ВЛИЯНИЕ БЛИЖАЙШЕГО АТОМНОГО ОКРУЖЕНИЯ НА ЭФФЕКТ БЛОКИРОВКИ АТОМОВ ПРИ ЭМИССИИ С ПОВЕРХНОСТИ (001) Au

А.И. Мусин1), В.Н. Самойлов2), Н.Г. Ананьева2)

1)Вятский государственный университет, Киров, Россия

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

В докладе рассмотрена финальная стадия распыления (001) Au – эмиссия атома поверхностного слоя из узла решетки. Было проведено сравнение пяти моделей с разным числом атомов окружения:

1. без атомов окружения;
2. с 4 атомами поверхностного слоя, как в [1];
3. с 4 атомами поверхностного и 4 – второго слоя;
4. с 20 атомами поверхностного слоя, как в [2];
5. с 12 атомами поверхностного и 4 – второго слоя.

Атом эмитировался в азимутальном направлении <010> под различными полярными углами с энергиями от 0.5 до 100 эВ. Траектории атомов вычислялись методом молекулярной динамики. Во всех моделях притяжение эмитируемого атома к поверхности в целом описывалось плоским потенциальным барьером высотой *E*b = 3.78 эВ.

Показано, что добавление атомов второго слоя увеличивает вероятность преодоления барьера и, таким образом, распыления. В частности, в модели 5 появляется возможность распыления атомов, которые вылетали с полярными углами θ0 ≈ 85°.

Работа выполнена с использованием оборудования Центра коллективного пользования сверхвысоко-производительными вычислительными ресурсами МГУ имени М.В. Ломоносова [3].

ЛИТЕРАТУРА

1. Самойлов В.Н., Носов Н.В. // Поверхность, 2014, № 3, с. 81-92.
2. Самойлов В.Н., Мусин А.И. // Изв. РАН. Сер. физ., 2018, Т. 82, № 2, с. 171-176.
3. Vl. Voevodin et al. // Supercomp. Front. Innov., 2019, V. 6, No. 2, p. 4-11.