О СДВИГЕ МАКСИМУМА ПОЛЯРНОГО УГЛОВОГО РАСПРЕДЕЛЕНИЯ РАСПЫЛЕННЫХ АТОМОВ В

МД-МОДЕЛИ РАСПЫЛЕНИЯ ГРАНИ (001) Ni

А.И. Мусин1),В.Н. Самойлов2)

1)Московский государственный областной педагогический университет, Москва, Россия

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

В настоящей работе исследованы полярные угловые распределения атомов, распыленных с грани (001) Ni ионами Ar с энергией 200 эВ при 300 К. Расчеты выполнялись с помощью метода молекулярной динамики по модели /1/. Было рассчитано падение ~106 ионов.

При энергии 2.5±0.5 эВ максимум полярного углового распределения наблюдался при угле 53°. С ростом энергии распыленных атомов максимум смещался в направлении к нормали к поверхности до ~43° при энергии 9.0±1.0 эВ, затем – в сторону от нормали. При энергии 25±5 эВ он наблюдался при угле 46°. Был сделан вывод, что сдвиг максимума имеет немонотонный характер. Такой сдвиг наблюдался экспериментально /2/, в МД-расчетах с энергией ионов 1000 эВ /3/ и в нашей модели, в рамках которой рассчитывалась динамика 21 атома верхнего слоя только на стадии эмиссии атома с поверхности.

Работа выполнена с использованием оборудования Центра коллективного пользования сверхвысоко-производительными вычислительными ресурсами МГУ имени М.В. Ломоносова /4/.

ЛИТЕРАТУРА

1. Kornich G.V., Betz G. // Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. B.,1998, V. 143, No. 4, p. 455-472.

2. van Veen A. Ph.D. Thesis, Univ. Utrecht, Utrecht, the Netherlands, 1979.

3. Samoilov V.N., Tatur A.E. et al. // Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. B., 1999, V. 153, No. 1-4, p. 319-325.

4. Vl. Voevodin et al. // Supercomp. Front. Innov., 2019, V. 6, No. 2, p. 4-11.