

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

А.И. Мусин<sup>1,2)</sup>, В.Н. Самойлов<sup>3)</sup>

<sup>1)</sup> Московский государственный технологический университет «СТАНКИН», Москва

<sup>2)</sup> Государственный университет просвещения, Московская область

<sup>3)</sup> МГУ им. М.В. Ломоносова, Москва

e-mail: [ai.musin@physics.msu.ru](mailto: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  $\theta$  и азимутальному  $\varphi$  углам. Было рассчитано падение  $\sim 10^6$  ионов. Для распыленных атомов регистрировались параметры  $E$ ,  $\theta$  и  $\varphi$  не только на большом удалении от поверхности (10 Å), но и  $E_0$ ,  $\theta_0$  и  $\varphi_0$  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  $E$  ( $2.5 \pm 0.1$ ) эВ. Здесь хребтам I, II и III соответствуют одноименные максимумы, окрестности которых для удобства обозначены пунктирными линиями. Окрестности максимумов задаются интервалами полярного угла  $\theta$ : 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  $\varphi$   $[85.5^\circ; 88.5^\circ]$ .

Два нижних хребта образованы в основном перефокусированными атомами

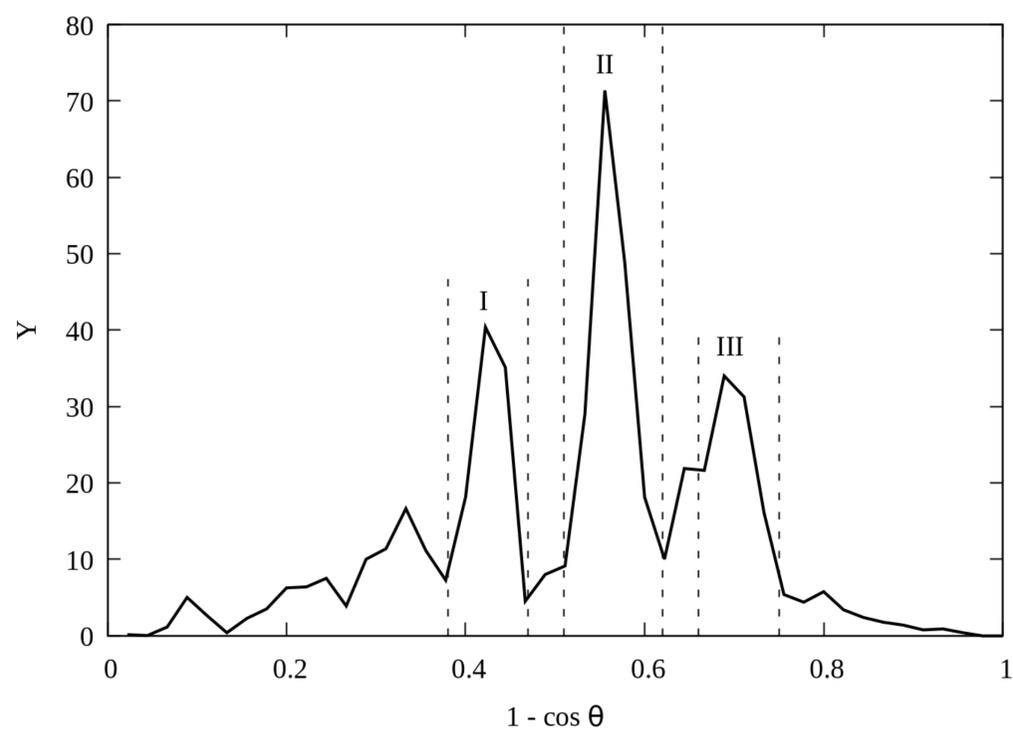
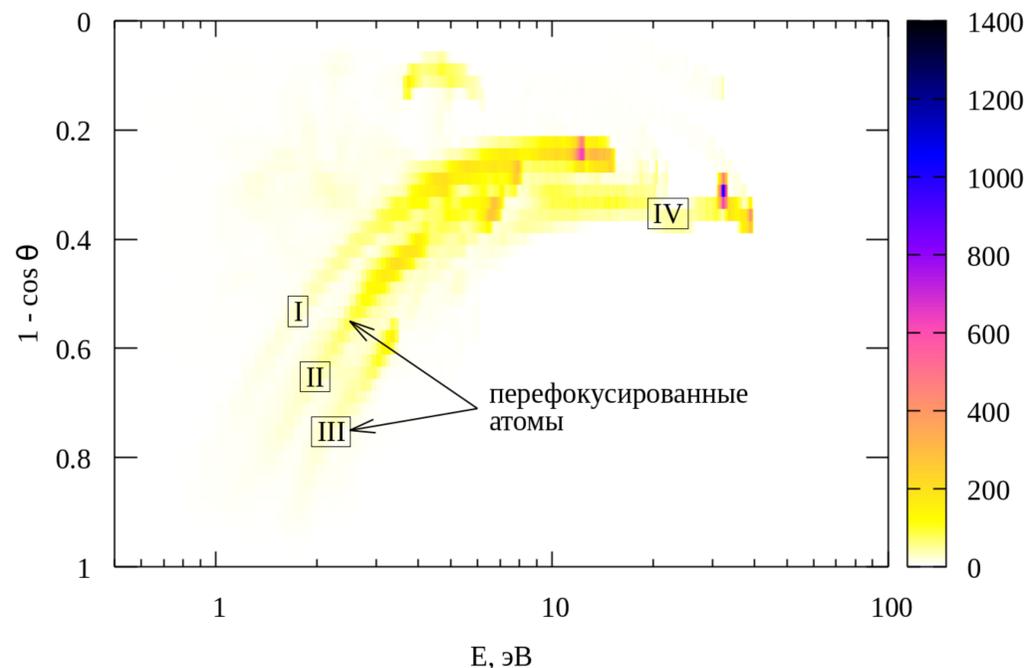


Рис. 2. Распределение распыленных атомов по  $1 - \cos \theta$ , наблюдаемых в интервале азимутальных углов  $\varphi$   $[85.5^\circ; 88.5^\circ]$  с энергией  $E$  ( $2.5 \pm 0.1$ ) эВ

Атомы, образующие максимум III, в основном являются перефокусированными с начальными азимутальными углами  $95^\circ - 100^\circ$ . Эти атомы вылетают под углами  $\theta_0$  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.