Atoms Sputterred from (001) Ni Face in MD-Model with Incident Ions: Classification and Ejection History

A.I. Musin[1], **V.N. Samoilov**[2]
[1] State University of Education, Moscow Region, Russia
[2] M.V. Lomonosov Moscow State University, Moscow, Russia

The formation of sputtered atoms distribution with energy and angle resolution during 200 eV Ar bombardment of (001) Ni face was studied using the molecular dynamics (MD) code. We divided sputtered atoms into three groups (proper, focused and overfocused). Atoms overfocused into selected interval of azimuthal angles have initial energy between 6 and 10 eV and are divided into two subgroups. The subgroups differ one from another in initial atom energy, azimuthal and polar angles and mechanisms of surface atom scattering.

Для выяснения механизмов формирования распределений распыленных атомов по углам и энергии необходимо выяснить "предысторию" каждого распыленного атома: с какой энергией E_0 он был эмитирован с поверхности, и под какими полярным ϑ_0 и азимутальным φ_0 углами. На основе этих данных становится возможным выяснить механизмы надповерхностного рассеяния атомов с различными начальными параметрами, разделить их на группы и определить вклад каждой группы атомов в максимумы угловых и энергетических распределений распыленных атомов.

Для несимметричных относительно направления <010> интервалов азимутального угла φ формирование сигнала распыленных атомов при эмиссии атомов с поверхности грани (001) Ni происходит за счет группы "собственных" атомов, фокусированных и перефокусированных атомов. Эффект перефокусировки, на основе которого было произведена такая классификация, был обнаружен в [1, 2] и исследован в ряде работ, например, в [3].

В настоящих расчетах атомы распылялись при бомбардировке монокристаллического атомного блока (001) Ni из 4032 атомов ионами Ar с энергией 200 эВ. Нижний слой атомов был фиксирован, остальные слои были свободны, по бокам применялись периодические граничные условия. Температура кристаллического блока поддерживалась равной 0 K с помощью "ванны Берендсена". Похожая модель применялась ранее в [4].

На рис. 1 представлено распределение распыленных атомов по конечной энергии E и $1 - \cos\vartheta$, наблюдаемых в несимметричном относительно направления <010> интервале азимутального угла. В распределении отчетливо видны "хребты" I, II, III и IV. "Хребты" II и III образованы в основном перефокусированными атомами, 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 одновременно по полярному углу и энергии.

На рис. 2 представлены распределения атомов, распыленных с энергией 2.5±0.1 эВ в интервалы полярных углов ϑ, соответствующих максимумам: I – [51.7°, 58.0°], II – [60.7°, 67.7°] и III – [70.1°, 75.5°]. Перефокусированные атомы "хребтов" II и III вылетают под разными φ_0 и разделяются по механизмам вылета.

Работа выполнена с использованием оборудования Центра коллективного пользования сверхвысокопроизводительными вычислительными ресурсами МГУ имени М.В. Ломоносова [5].

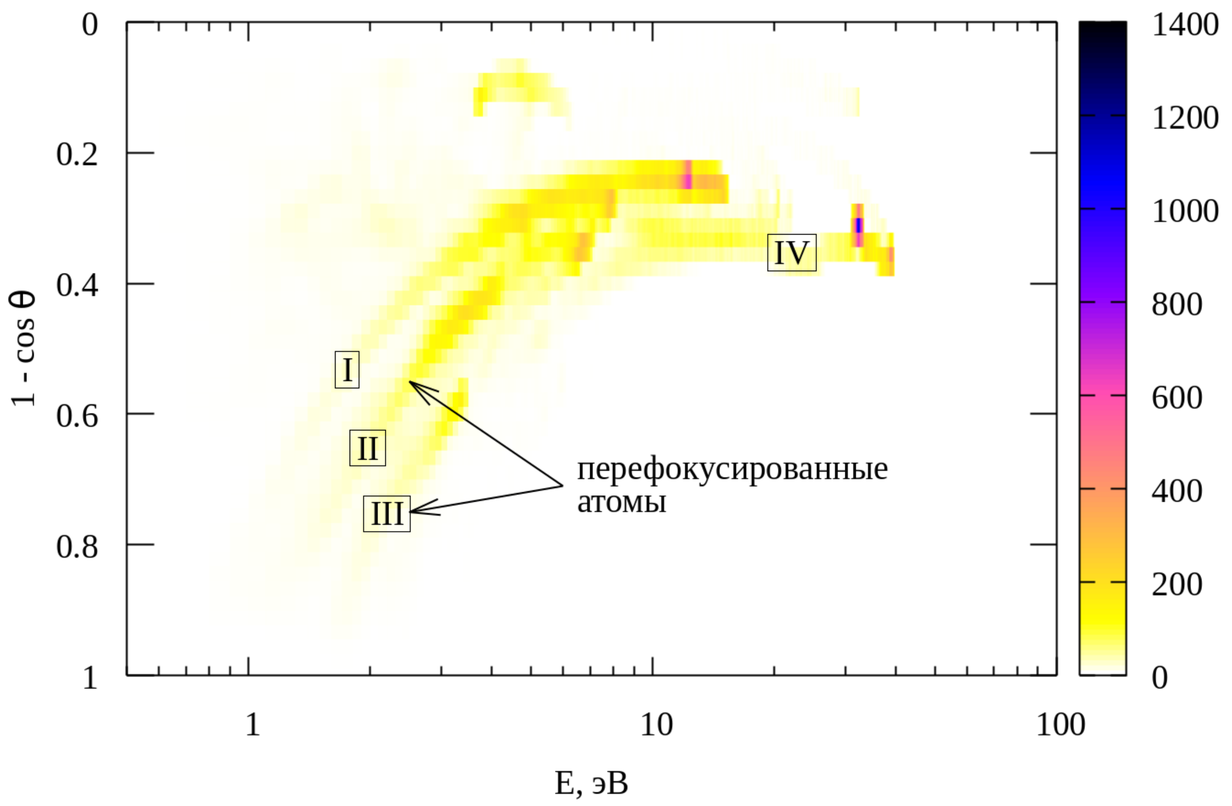

Fig. 1. The distribution of sputtered atoms over energy E and $1 - \cos\vartheta$ observed in azimuthal angle φ interval [85.5°, 88.5°]. Maxima II, III are formed mostly by overfocused atoms

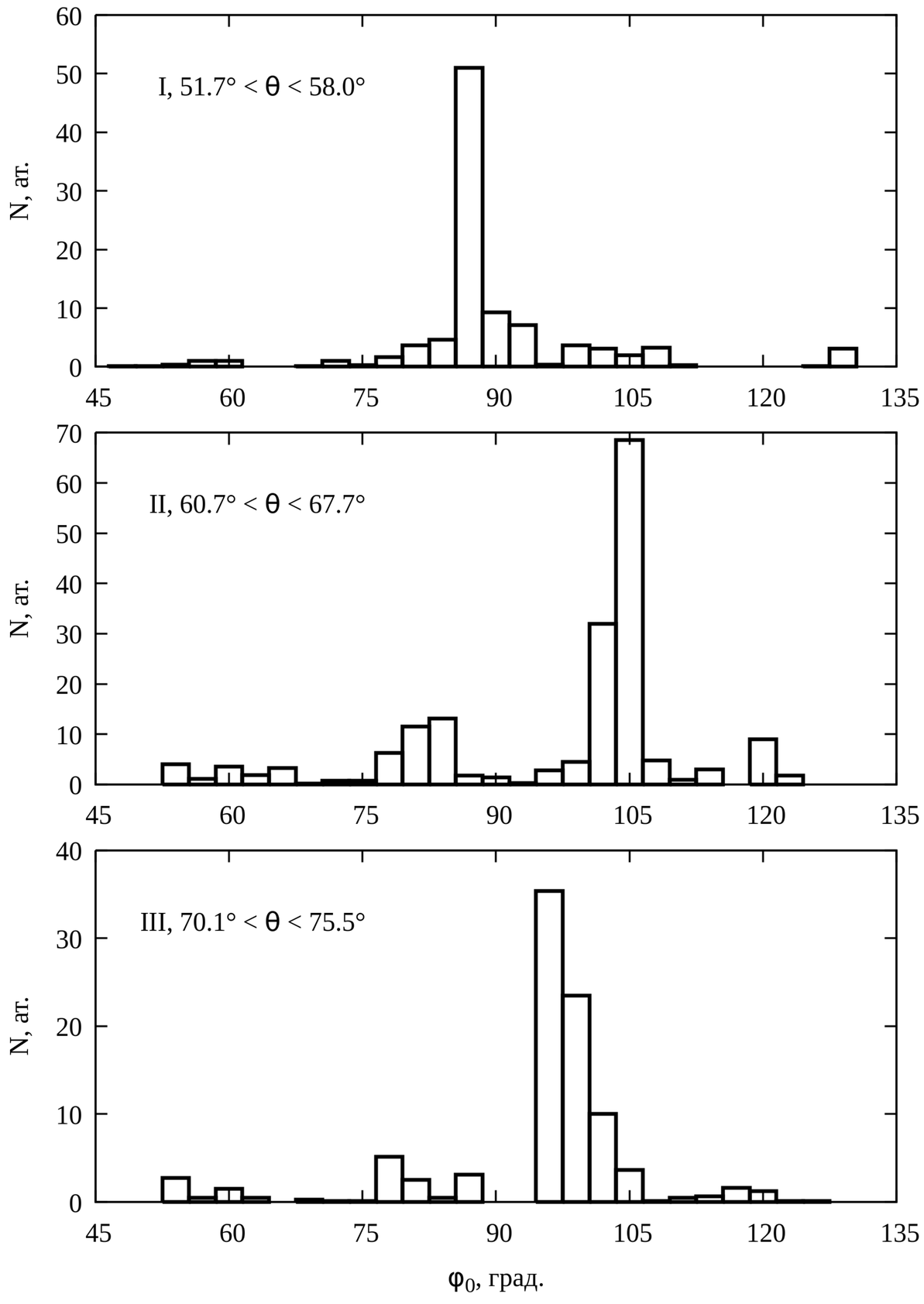

Fig. 2. The distributions of sputtered atoms over initial azimuthal angle φ_0 observed with energy 2.5±0.1 eV for maxima I, II, III in corresponding polar angle ϑ intervals

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. В.Н. Самойлов, Н.В. Носов, Поверхность № 3 (2014) 81.
4. G.V. Kornich, G. Betz, Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. B 143 (1998) 455.
5. Vl. Voevodin et al, Supercomputing Frontiers and Innovations 6 (2019) 4.