

Об особенностях формирования полярного распределения распыленных атомов в МД-модели распыления грани (001) Ni

А.И. Мусин^{1,2)}, В.Н. Самойлов³⁾

¹⁾ Московский государственный технологический университет «СТАНКИН», Москва

²⁾ Государственный университет просвещения, Московская область

³⁾ МГУ им. М.В. Ломоносова, Москва

e-mail: ai.musin@physics.msu.ru

Исследовано распыление грани (001) Ni ионами Ar 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 $\sim 10^6$ ионов. Для распыленных атомов регистрировались параметры E , θ и φ не только на большом удалении от поверхности (10 Å), но и E_0 , θ_0 и φ_0 на высоте 0.3 Å над усредненной поверхностью кристалла.

На рис. 1 показано двумерное распределение распыленных атомов для несимметричного относительно центра линзы интервала азимутального угла наблюдения $87^\circ \pm 1.5^\circ$. В распределении видны отдельные хребты, которые возникают из-за различных механизмов фокусировки в процессе вылета с поверхности. При энергиях E от 1.5 до 3.5 эВ наблюдается три хребта (обозначим их I, II и III в порядке сверху вниз), нижний хребет (III) примерно при 3.5 эВ обрывается, остальные два сходятся в центральной области распределения. При энергиях от 9 до 40 эВ также наблюдается отдельный хребет (IV). Хребты II и III образованы перефокусированными атомами, хребты I и IV — собственными и фокусированными атомами.

Таким образом, в экспериментах по распылению грани (001) Ni с высоким угловым и энергетическим разрешением при низких температурах можно ожидать наличие тонкой структуры в распределениях распыленных атомов для несимметричных относительно направления $\langle 010 \rangle$ интервалов азимутального угла.

На рис. 2 показано распределение распыленных атомов, наблюдаемых в том же интервале азимутальных углов $87^\circ \pm 1.5^\circ$, по $1 - \cos \theta$ для энергий E (2.5 ± 0.1) эВ. Здесь хребтам I, II и III соответствуют одноименные максимумы, окрестности которых для удобства обозначены пунктирными линиями. Окрестности максимумов задаются интервалами полярного угла θ : I — $[51.7^\circ; 58.0^\circ]$, II — $[60.7^\circ; 67.7^\circ]$, III — $[70.1^\circ; 75.5^\circ]$.

Рис. 1. Распределение распыленных атомов по энергии E и $1 - \cos \theta$, наблюдаемых в интервале азимутальных углов φ $[85.5^\circ; 88.5^\circ]$. Два нижних хребта образованы в основном перефокусированными атомами

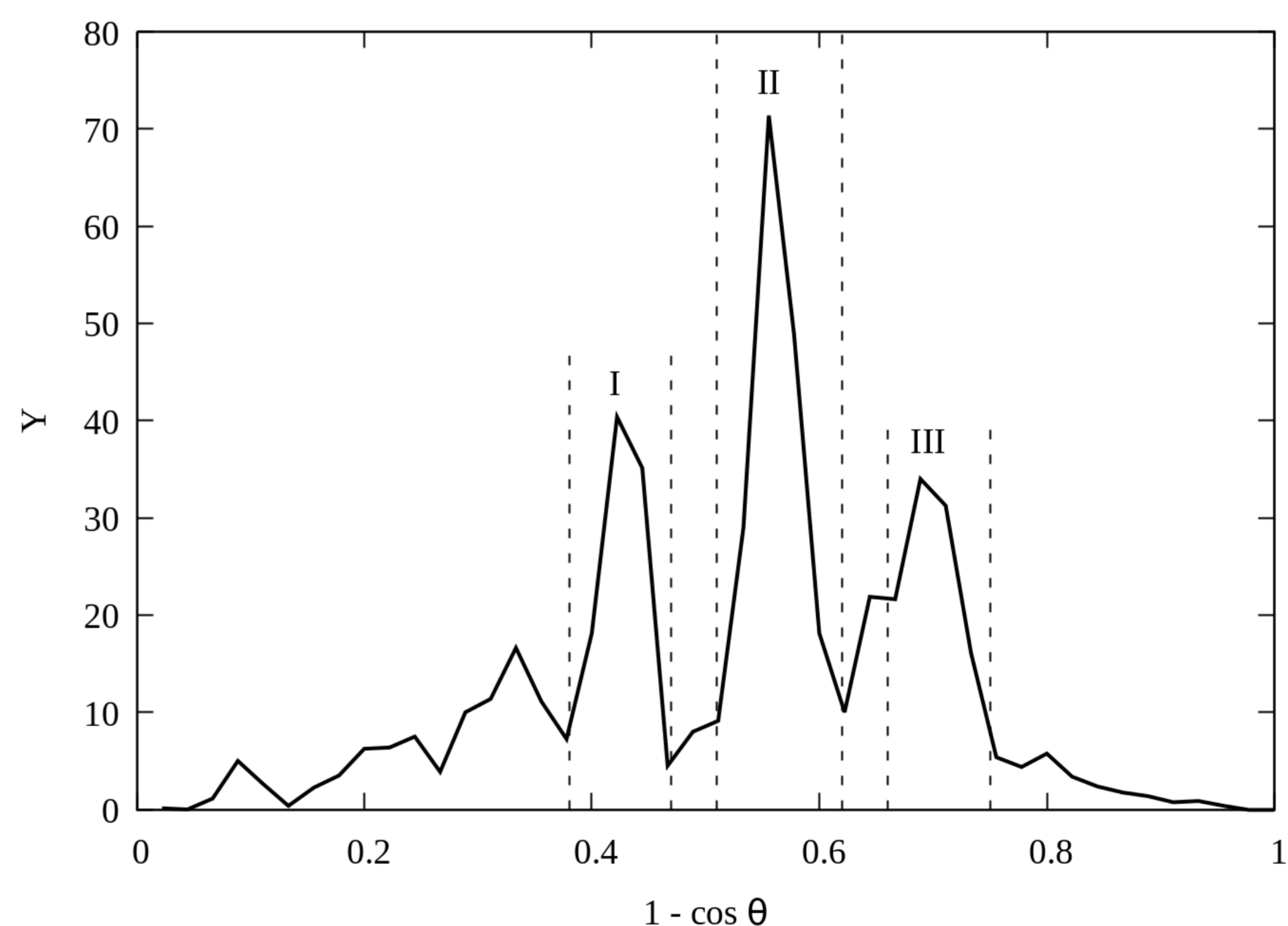
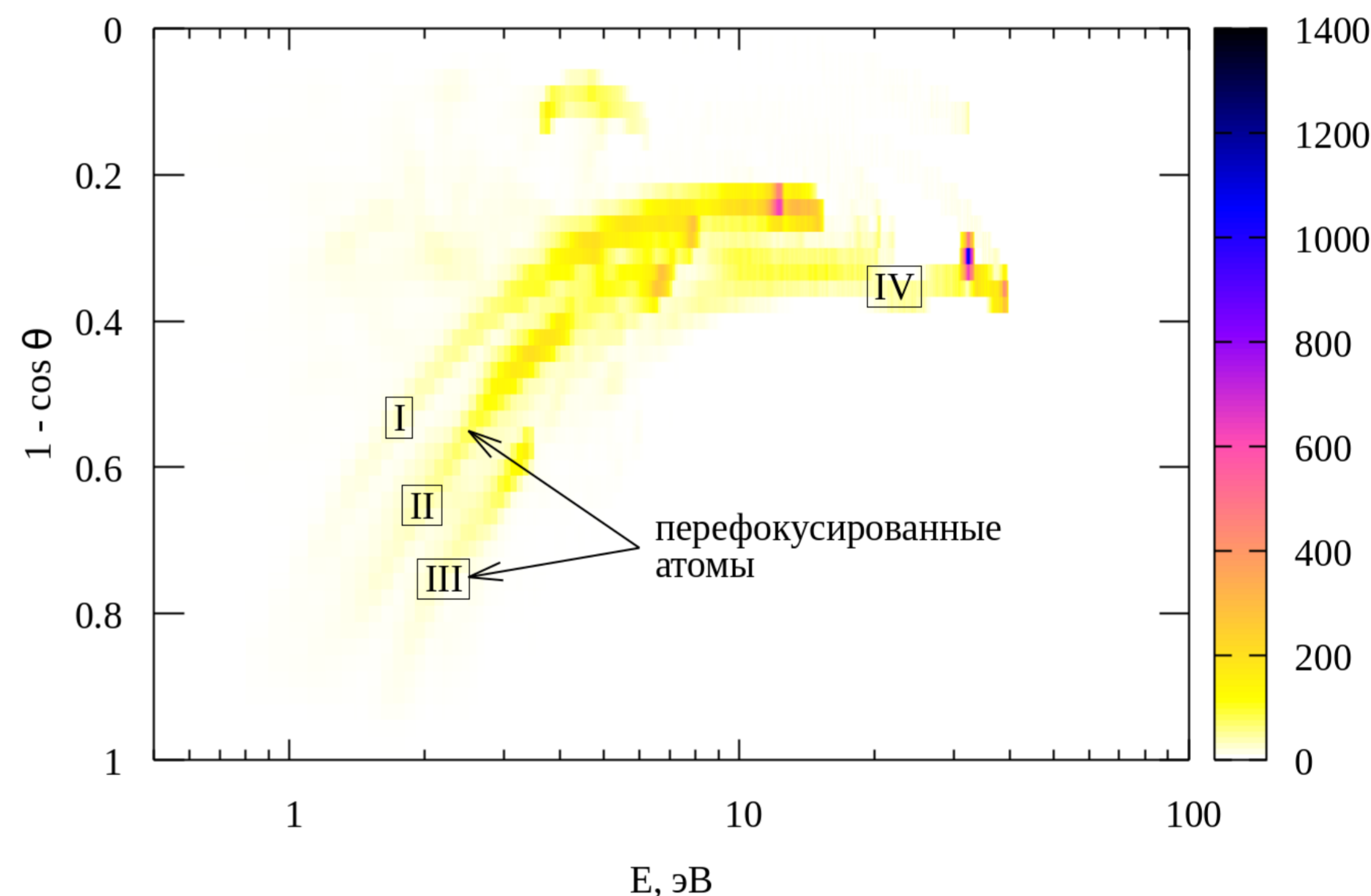


Рис. 2. Распределение распыленных атомов по $1 - \cos \theta$, наблюдаемых в интервале азимутальных углов φ $[85.5^\circ; 88.5^\circ]$ с энергией E (2.5 ± 0.1) эВ

Атомы, образующие максимум III, в основном являются перефокусированными с начальными азимутальными углами $95^\circ - 100^\circ$. Эти атомы вылетают под углами θ_0 ближе к нормали, чем атомы предыдущих групп, поэтому взаимодействие с соседними атомами не такое сильное, из-за чего разворот траектории по азимутальному углу составляет только $8^\circ - 13^\circ$. За счет притяжения к поверхности полярный угол увеличивается ($\theta > \theta_0$). Поскольку сильная блокировка отсутствует, потери энергии здесь меньше из-за более слабого взаимодействия с атомами линзы.

Работа выполнена с использованием оборудования Центра коллективного пользования сверхвысокопроизводительными вычислительными ресурсами МГУ имени М.В. Ломоносова [2].

1. G.V. Kornich, G. Betz. *Nucl. Instr. Meth. Phys. Res. B.* 143 (1998) 455.
2. Vl. Voevodin et al. *Supercomp. Front. and Innov.* 6 (2019) 4.