## The 25<sup>th</sup> International Conference ION-SURFACE INTERACTIONS (ISI-2021)

## The formation of energy distribution of atoms ejected from Ni (100) surface and observed in small spatial angle



## <u>A.I. Musin<sup>1)</sup>, V.N. Samoilov<sup>2)</sup></u>

<sup>1)</sup> Moscow Region State University, Moscow, Russia
<sup>2)</sup> Lomonosov Moscow State University, Moscow, Russia

The formation of sputtered atoms signal during ejection from the surface of Ni (100) face is investigated using our MD codes. Atoms are splitted into three groups (*proper, focused* and *overfocused*). Atoms overfocused into selected spatial angle have initial ejection energy between 13 and 21 eV and are divided into two subgroups. The subgroups differ one from another in initial azimuthal angle and mechanisms of surface atom scattering.



Глубокий фундаментальный анализ распыления монокристаллов требует выяснения особенностей и механизмов формирования распределений распыленных атомов по углам и энергии. Для этого необходимо выяснить "предысторию" каждого распыленного атома: с какой энергией  $E_0$  он был эмитирован с поверхности, и под какими углами  $\vartheta_0$  и  $\varphi_0$ .

В настоящей работе определялись вклады перефокусированных [1,2] и фокусированных атомов (рис. 1) в распределение атомов по энергии наблюдения при эмиссии с поверхности грани (100) Ni. Вычисления выполнялись с помощью метода молекулярной динамики с использованием ресурсов ЦКП МГУ [3]. Поверхность кристалла моделировалась 21 атомом поверхности, как и в наших предыдущих работах [4,5].

Используя авторские алгоритмы, мы разделили все распыленные атомы на фокусированные и перефокусированные и нашли такие телесные углы, в которых наблюдаются атомы обеих групп. Для более глубокого анализа был выбран один из них,

Fig. 1. General view of atom trajectory during emission (left) and views trajectories of focused and overfocused atoms (right)



соответствующий интервалам углов φ [76.5°, 79.5°] и θ [49.9°, 51.5°].

На рис. 2 представлен график распределения по начальной энергии  $E_0$  эмитированных атомов, наблюдаемых в выбранном телесном угле. Из графика отчетливо видно, что энергия фокусированных атомов при вылете из узла составляет 5–9 эВ, начальная энергия перефокусированных атомов 13–21 эВ. Перефокусированные атомы можно разделить на две подгруппы по начальной энергии: от 13 до 17 эВ и от 17 до 21 эВ. На рис. 3 показан вклад этих подгрупп перефокусированных атомов в распределение эмитированных атомов по энергии *E*.

Для анализа механизмов вылета фокусированных атомов и атомов подгрупп перефокусированных атомов были построены распределения эмитированных атомов по 1 – соз  $\vartheta_0$  и  $\varphi_0$  (рис. 4). Почти все перефокусированные атомы вылетают под углами  $\vartheta_0 \approx$ и являются сильно блокированными. Две  $70^{\circ}$ подгруппы перефокусированных атомов отличаются друг OT друга начальными азимутальными углами вылета  $φ_0$  (рис. 4 справа). Перефокусированные атомы с начальной энергией  $E_0$  от 17 до 21 ЭВ вылетают под начальными азимутальными углами *φ*<sub>0</sub> ближе к дальнему атому линзы. Таким образом, эти атомы в процессе эмиссии разворачиваются на больший угол и теряют больше Перефокусированные атомы образуют отдельные энергии. максимумы в энергетическом распределении эмитированных атомов и могут быть выделены в экспериментах с разрешением по углам и энергии отдельно от фокусированных и "собственных" атомов.

Fig. 2. The distribution of focused and overfocused atoms over initial energy  $E_0$  observed in angle  $\varphi$  interval [76.5°, 79.5°] and angle  $\vartheta$  interval [49.9°, 51.5°]



Fig. 3. The contribution of overfocused atoms subgroups with different initial energy  $E_0$  to distribution of emitted atoms over energy *E* observed in azimuthal angle  $\varphi$  interval [76.5°, 79.5°] and polar angle  $\vartheta$  interval [49.9°, 51.5°]



Fig. 4. The distributions of emitted atoms observed in azimuthal angle  $\varphi$  interval [76.5°, 79.5°] and polar angle  $\vartheta$  [49.9°, 51.5°] over 1 – cos  $\vartheta_0$  (left) and  $\varphi_0$  (right)

1. V.N. Samoilov et al, Ion Beam Modification of Materials, Eds. J.S. Williams et al., Amsterdam: Elsevier Science B.V., 1996, 710.

- 2. О.С. Корсакова, В.А. Алешкевич, В.Н. Самойлов, А.М. Никитин, Поверхность № 2 (1997) 77.
- 3. Vl. Voevodin et al, Supercomputing Frontiers and Innovations. 6 (2019) 4.
- 4. V.N. Samoilov, A.I. Musin, N.G. Ananieva, Bull. Russ. Acad. Sciences: Physics. 80 (2016) 109.
- 5. V.N. Samoilov, A.I. Musin, Bull. Russ. Acad. Sciences: Physics. 82 (2018) 150.