

Влияние ближайшего атомного окружения на эффект блокировки атомов при эмиссии с поверхности (001) Au

А.И. Мусин^{1,2)}, В.Н. Самойлов³⁾, Н.Г. Ананьева³⁾

¹⁾ Московский государственный технологический университет «СТАНКИН», Москва

²⁾ Вятский государственный университет, Кировская обл., Киров

³⁾ МГУ им. М.В. Ломоносова, Москва

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

Рассмотрена конечная стадия распыления поверхности грани (001) Au – эмиссия атома поверхностного слоя из узла решетки. Было проведено сравнение пяти моделей с разным числом атомов окружения:

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

Атом эмитировался в азимутальном направлении $\langle 010 \rangle$ под различными

полярными углами θ_0 с энергиями E_0 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 с $E_b = 3.78$ эВ.

Коэффициент распыления рассчитывался с учетом начальной функции распределения Зигмунда $F_0 \sim \cos \theta_0 / E_0^2$.

Добавление атомов второго слоя увеличивает блокировку атомов к нормали к поверхности и вероятность преодоления барьера и, таким образом, распыления. В частности, в модели 5 появляется возможность распыления атомов, которые вылетали с полярными углами $\theta_0 \approx 85^\circ$.

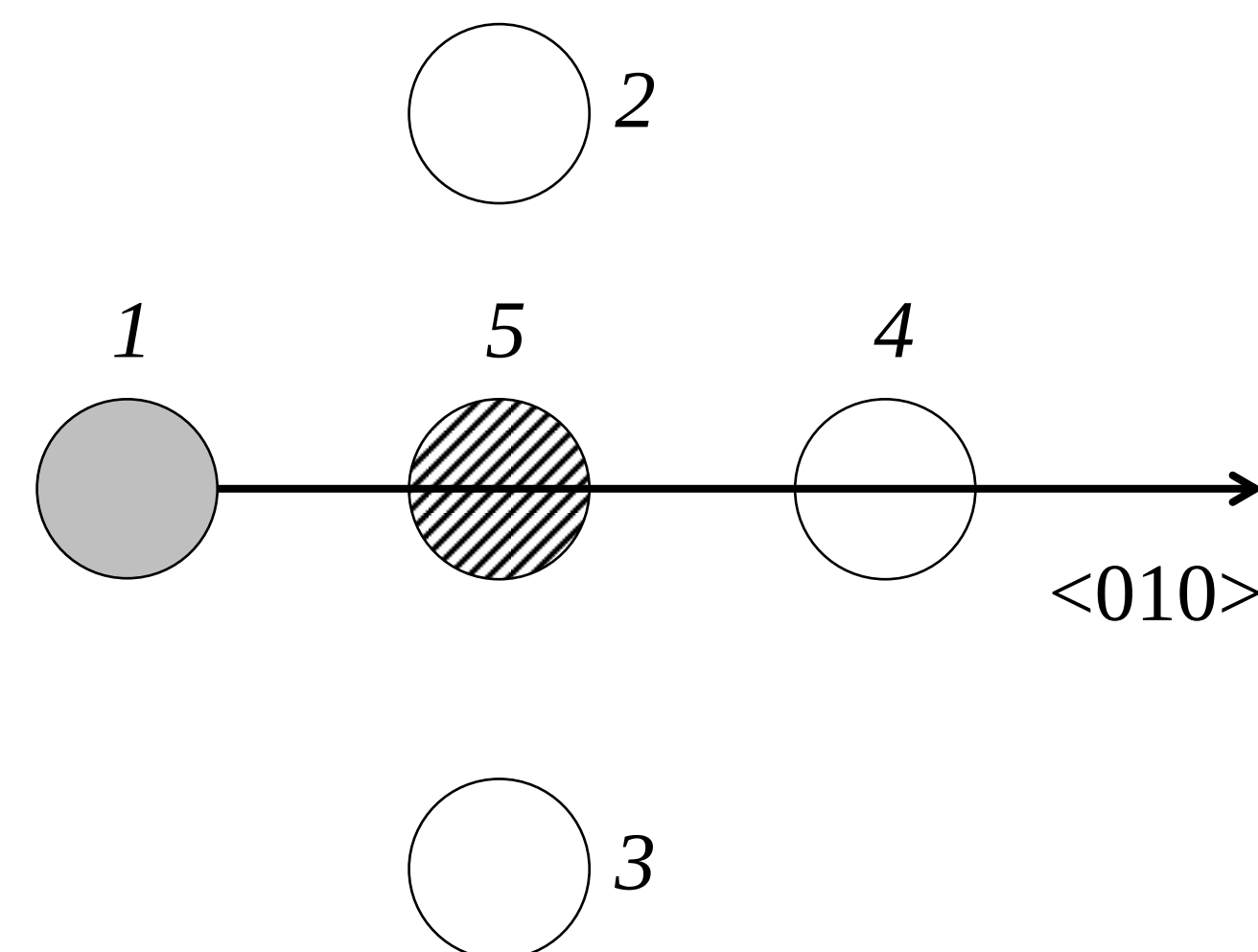


Рис. 1. Схема вылета атома с поверхности грани (001) Au в направлении $\langle 010 \rangle$. Эмитируется атом 1. Штриховкой показан атом 5 второго слоя

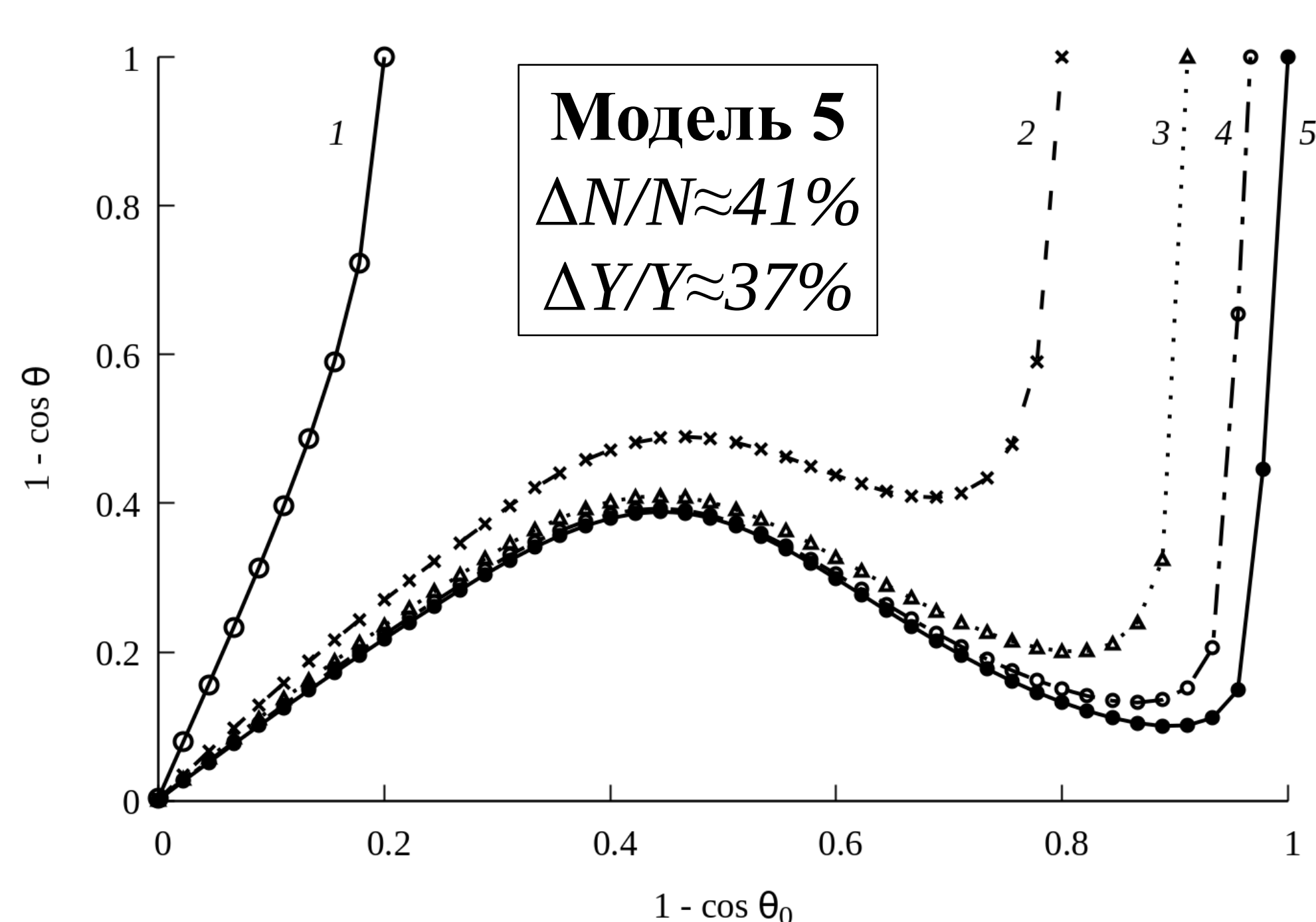
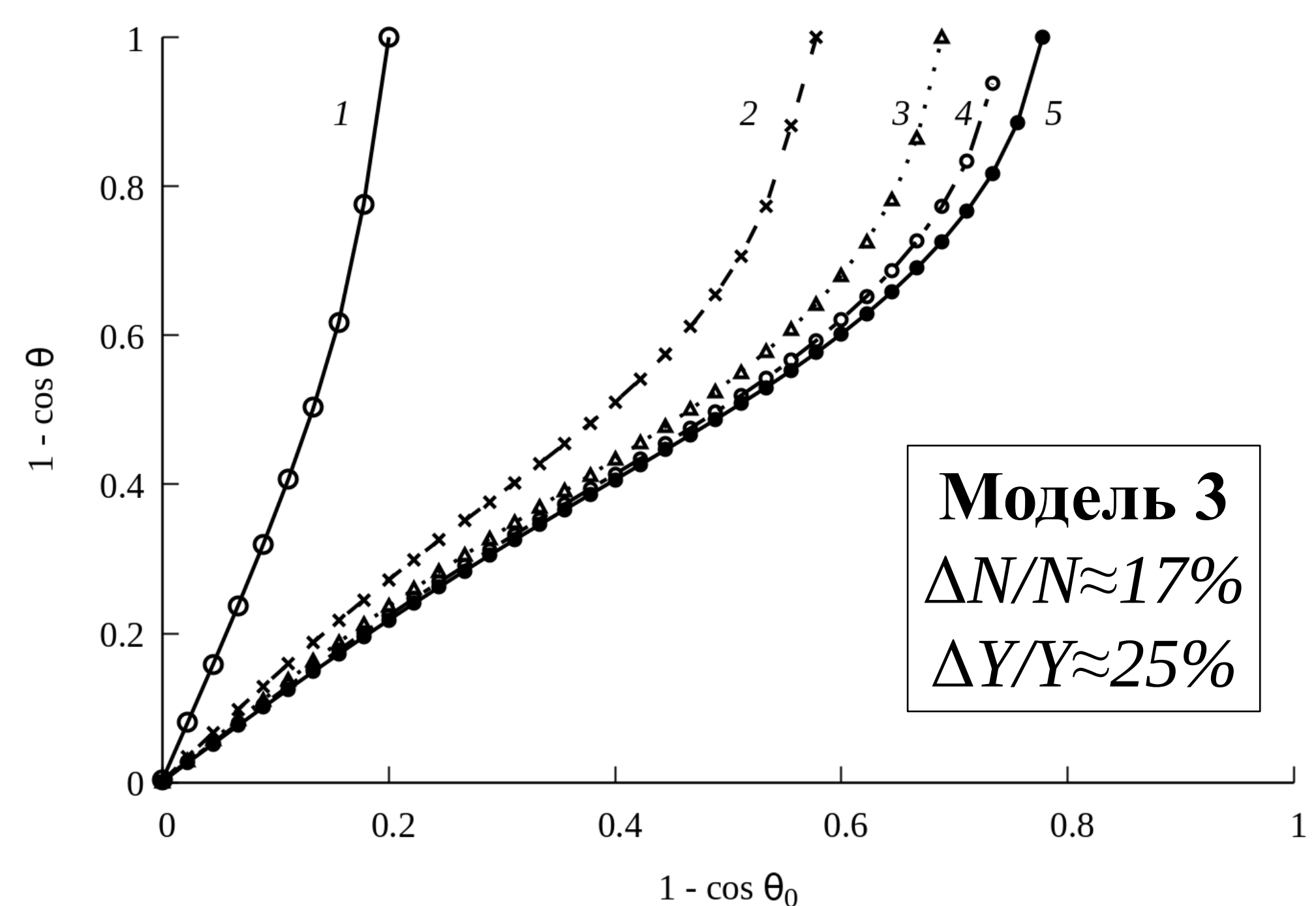
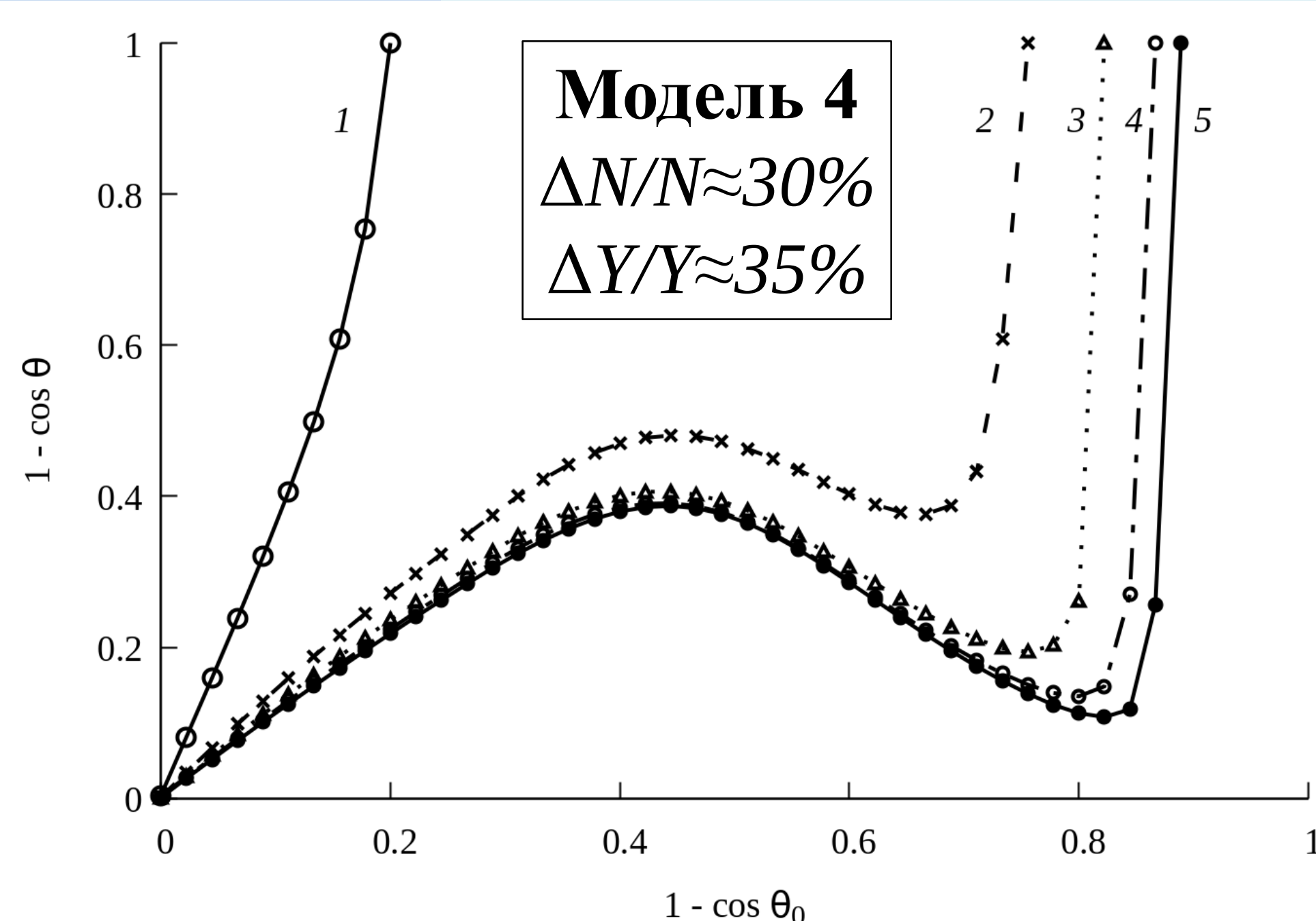
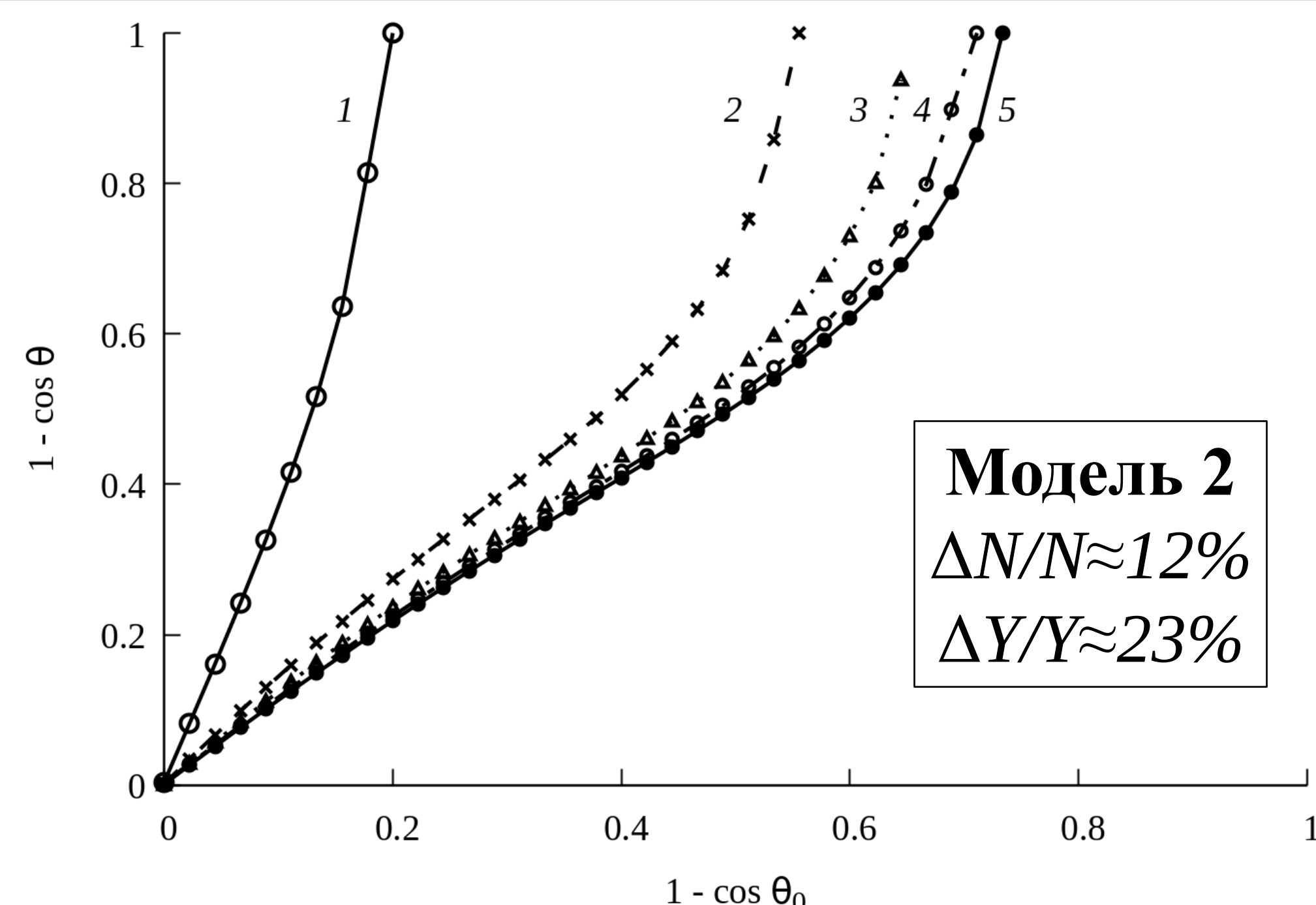


Рис. 2. Зависимости $1 - \cos \theta$ (θ – полярный угол наблюдения) от $1 - \cos \theta_0$ (θ_0 – полярный угол вылета) в различных моделях атомного окружения для различных значений начальной энергии вылета E_0 : 5 эВ (1), 10 эВ (2), 15 эВ (3), 20 эВ (4), 25 эВ (5). Указаны относительные увеличения числа эмитированных атомов $\Delta N/N$ и коэффициента распыления $\Delta Y/Y$ по сравнению с контрольной моделью 1

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

1. Самойлов В.Н., Носов Н.В. *Поверхность*. 3 (2014) 81.
2. Самойлов В.Н., Мусин А.И. *Изв. РАН. Сер. физ.* 82 (2018) 171.
3. Vl. Voevodin et al. *Supercomp. Front. and Innov.* 6 (2019) 4.