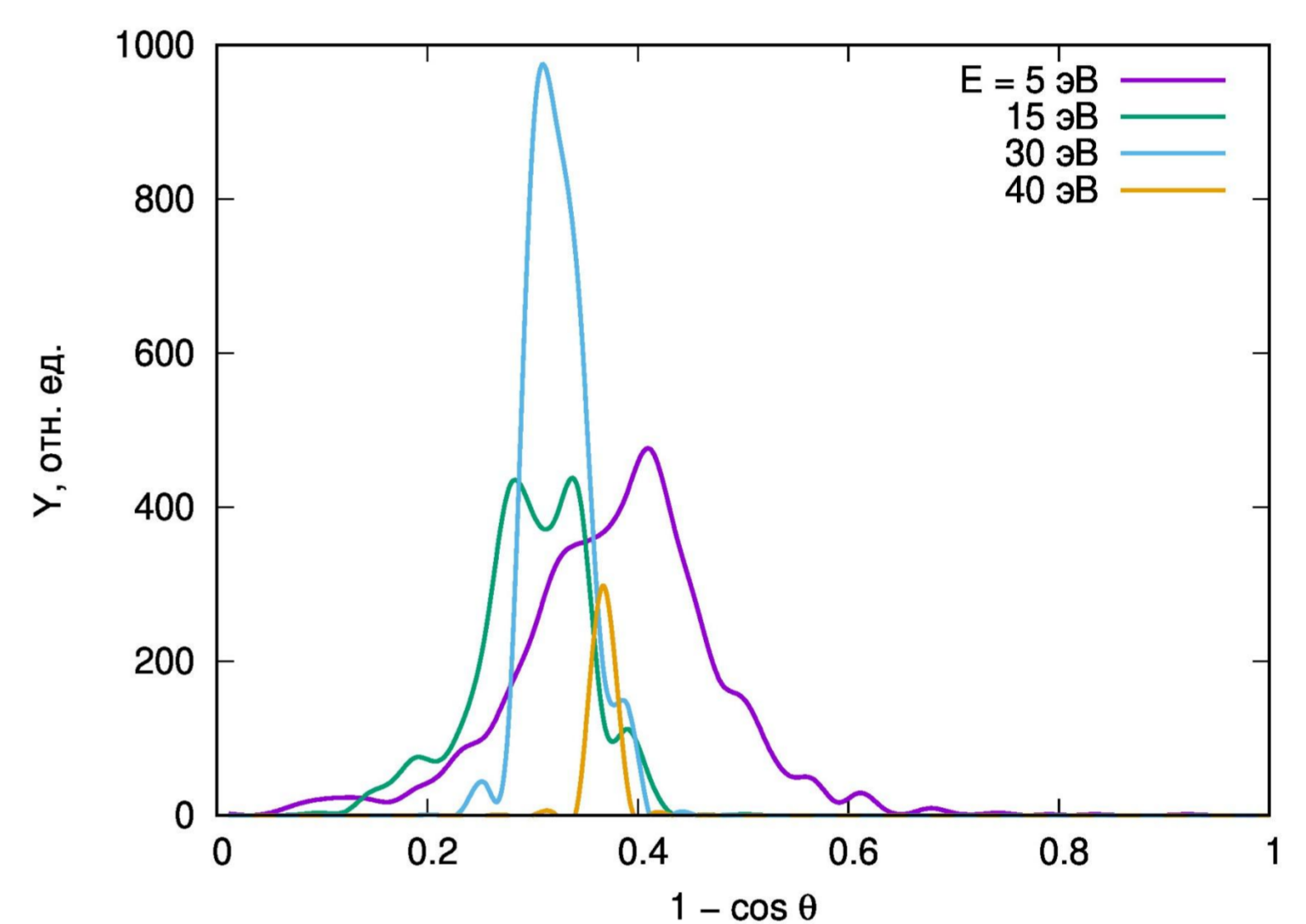


Рис. 2. Распределения распыленных атомов по $1 - \cos \vartheta$ для интервала азимутальных углов $\varphi [82.5^\circ, 97.5^\circ]$ (в направлении $\langle 001 \rangle$) для энергий $E = 5 \text{ эВ}, 15 \text{ эВ}, 30 \text{ эВ}$ и 40 эВ ($\pm 1 \text{ эВ}$). Отчетливо виден немонотонный сдвиг максимума распределения с ростом энергии распыленных атомов.

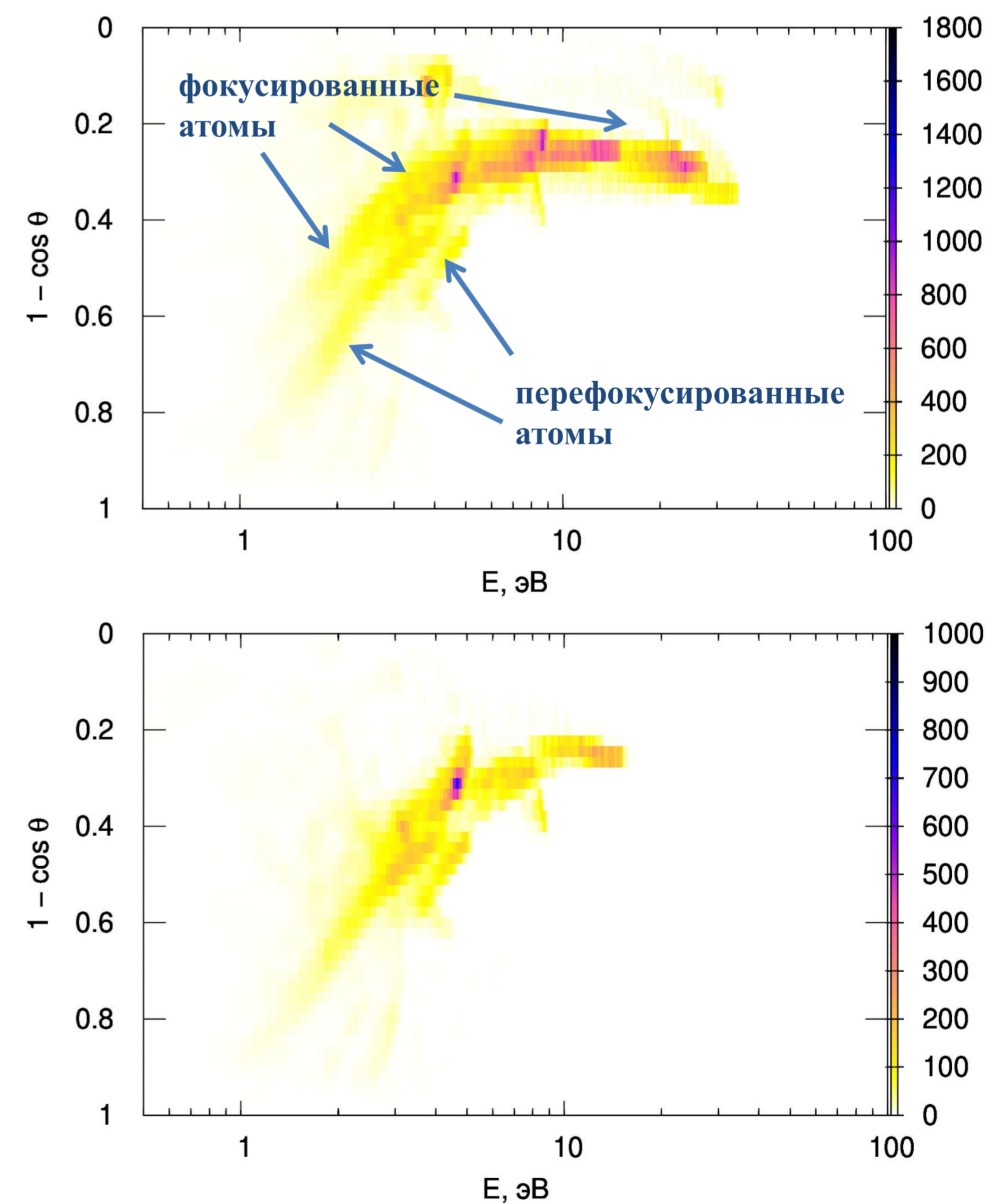


Рис. 3. Распределения распыленных атомов одновременно по $1 - \cos \vartheta$ и энергии E для интервала азимутальных углов $\varphi [76.5^\circ, 79.5^\circ]$ при распылении грани Ni (100) для всех распыленных атомов (вверху) и только перефокусированных распыленных атомов (внизу).

1. G.V. Kornich, G. Betz, *Nucl. Instr. Meth. Phys. Res. B.* 143 (1998) 455.
2. G.V. Kornich, G. Betz, A.I. Bazhin, *Nucl. Instr. Meth. Phys. Res. B.* 153 (1999) 383.
3. V.N. Samoilov, A.E. Tatur, N.A. Kovaleva, A.E. Kozhanov, *Nucl. Instr. Meth. Phys. Res. B.* 153 (1999) 319.
4. В.Н. Самойлов, А.И. Мусин, Н.Г. Ананьева, *Известия РАН. Сер. физ.* 80 (2016) 122.
5. V.I. Voevodin et al. *Supercomp. Front. and Innov.* 6 (2019) 4.