

Исследовано распыление грани (001) Ni ионами Ag с энергией 200 эВ с разрешением по углам и энергии. Расчеты проведены по молекулярно-динамической модели [1], 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 10^6 ионов. Для распыленных атомов регистрировались параметры E , ϑ и ϕ не только на большом удалении от поверхности (10 \AA), но и на высоте 0.3 \AA над усредненной поверхностью кристалла.

На рис. 1 представлены полярные угловые распределения распыленных атомов с разрешением по энергии E для температуры мишени 300 К. При энергии $2.5 \pm 0.5 \text{ эВ}$ максимум полярного углового распределения наблюдался при угле 53° .

С ростом энергии распыленных атомов максимум смещался в направлении к нормали к поверхности до $\sim 43^\circ$ при энергии $9.0 \pm 1.0 \text{ эВ}$, затем – в сторону от нормали. При энергии $25 \pm 5 \text{ эВ}$ он наблюдался при угле 46° . Был сделан вывод, что сдвиг максимума имеет немонотонный характер. Такой сдвиг наблюдался экспериментально [2], а также в МД-расчетах с энергией ионов 1000 эВ [3] и в нашей модели, в рамках которой рассчитывалась динамика 5 атомов или 21 атома верхнего слоя только на стадии эмиссии атома с поверхности.

На рис. 2а и 2б представлены распределения распыленных атомов по $1 - \cos\vartheta$ (ϑ – полярный угол наблюдения) и по $1 - \cos\vartheta_0$ (ϑ_0 – полярный угол при вылете с поверхности) для температуры мишени 0 К и 300 К. Хотя в распределении по $1 - \cos\vartheta$ наблюдается максимум вблизи направления $\langle 011 \rangle$, что находится в соответствии с экспериментальными данными, в начальном распределении по $1 - \cos\vartheta_0$ этот максимум отсутствует.

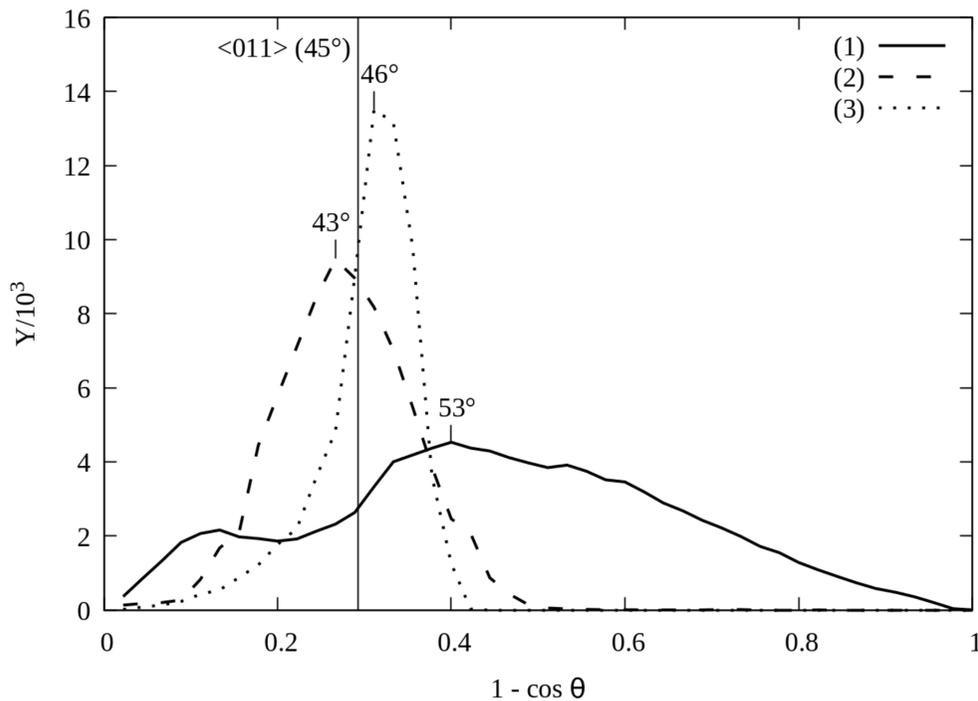


Рис. 1. Распределения атомов, распыленных с грани (001) Ni, по $1 - \cos\vartheta$ для энергии $E = 2.5 \pm 0.5 \text{ эВ}$ (1), $9.0 \pm 1.0 \text{ эВ}$ (2) и $25 \pm 5 \text{ эВ}$ (3). Температура мишени 300 К

Можно заключить, что формирование пятен Венеры происходит не из-за процессов фокусировки в каскаде столкновений (по фокусонному механизму или по механизму Лемана-Зигмунда), а из-за сильного перераспределения атомов по углам в процессе вылета с поверхности. При этом максимум начального распределения сдвигается ближе к нормали к поверхности так, что в наблюдаемом распределении появляется максимум вблизи направления $\langle 011 \rangle$.

Таким образом, доминирующую роль в формировании пятен Венеры играют поверхностные механизмы эмиссии [4].

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

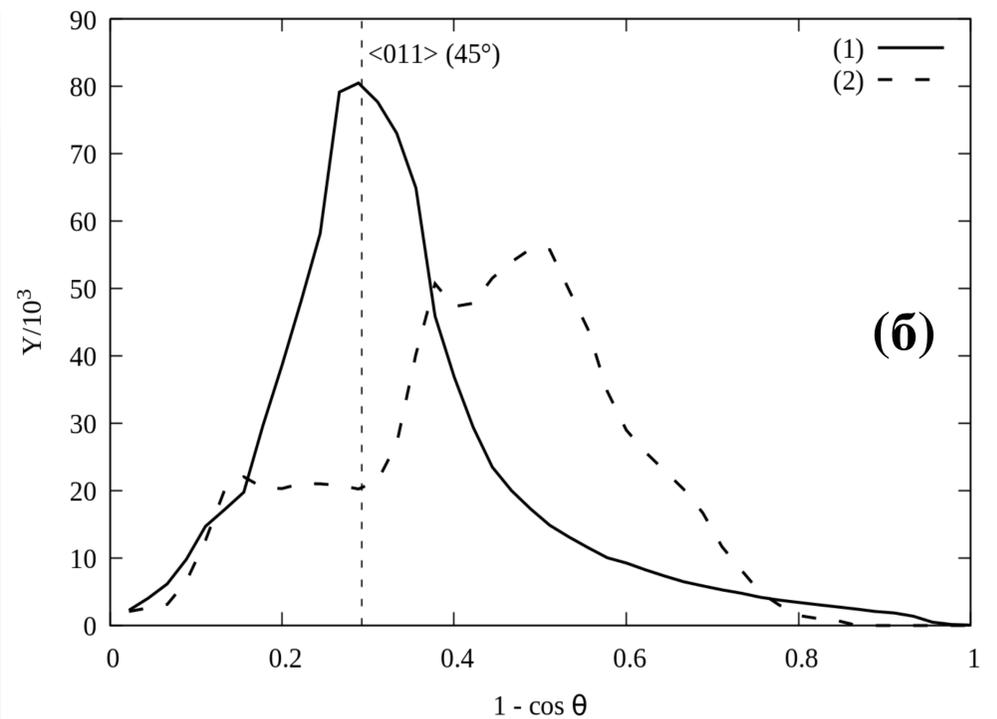
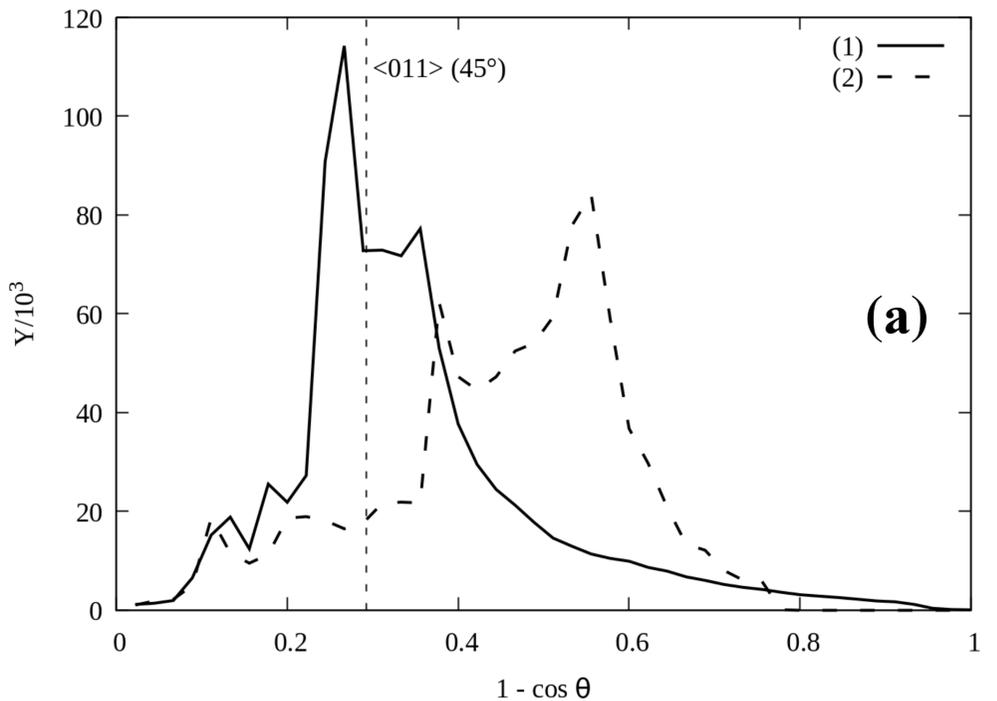


Рис. 2. Распределения атомов, распыленных с грани (001) Ni, по $1 - \cos\vartheta$ (1) и по $1 - \cos\vartheta_0$ (2). Температура мишени 0 К (а) и 300 К (б)

1. G.V. Kornich, G. Betz. *Nucl. Instr. Meth. Phys. Res. B.* 143 (1998) 455.
2. A. van Veen. Ph.D. Thesis, Univ. Utrecht, Utrecht, the Netherlands, 1979.
3. V.N. Samoilo, A.E. Tatur et al. *Nucl. Instr. Meth. Phys. Res. B.* 153 (1999) 319.
4. А.И. Мусин. Дисс. канд. физ.-мат. наук, МГУ им. М.В. Ломоносова, физ. фак., М., 2023.
5. V.I. Voevodin et al. *Supercomp. Front. and Innov.* 6 (2019) 4.