

ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ БЮДЖЕТНОЕ ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЕ
УЧРЕЖДЕНИЕ ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ
"МОСКОВСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ
имени М.В. ЛОМОНОСОВА"
ФИЗИЧЕСКИЙ ФАКУЛЬТЕТ

Кафедра общей физики

БАКАЛАВРСКАЯ РАБОТА

**“ИССЛЕДОВАНИЕ МЕХАНИЗМОВ ФОКУСИРОВКИ
ЭМИТИРОВАННЫХ АТОМОВ ПРИ РАСПЫЛЕНИИ
ПОВЕРХНОСТИ МОНОКРИСТАЛЛА”**

Выполнил студент
405 группы
А.И. Мусин

Научный руководитель:
доцент, канд. физ.-мат. наук
В.Н. Самойлов

Допущен к защите
25 мая 2016 г.
Зав. кафедрой общей физики
профессор
А.М. Салецкий

Москва
2016 г.

Содержание

Введение	3
1. Обзор литературы	6
2. Теоретическая часть	8
2.1. Основные теоретические положения	8
2.2. Модель плоского потенциального барьера	10
3. Численное моделирование	11
3.1. Метод численного интегрирования	11
3.2. Модель расчета	13
4. Обсуждение результатов	15
4.1. Распределения распыленных атомов по энергии E и $1 - \cos \theta$. .	15
4.2. О многозначности распределений перефокусированных атомов .	17
4.3. О наблюдаемости перефокусированных распыленных атомов . .	21
5. Выводы	23
Список литературы	24

Введение

Ионное распыление было открыто в 1852 году В.Р. Гроувом [1]. Вначале некоторые исследователи это явление называли “электрическим испарением”, так как в газоразрядных трубках металлические электроды “испарялись” при температурах, которые были значительно ниже достаточной для этого. В дальнейшем за процессом разрушения и распыления металлов в газоразрядных трубках укрепилось название “катодное распыление”, поскольку на стенках трубок оседал в основном материал катода.

Распыление происходит из-за бомбардировки поверхности кристалла ускоренными ионами (рис. 1). В результате столкновений некоторые поверхностные атомы приобретают энергию, достаточную для вылета из потенциальной ямы, создаваемой остальными атомами.

В 1955 г. Г. Венер обнаружил эффект преимущественного выхода распыленных атомов в направлениях вблизи основных кристаллографических осей при ионной бомбардировке монокристаллов [2], то есть эффект анизотропии углового распределения эмитированных атомов (рис. 2).

Это открытие привело к всплеску научного интереса к распылению. В последующие годы проводились активные исследования в этом направлении и было предложено несколько механизмов для объяснения особенностей распыления монокристаллов.

В 1957 г. Р. Силсби предложил идею последовательных фокусированных столкновений – фокусонов, которые осуществляют передачу импульса из глубины кристалла в направлении низкоиндексных кристаллографических осей (плотнупакованных направлений в кристаллической решетке) [3].

В середине 60-х г.г. прошлого века, приблизительно через десятилетие после опубликования работы Р. Силсби, К. Леман и П. Зигмунд [4], а также Д. Харрисон [5] предположили, что максимумы эмиссии не обязательно обусловлены распространением фокусированных цепочек столкновений, как это предполагал Р. Силсби, а могут быть обусловлены упорядоченным расположением атомов лишь двух приповерхностных атомных слоев кристалла. Р.

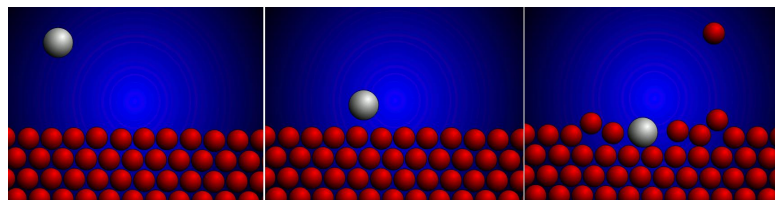


Рис. 1: Падающий ион, попадая на поверхность твёрдого тела, вызывает каскад столкновений, который приводит к эмиссии его атомов.

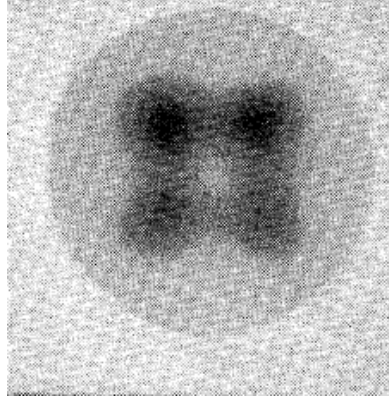


Рис. 2: Пятна Венеры, обнаруженные при бомбардировке грани (001) Ag ионами Hg^+ с энергией 100 эВ [2].

Нельсон и М. Томпсон в качестве возможной причины появления “пятен Венеры” (т.е. максимумов углового распределения распыленных атомов в направлениях, близких к направлениям плотной упаковки) предложили механизм линзовой фокусировки, согласно которому импульс фокусируется линзами из нескольких атомов [6].

В ряде работ изучались эффекты, обусловленные рассеянием эмитируемых атомов в процессе вылета с поверхности: эффект блокировки и его роль в формировании угловых распределений распыленных атомов [7, 8], поверхностный механизм фокусировки эмитированных атомов [8, 9]. Было показано, что на стадии эмиссии происходит сильное перераспределение вылетающих атомов по углам и энергии. По-видимому, стадия эмиссии играет определяющую роль в формировании углового и энергетического распределений распыленных атомов.

В расчетах эмиссии атомов с начальными распределениями $\cos \theta_0/E_0^2$ и $1/E_0^2$ с поверхности граней (001) Ni и (111) Ni наблюдались максимумы углового распределения распыленных атомов, которые по своей угловой ширине и направлениям формирования соответствовали экспериментально наблюдаемым максимумам – пятнам Венеры [7]. Таким образом, формирование экспериментально наблюдаемых пятен Венеры в двумерном угловом распределении атомов, распыленных с поверхности монокристалла, можно объяснить действием только поверхностного механизма фокусировки.

В работе [10] был обнаружен новый механизм фокусировки атомов — перефокусировка эмитируемых атомов по азимутальному углу.

Основное внимание при исследовании фокусировки распыленных атомов уделялось исследованиям механизмов фокусировки по полярному углу вылета. Исследованиям фокусировки распыленных атомов по азимутальному углу посвящено достаточно небольшое число работ. В связи с этим целью на-

стоящей работы являлось изучение механизмов фокусировки эмитированных атомов по азимутальному углу.

Одной из основных задач настоящей работы являлись расчеты распределения эмитированных атомов одновременно по полярному углу и энергии (интегрального и с разрешением по азимутальному углу наблюдения). Также ставилась цель выявить факторы, влияющие на перефокусировку атомов через центр линзы, состоящей из двух атомов — ближайших к эмитируемому атому соседей в плоскости поверхности. Была также поставлена задача выявить вклад перефокусированных атомов в формирование особенностей указанных выше распределений.

1. Обзор литературы

Развитие аналитической теории эмиссии распыленных атомов связано с определенными трудностями решения задачи многих тел. Тем не менее, в [11] были получены аналитические выражения для эмиссии атома в азимутальном направлении на центр линзы из двух атомов поверхности.

Основной характеристикой действия атомной линзы является энергия фокусировки, т.е. энергия, при которой траектории падающих частиц сходятся в заданную точку или, наоборот, расходящийся пучок частиц преобразуется в параллельный. В работе [12] была рассчитана фокусировка частиц атомными линзами в кристаллах в малоугловом приближении. Энергия фокусировки была рассчитана в этой работе для потенциалов взаимодействия Борна-Майера и Мольера.

Гораздо более широко распространены работы, в которых проводится моделирование эмиссии по методу молекулярной динамики. Так, в [13] было проведено моделирование эмиссии с поверхности грани (001) Ni с использованием модели, в которой поверхность кристалла была представлена минимальным фрагментом — кольцом из четырех атомов поверхности, ближайших к узлу решетки, из которого происходила эмиссия атома с начальной энергией E_0 (рис. 3).

Вылет атома из центрального узла происходил под углом θ_0 от нормали к поверхности в направлении, задаваемом азимутальным углом φ_0 . После рассеяния на ближайших атомах для эмитируемого атома учитывается плоский потенциальный барьер, высота которого равна энергии связи $E_b = 4,435$ эВ, и может как преодолеть его, так и не преодолеть его. Преодолевший плоский барьер атом является распыленным. Его энергия равна E , а направление движения задается полярным и азимутальным углами θ и φ соответственно.

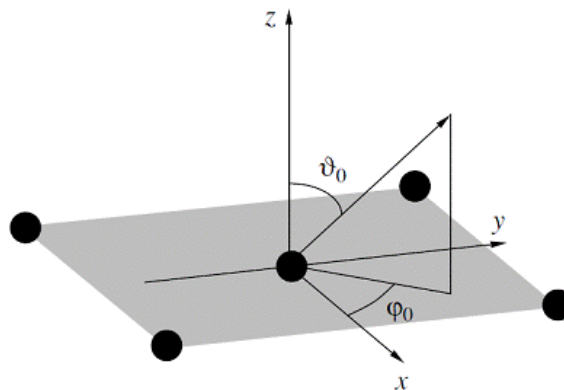


Рис. 3: Фрагмент грани (001) Ni. Показаны начальные полярный и азимутальный углы θ_0 и φ_0 для атома, эмитируемого из центрального узла.

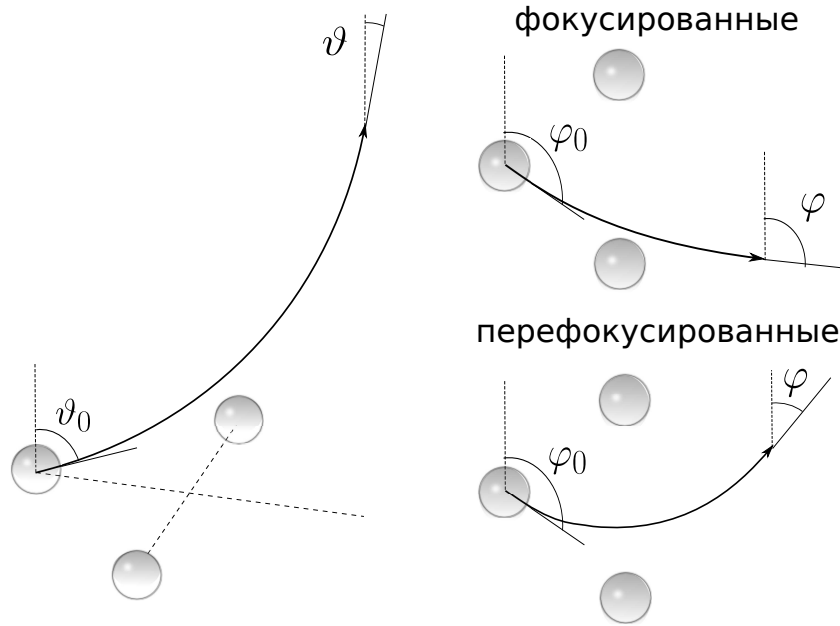


Рис. 4: Схема рассеяния эмитированного атома на линзе из двух атомов (слева) и классификация эмитированных атомов по азимутальному углу (справа).

Классификация эмитированных атомов по азимутальному углу основана на сравнении углов φ и φ_0 . Если $\varphi \approx \varphi_0$, то атом называется “собственным”. Если направления, задаваемые углами φ и φ_0 , располагаются по одну сторону от центра линзы ($\varphi_l = 90^\circ$), то атом называется *фокусированным*, в противном случае — *перефокусированным* (рис. 4).

В работе [13] показано, что для несимметричных относительно центра линзы интервалов углов φ , не слишком далеких от центра линзы, фокусировка “несобственных” атомов происходит за счет фокусированных атомов, рассеянных на ближайшем атоме линзы, и перефокусированных атомов, рассеянных на дальнем атоме линзы. Обнаружены области значений полярного и азимутального углов вылета и энергии, для которых сигнал расплывенных атомов на 100% формируется за счет эмитированных атомов, перефокусированных относительно центра линзы.

В настоящей работе проведены расчеты азимутального углового распределения эмитированных атомов (интегрального и с разрешением по полярному углу наблюдения θ и энергии E) в рамках модели, в которой учитывается окружение из 20 атомов (модель 21 атома). Одной из задач настоящей работы являлось исследование разрешения максимумов распределений фокусированных и перефокусированных расплывенных атомов в наблюдаемых распределениях расплывенных атомов с разрешением по углам вылета и энергии.

2. Теоретическая часть

2.1. Основные теоретические положения

В данной работе проводится моделирование процессов межатомного взаимодействия, которые, вообще говоря, описываются с помощью квантовой механики.

В качестве мишени выберем монокристалл никеля, имеющий гранецентрированную структуру кристаллической решетки. В условиях рассматриваемой задачи кинетическая энергия атомов никеля $1 \text{ эВ} \leq T \leq 100 \text{ эВ}$. Масса атома Ni $m = 58 \text{ а.е.м.} = 5 \cdot 10^4 \text{ МэВ}/c^2$ ($mc^2 \gg T$), поэтому длину волны де Бройля можно подсчитать, используя нерелятивистское приближение:

$$\lambda = \frac{\hbar}{p} = \frac{\hbar c}{\sqrt{2Tmc^2}} \approx 6 \cdot 10^{-3} \text{ \AA} \quad \text{для } T = 1 \text{ эВ},$$

что на 3 порядка меньше наименьшего расстояния между атомами в кристаллической решетке. Отсюда следует, что волновые эффекты можно не учитывать и считать атомы хорошо локализованными в пространстве частицами, пренебрегая квантовыми эффектами.

Таким образом, мы имеем классическую механическую систему частиц одинаковой массы, взаимодействие которых описывается эффективным потенциалом сил (которые на самом деле имеют квантовую природу). Как известно [26], такая система полностью описывается функцией Лагранжа:

$$\mathcal{L}(q, \dot{q}, t) = T(q, \dot{q}) - U(q, t),$$

где $q = (q_1, \dots, q_s)$, $\dot{q} = (\dot{q}_1, \dots, \dot{q}_s)$ — s -мерные векторы обобщенных координат и скоростей соответственно (s — число степеней свободы), t — время, а T и U — кинетическая и потенциальная энергия. При этом эволюция системы описывается уравнениями Лагранжа, которые в векторной форме имеют вид

$$\frac{d}{dt} \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{q}} - \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial q} = 0.$$

В нашем случае состояние системы частиц однозначно задается с помощью радиус-векторов частиц \mathbf{r}_i , $i = 1, \dots, N$ (N — число частиц), поэтому набор декартовых координат всех частиц является набором обобщенных координат. Несложно показать, что уравнения Лагранжа при этих условиях сводятся к уравнениям Ньютона:

$$m \frac{d^2 \mathbf{r}_i}{dt^2} = \mathbf{f}_i = - \frac{\partial U}{\partial \mathbf{r}_i}. \quad (1)$$

Здесь $U = U(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N)$ — полная потенциальная энергия системы. Для выделения взаимодействий между отдельными группами частиц ее записывают в виде многочастичного ряда

$$U(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N) = \sum_{i=1}^N V_1(\mathbf{r}_i) + \sum_{1 \leq i < j \leq N} V_2(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j) + \sum_{1 \leq i < j < k \leq N} V_3(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j, \mathbf{r}_k) + \dots$$

Здесь V_1 — взаимодействие частицы с внешним полем, V_2 — парное взаимодействие частиц, и т.д. В пространственно однородном случае $V_1(\mathbf{r}_i) = 0$, $V_2(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j) = V_2(r_{ij})$, $V_3(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j, \mathbf{r}_k) = V_3(r_{ij}, r_{jk}, \theta_{ijk})$, где

$$r_{ij} = |\mathbf{r}_{ij}| = |\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|,$$

$$\cos \theta_{ijk} = \frac{\mathbf{r}_{ij} \cdot \mathbf{r}_{kj}}{r_{ij} r_{jk}}.$$

Для упрощения задачи многочастичный ряд можно обрезать, оставив только парное взаимодействие. В дальнейшем везде будем опускать индекс у V_2 , подразумевая парное взаимодействие. Выражение для силы \mathbf{f}_i имеет вид

$$\mathbf{f}_i = \sum_{j \neq i} \mathbf{f}_{ij}, \quad \mathbf{f}_{ij} = -\frac{\partial V(r_{ij})}{\partial \mathbf{r}_i} = -\frac{\partial V}{\partial r_{ij}} \frac{\mathbf{r}_{ij}}{r_{ij}} = -\frac{\partial V}{\partial r_{ij}} \mathbf{e}_{ij}. \quad (2)$$

В данной работе на маленьких расстояниях использовался обратноквадратичный потенциал, а на средних — потенциал Борна-Майера:

$$V(r) = \begin{cases} \frac{C}{r^2}, & r < r_0 \\ A \exp\left(-\frac{r}{B}\right), & r > r_0. \end{cases}$$

Выражение для производной имеет вид

$$\frac{\partial V}{\partial r} = \begin{cases} -\frac{2C}{r^3}, & r < r_0 \\ -\frac{A}{B} \exp\left(-\frac{r}{B}\right), & r > r_0. \end{cases}$$

Для облегчения интегрирования при $r > r_C$ производная полагается равной нулю, и “поднимается” на величину $(A/B) \exp(-r_C/B)$, для сохранения непрерывности.

2.2. Модель плоского потенциального барьера

При моделировании эмиссии рассматривались только силы отталкивания, так как при взаимодействии вылетающего атома с ближайшим окружением важно именно отталкивание. Напротив, при взаимодействии эмитированного атома с остальными атомами поверхности монокристалла существенную роль играют силы притяжения. Для учета этих сил использована модель плоского потенциального барьера величины E_b , где E_b — энергия связи атома на поверхности кристалла.

Притяжение учитывалось на стадии обработки результатов следующим образом. Пусть E_i, θ_i — энергия и полярный угол вылета атома после рассеяния на атомах поверхности до прохождения плоского барьера величины E_b , а E, θ — соответственно после. Из закона сохранения энергии и импульса получаем выражения:

$$E = E_i - E_b, \quad (3)$$

$$\cos \theta = \sqrt{\frac{E_i \cos^2 \theta_i - E_b}{E}}. \quad (4)$$

Таким образом, после прохождения потенциального барьера энергия атома уменьшается, и его траектория составляет больший угол с нормалью к поверхности ($\theta > \theta_i$).

Из этих формул видно, что атом может покинуть поверхность монокристалла (распылиться) только если:

- во-первых, его энергия E_i достаточна для преодоления барьера, то есть $E_i > E_b$;
- во-вторых, угол θ_i должен быть меньше некоторого критического угла $\theta_{кр}$, который определяется из условия

$$\cos^2 \theta_{кр} = \frac{E_b}{E_i}.$$

При невыполнении этих условий атом захватывается кристаллом и либо занимает вакансию на поверхности, либо становится адатомом.

3. Численное моделирование

3.1. Метод численного интегрирования

В механике Ньютона мы имеем дело с уравнениями второго порядка вида

$$\ddot{x} = f(x, \dot{x}, t).$$

Существует довольно много численных методов для интегрирования таких уравнений, однако большинство из них не подходит для моделирования методом молекулярной динамики (МД) [25]. Например, широко известный метод Рунге-Кутты требует вычисления силы (т.е. функции f) несколько раз на одном шаге, что в МД является крайне неэффективным. Поэтому в настоящей работе использовался метод прогноза и коррекции (метод предиктор-корректор).

В методах прогноза и коррекции в том или ином виде используется информация, полученная на предыдущих временных шагах. Такой информацией может быть значение ускорения в предыдущие моменты времени. Это реализовано в так называемом многошаговом методе Адамса.

Интегрирование состоит из двух частей. Сначала координата и скорость предсказываются в момент времени $t + h$ на основе значений ускорения в моменты времени $t, t - h, \dots$, а потом на основе предсказанных значений считается значение ускорения и вносятся коррективы в $x(t + h)$ и $\dot{x}(t + h)$.

Формула предсказания имеет вид:

$$P(x) : x(t + h) = x(t) + h\dot{x}(t) + h^2 \sum_{i=1}^{k-1} \alpha_i f(t + [1 - i]h). \quad (5)$$

Коэффициенты α_i (веса, с которыми берутся значения f для предсказания), определяются из того, что формула (5) является точной для функции вида $x(t) = t^p$ при $p \leq k$ (при этом роль f играет \ddot{x}). Подставляя этот вид в (5), получаем тождество

$$(t + h)^p = t^p + hpt^{p-1} + h^2 \sum_{i=1}^{k-1} \alpha_i p(p-1)(t + [1 - i]h)^{p-2}.$$

Переобозначим $q = p - 2$ и подставим $t = 0, h = 1$. Получим систему линейных уравнений

$$\sum_{i=1}^{k-1} (1 - i)^q \alpha_i = \frac{1}{(q + 1)(q + 2)}, \quad q = 0, \dots, k - 2.$$

Таблица 1: Коэффициенты метода предиктор-корректор.

$k = 4 (\times 1/24)$	1	2	3	
$P(x)$	19	-10	3	
$P(\dot{x})$	27	-22	7	
$C(x)$	3	10	-1	
$C(\dot{x})$	7	6	-1	
$k = 5 (\times 1/360)$	1	2	3	4
$P(x)$	323	-264	159	-38
$P(\dot{x})$	502	-621	396	-97
$C(x)$	38	171	-36	7
$C(\dot{x})$	97	114	-39	8

В общем случае локальная ошибка составляет $\mathcal{O}(h^{k+1})$.

Аналогично, имеют место формулы предсказания для \dot{x}

$$P(\dot{x}) : \dot{x}(t+h) = \dot{x}(t) + h \sum_{i=1}^{k-1} \alpha'_i f(t + [1-i]h) \quad (6)$$

с коэффициентами

$$\sum_{i=1}^{k-1} (1-i)^q \alpha'_i = \frac{1}{q+1}, \quad q = 0, \dots, k-2.$$

После вычисления $f(t+h)$ на основе предсказанных значений вносят поправки (коррекцию) с помощью формул

$$C(x) : x(t+h) = x(t) + h\dot{x}(t) + h^2 \sum_{i=1}^{k-1} \beta_i f(t + [2-i]h), \quad (7)$$

$$C(\dot{x}) : \dot{x}(t+h) = \dot{x}(t) + h \sum_{i=1}^{k-1} \beta'_i f(t + [2-i]h). \quad (8)$$

Линейные системы для коэффициентов получаются из таких же соображений и имеют вид

$$\sum_{i=1}^{k-1} (2-i)^q \beta_i = \frac{1}{(q+1)(q+2)}, \quad \sum_{i=1}^{k-1} (2-i)^q \beta'_i = \frac{1}{q+1}, \quad q = 0, \dots, k-2.$$

Коэффициенты для $k = 4$ и $k = 5$ представлены в таблице 1. В целях экономии счетного времени в данной работе использовался порядок $k = 2$

(так называемый метод “средней силы”). Ошибка метода при этом составляет $\mathcal{O}(h^2)$. Коэффициенты вычисляются по указанным выше формулам. При этом $\alpha = \beta = 1/2$, $\alpha' = \beta' = 1$, что совпадает с коэффициентами разложения в формуле Тейлора.

3.2. Модель расчета

Была рассчитана эмиссия атомов с поверхности грани (001) Ni. Атом эмитировался с энергией E_0 под углами θ_0 и φ_0 . В модели I поверхность кристалла моделировалась 20 атомами поверхности (рис. 5), ближайшими к узлу решетки, из которого происходила эмиссия атома (модель 21 атома). Подобная модель была использована в работе [21]. В модели II поверхность кристалла была представлена минимальным фрагментом — кольцом из четырех атомов поверхности, ближайших к узлу решетки, из которого происходила эмиссия атома (модель 5 атомов). Эта модель также использовалась в ряде работ, в частности в работе [13].

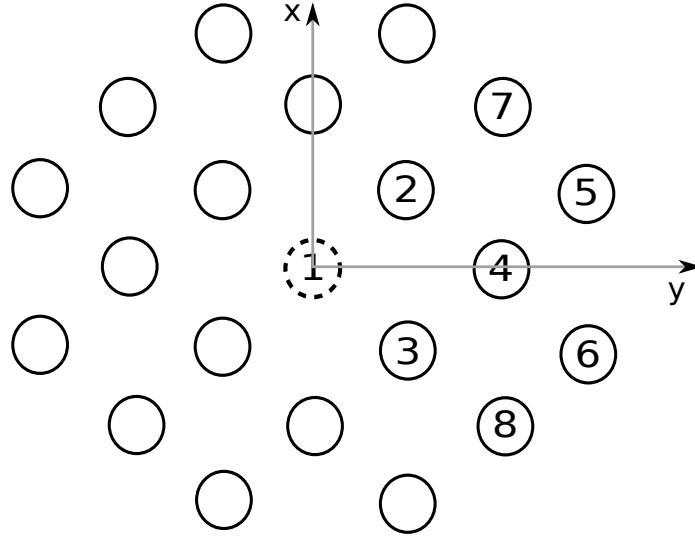


Рис. 5: Фрагмент грани (001) Ni. Вылетающий атом обозначен пунктиром. Ось z направлена от наблюдателя перпендикулярно плоскости рисунка.

На этапе получения данных проводилось накопление статистики эмиссии следующим образом. Начальная энергия E_0 менялась в диапазоне от 0,5 эВ до 100 эВ, угол φ_0 — от 0° до 180° , θ_0 — от 0° до 90° . Для угла θ_0 использовался шаг по величине $1 - \cos \theta_0$ — это связано с тем, что в эксперименте измеряется число распыленных атомов в телесном угле

$$d\Omega = \sin \theta d\theta d\varphi = d(1 - \cos \theta) d\varphi,$$

Таблица 2: Шаги моделирования для малой и большой статистики.

	ΔE_0 , эВ	$\Delta\varphi_0$	$\Delta(\cos\theta_0)$
Малая статистика	0.1	3°	1/45
Большая статистика	0.01	0.5°	1/450

поэтому для сохранения величины апертуры $\Delta\Omega$ необходим постоянный шаг $\Delta(1 - \cos\theta)$.

Было проведено две серии компьютерного моделирования (табл. 2). В первой серии (далее — малая статистика) шаг по энергии E_0 составил 0,1 эВ, шаг по φ_0 — 3° , шаг по $\cos\theta_0$ составил 1/45. Во второй серии (далее — большая статистика) шаг по энергии E_0 составил 0,01 эВ, шаг по φ_0 — 0.5° , шаг по $\cos\theta_0$ составил 1/450.

Для интегрирования уравнений движения использовался метод прогноза и коррекции порядка $k = 2$ (метод “средней силы”).

Результаты моделирования были получены на суперкомпьютерном кластере “Ломоносов” [27]. Программа была написана на языке Fortran 90 с использованием Intel MPI. Применялось распараллеливание по параметру (энергии).

В обсуждении результатов, если это не указано особо, подразумевается использование модели 21 атомов (модель I), начальной функции распределения $\cos\theta_0/E_0^2$ для обработки данных, полученных по большой статистике.

4. Обсуждение результатов

4.1. Распределения распыленных атомов по энергии E и $1 - \cos \theta$

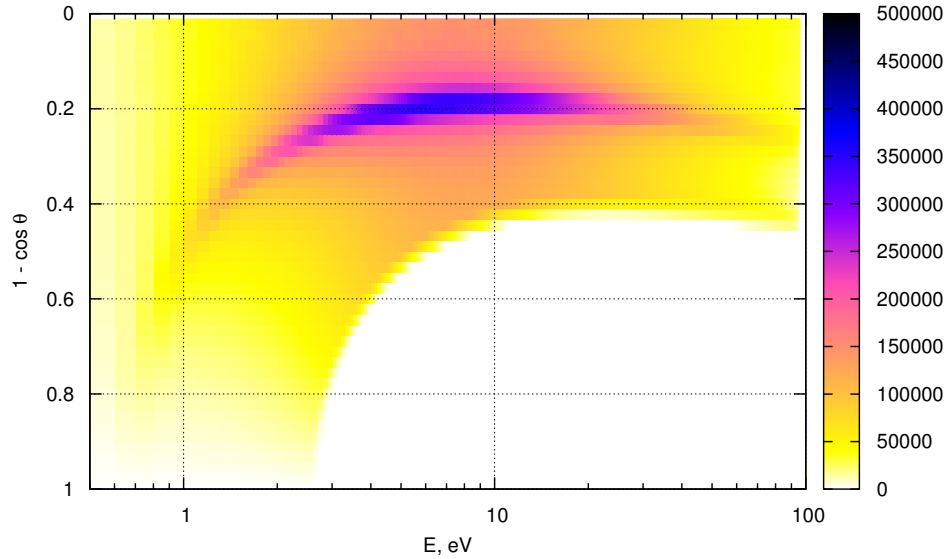


Рис. 6: Распределение распыленных атомов по E и $1 - \cos \theta$ для всех углов φ .

На рис. 6 представлено распределение распыленных атомов по энергии E и $1 - \cos \theta$ для всех азимутальных углов φ . Отметим два важных обстоятельства:

- максимум в окрестности $1 - \cos \theta = 0,2$;
- область тени, при больших E и больших $1 - \cos \theta$.

Распределение распыленных атомов по энергии E и $1 - \cos \theta$ в азимутальном направлении на центр линзы из двух атомов представлено на рис. 7. Интересно отметить, что оно имеет ту же область тени, что и на рис. 6, и максимум сдвинут вплотную к границе этой области. Таким образом, большая часть распыленных атомов в этом направлении имеет энергию E и направление $1 - \cos \theta$, близкие к критическим, которые удовлетворяют уравнению границы тени $1 - \cos \theta = f(E)$.

Разница между распределениями в азимутальном направлении на центр линзу и на ближайший атом поверхности (рис. 8) заключается в существенно большей области тени во втором случае. Отклонение атомов в направлении

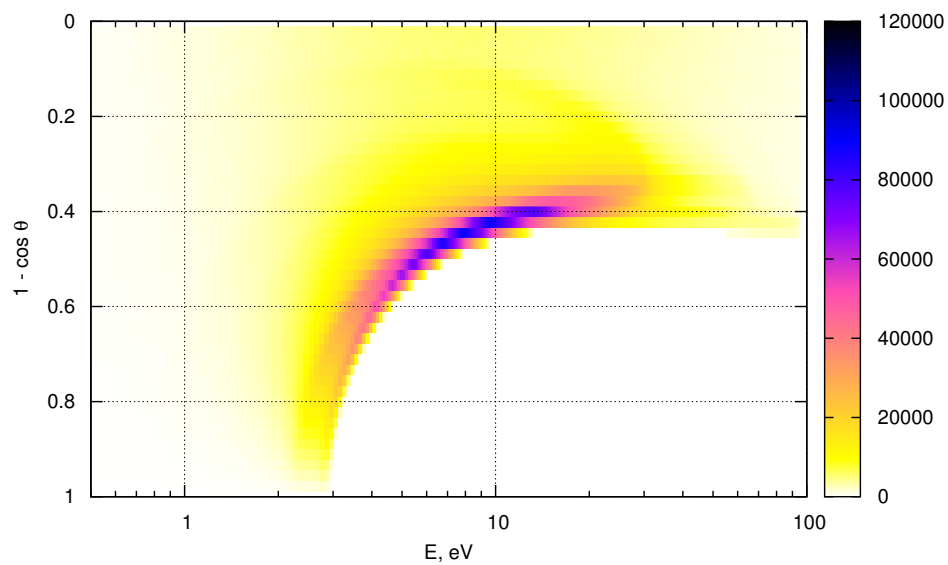


Рис. 7: Распределение распыленных атомов по E и $1 - \cos \theta$ для углов φ $[88, 5^\circ, 91, 5^\circ]$.

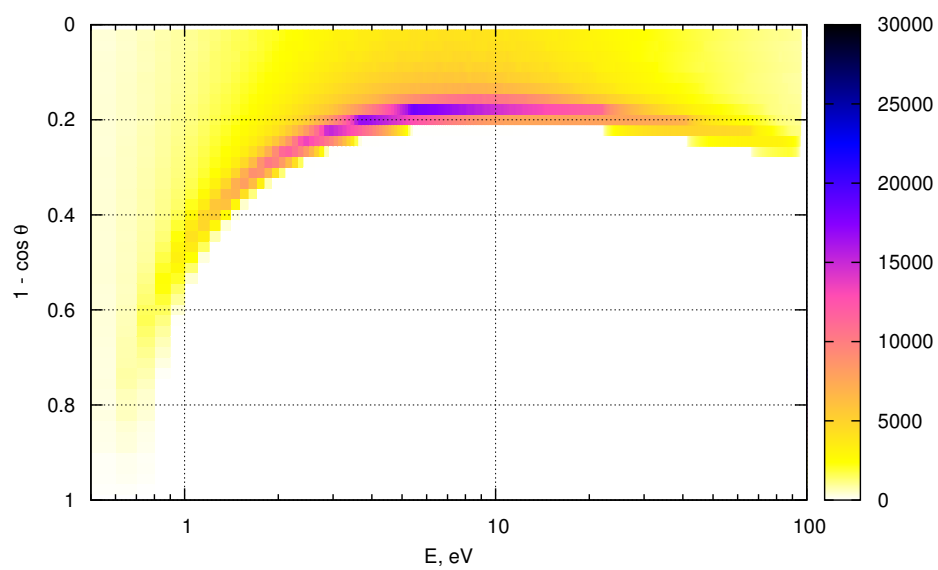


Рис. 8: Распределение распыленных атомов по E и $1 - \cos \theta$ для углов φ $[43, 5^\circ, 46, 5^\circ]$.

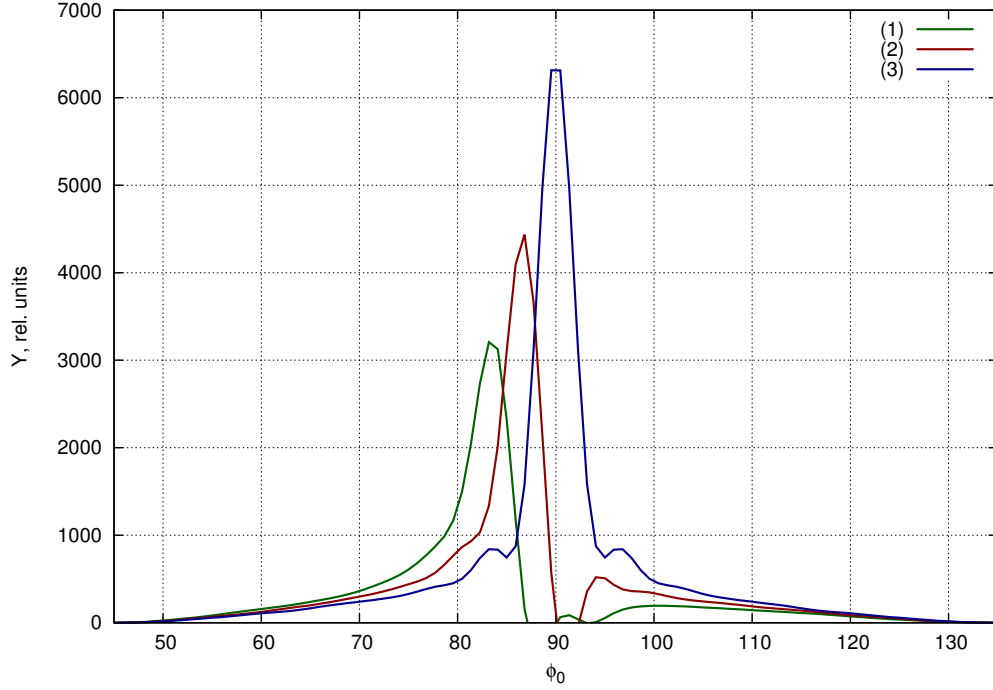


Рис. 9: Распределения эмитированных атомов по азимутальному углу φ_0 для всех энергий E и полярных углов вылета θ , наблюдаемых в интервалах углов φ $[88, 5^\circ, 91, 5^\circ]$ (1), $[85, 5^\circ, 88, 5^\circ]$ (2), $[82, 5^\circ, 85, 5^\circ]$ (3) (расчеты по малой статистике). При $\varphi_0 > 90^\circ$ отчетливо наблюдается перефокусировка атомов через центр линзы.

нормали к поверхности при вылете в направлении на линзу из двух ближайших атомов меньше, чем при вылете в направлении на ближайший атом поверхности, в первом случае его траектория менее сильно “подгибается” в направлении к нормали к поверхности.

Особенности приведенных здесь распределений воспроизводят известные экспериментальные результаты, например, особенности наблюдаемых распределений распыленных атомов по полярному углу θ с разрешением по энергии E — немонотонный сдвиг максимума с увеличением энергии E [10, 22, 23].

4.2. О многозначности распределений перефокусированных атомов

Перейдем теперь собственно к распределениям перефокусированных атомов по азимутальному и полярному углам и энергии. На рис. 9 представлены распределения для конкретных интервалов угла φ (бинов) для всех полярных углов и энергии. Видно, что существуют атомы, эмитированные под углами $\varphi_0 > 90^\circ$, то есть по другую сторону от направления на центр линзы относительно интервала углов наблюдения φ . При этом атомы могут пере-

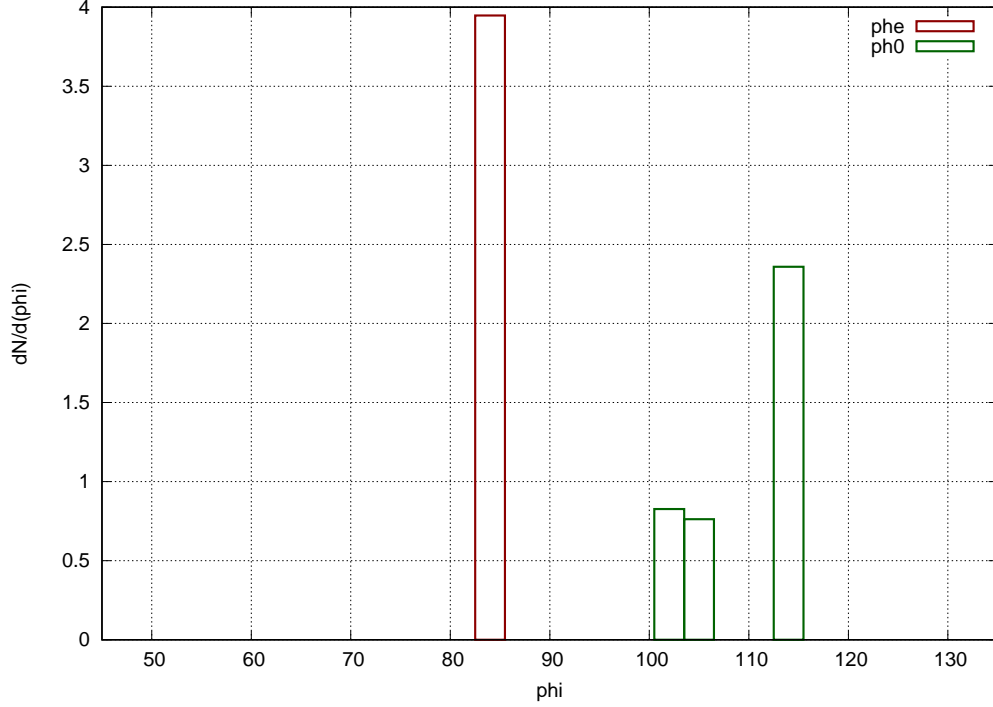


Рис. 10: Дифференциальные по начальному азимутальному углу φ_0 (ph0) и азимутальному углу наблюдения φ (phe) распределения эмитированных атомов для энергии $E 2,6 \pm 0,1$ эВ и полярного угла вылета $\theta [70, 5^\circ, 71, 9^\circ]$, наблюдаемых в интервале углов $\varphi [82, 5^\circ, 85, 5^\circ]$ (расчеты по малой статистике).

фокусироваться, имея начальный угол φ_0 практически вплотную к центру линзы.

Вклад атомов, перефокусированных через центр линзы, наблюдается также в формировании трижды дифференциальной функции распределения, например, азимутальных распределений эмитированных атомов с одновременным разрешением по $1 - \cos \theta$ и энергии E . Обнаружены области полярного и азимутального углов вылета θ и φ и энергии E для трижды дифференциальной функции распределения эмитированных атомов, для которых сигнал распыленных атомов на 100% формируется за счет перефокусированных атомов.

На рис. 10 представлено трижды дифференциальное распределение по углам φ и φ_0 для интервалов полярного угла $\theta [70, 5^\circ, 71, 9^\circ]$ и энергии $E 2,6 \pm 0,1$ эВ. В отличие от модели 5 атомов [13, 24], перефокусированные атомы образуются из существенно разных интервалов углов φ_0 . Область нулевого сигнала разделяет перефокусированные атомы на две группы. Таким образом, наблюдается многозначность сигнала перефокусированных атомов по начальному углу φ_0 , так как атомы, наблюдаемые в одном и том же интервале углов φ , эмитируются с существенно разными углами φ_0 . Многозначность по

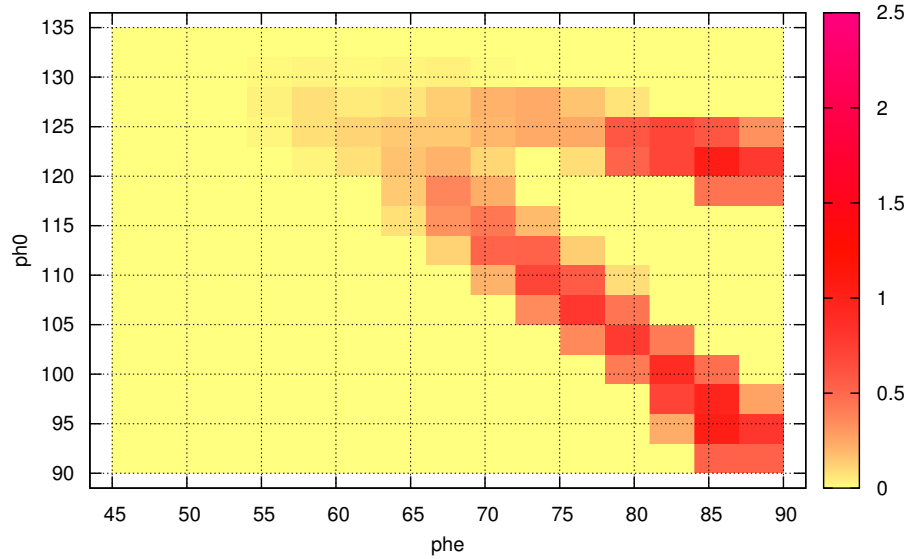


Рис. 11: Распределение перефокусированных атомов по начальному азимутальному углу φ_0 и азимутальному углу наблюдения φ для углов θ $[56, 3^\circ, 57, 8^\circ]$ и энергии E $2,5 \pm 0,4$ эВ, в модели 21 атома (расчеты по малой статистике).

φ_0 может означать, что существует два разных механизма перефокусировки для различных интервалов углов φ_0 .

Распределение перефокусированных атомов одновременно по начальному азимутальному углу φ_0 и азимутальному углу наблюдения φ представлено на рис. 11. Наблюдается два хребта (максимума числа перефокусированных атомов) в этом распределении. Оказалось, что имеет место многозначность перефокусированных атомов не только по начальному углу φ_0 , но и по углу наблюдения φ .

Итак, рассмотрение особенностей перефокусировки приводит нас к важному выводу о многозначности. Ее важно учитывать при обратном преобразовании углового и энергетического распределений распыленных атомов, получаемых экспериментально при анализе поверхности, в распределениях эмитированных атомов по начальным углам и энергии.

Чтобы выяснить, почему наблюдается многозначность, были построены распределения сигнала одновременно по E и φ_0 рассчитанные по моделям 5 и 21 атомов (рис. 12, 13). Оказалось, что перефокусированные атомы очень чувствительны к выбору модели, чего нельзя сказать о фокусированных атомах. В модели 21 атома высокоэнергетическая часть распределения перефокусированных атомов, наблюдаемая в модели 5 атомов, погибает в сторону более

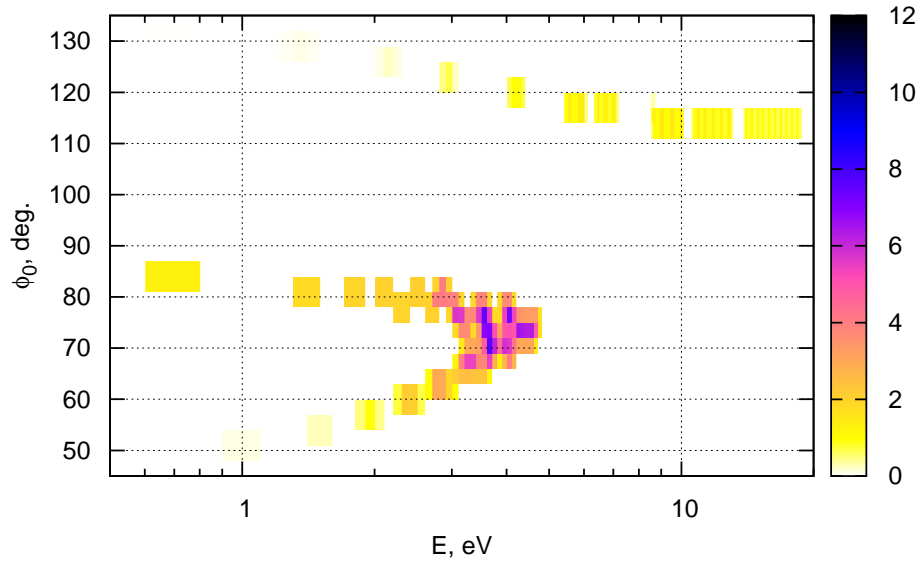


Рис. 12: Дифференциальное распределение по начальному азимутальному углу φ_0 и энергии E эмитированных атомов для полярного угла вылета θ $[56, 3^\circ, 57, 8^\circ]$, наблюдаемых в интервале углов φ $[82, 5^\circ, 85, 5^\circ]$, по модели 5 атомов (расчеты по малой статистике). В нижней части рисунка — фокусированные атомы, в верхней — перефокусированные.

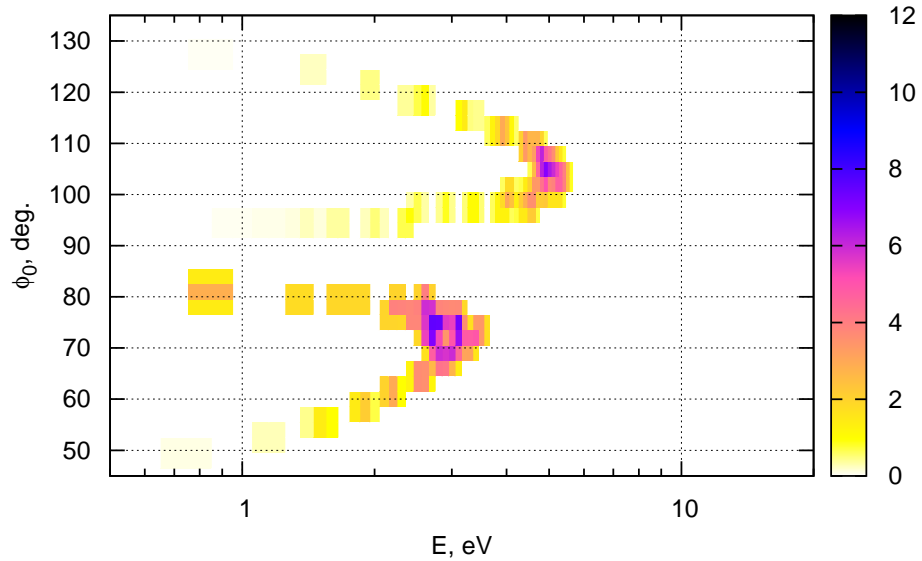


Рис. 13: Дифференциальное распределение по начальному азимутальному углу φ_0 и энергии E эмитированных атомов для полярного угла вылета θ $[56, 3^\circ, 57, 8^\circ]$, наблюдаемых в интервале углов φ $[82, 5^\circ, 85, 5^\circ]$, по модели 21 атома (расчеты по малой статистике). В нижней части рисунка — фокусированные атомы, в верхней — перефокусированные.

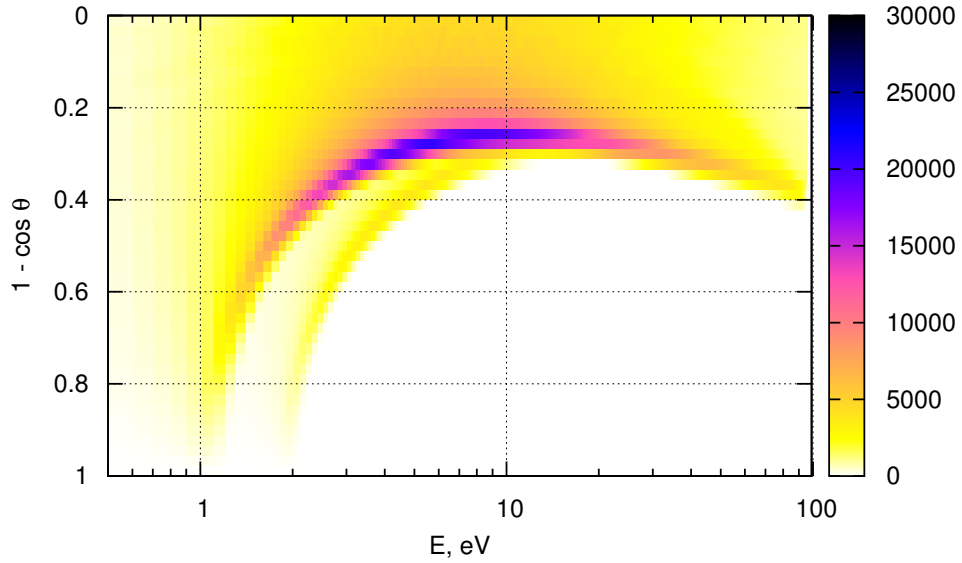


Рис. 14: Распределения эмитированных атомов по энергии E и $1 - \cos \theta$, наблюдаемых в интервале азимутальных углов φ $[76, 5^\circ, 79, 5^\circ]$. Верхний хребет образован в основном фокусированными атомами, нижний — только перефокусированными атомами.

низких энергий E и углов φ_0 , более близких к азимутальному направлению на центр линзы [35]. Возникает область нулевого сигнала между ветвями распределения перефокусированных атомов, размер которой увеличивается при уменьшении энергии E [33].

Посредством сравнения с моделью 5 атомов и исследования отдельных траекторий было показано [30], что для перефокусировки атомов верхней ветви существенно рассеяние на ближайшем атоме линзы, а для перефокусировки атомов нижней ветви — также рассеяние на атоме, расположенном за линзой. Таким образом, в основе многозначности сигнала по углу φ_0 лежит многократное рассеяние эмитированного атома на атомах поверхности.

4.3. О наблюдаемости перефокусированных распыленных атомов

На рис. 14 представлено распределение распыленных атомов по энергии и полярному углу для несимметричного относительно направления $\langle 100 \rangle$ интервала азимутального угла φ . Оказалось, что в распределениях с одновременным разрешением по энергии и полярному углу для фиксированных интервалов углов φ отчетливо различаются отдельные хребты — максимумы распределений для фокусированных и перефокусированных атомов. Макси-

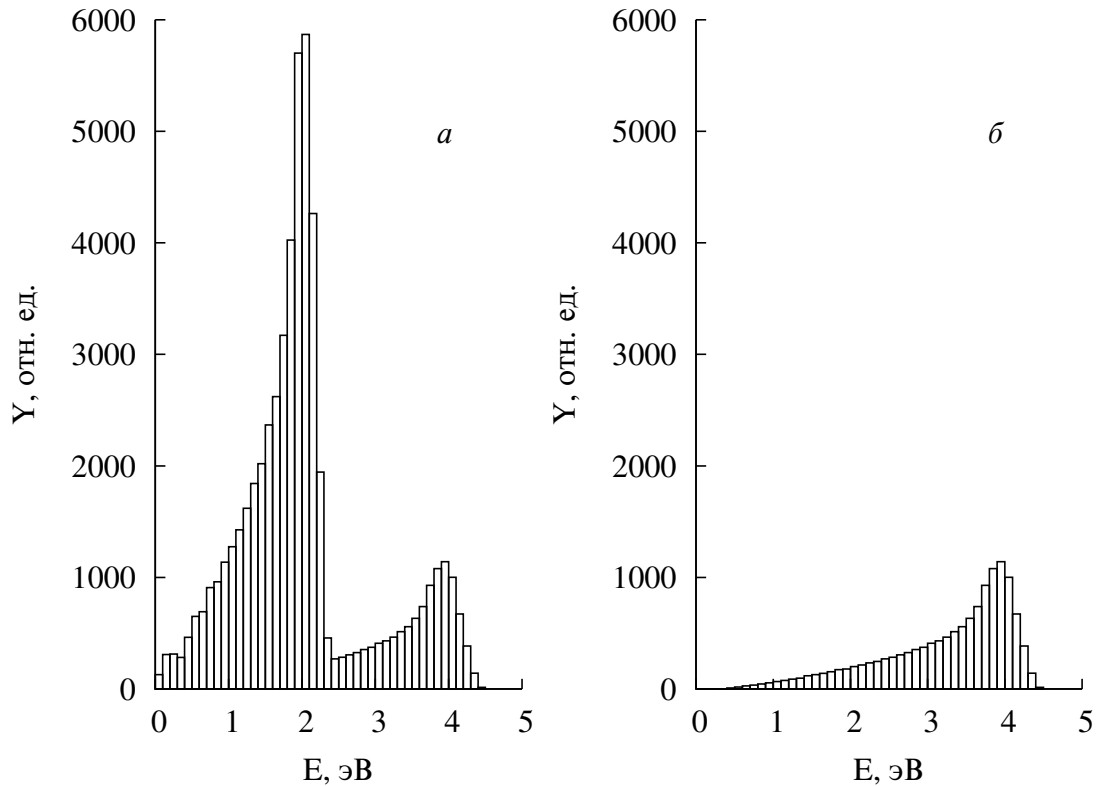


Рис. 15: Распределения всех распыленных атомов (а) и только перефокусированных распыленных атомов (б) по энергии E при эмиссии с грани (001) Ni для полярных углов вылета θ [$56.3^\circ, 57.8^\circ$] и интервала азимутальных углов φ [$76.5^\circ, 79.5^\circ$].

мум распределения перефокусированных атомов наблюдается в области энергии и полярных углов, при которых нет вылета других групп атомов. Перефокусированные атомы на 100% формируют наблюдаемый сигнал. Таким образом, в экспериментах с разрешением по углам и энергии оказывается принципиально возможным выделить отдельно сигнал только перефокусированных атомов.

Распределение распыленных атомов по энергии для фиксированных интервалов полярного и азимутального углов (рис. 15) состоит из вкладов фокусированных атомов — левый максимум, перефокусированных атомов — правый максимум, и небольшого вклада собственных атомов при энергиях E от 0 до 1,2 эВ. Кроме того, наблюдается высокоэнергетический максимум в распределении эмитированных атомов по энергии с разрешением по полярному и азимутальному углам (см. также [18]), наблюдаемый при энергиях $E > 20$ эВ (на рис. 15 не показан), который образован фокусированными, а не перефокусированными атомами.

5. Выводы

1. С помощью модели молекулярной динамики исследованы особенности фокусировки и перефокусировки атомов, эмитированных с поверхности грани (001) Ni, по азимутальному углу при формировании распределений распыленных атомов с разрешением одновременно по полярному углу и энергии. Исследованы механизмы формирования особенностей этих распределений.
2. В азимутальном направлении узел — центр линзы из двух ближайших атомов поверхности различие распределений, рассчитанных по моделям 21 и 5 атомов, связано с рассеянием эмитируемых атомов на атоме, расположенном за линзой, который присутствует только в модели 21 атома. В модели 21 атома перефокусированные атомы могут образоваться ближе к центру линзы. Этот эффект обусловлен рассеянием эмитированных атомов последующими атомами за линзой.
3. Рассчитаны дифференциальные распределения распыленных атомов по начальному углу φ_0 и энергии E . Обнаружена многозначность сигналов фокусированных и перефокусированных атомов по углу вылета φ_0 в модели 21 атома и фокусированных атомов по углу вылета φ_0 в модели 5 атомов при сравнительно небольших значениях энергии E . Показано, что многозначность сигнала перефокусированных атомов связана с двумя различными механизмами рассеяния перефокусированных атомов для различных углов φ_0 .
4. Выявлены области значений полярного и азимутального углов вылета θ и φ и энергии E , для которых сигнал распыленных атомов на 100% формируется за счет эмитированных атомов, перефокусированных относительно центра линзы.
5. Обнаружено, что в распределениях с одновременным разрешением по энергии и полярному углу для фиксированных интервалов углов φ отчетливо различаются отдельные хребты — максимумы распределений для фокусированных и перефокусированных атомов. Показано, что в экспериментах с разрешением по углам и энергии оказывается принципиально возможным выделить отдельно сигнал только перефокусированных распыленных атомов.

Список литературы

1. Grove W.R. *On some anomalous cases of electrical decomposition* // Phil. Mag. 1853. V. 5. No. 203. P. 203-209.
2. Wehner G.K. *Sputtering of metal single crystals by ion bombardment* // J. Appl. Phys. 1955. V. 26. No. 8. P. 1056-1057.
3. Silsbee R.H. *Focusing in collision problems in solids* // J. Appl. Phys. 1957. V. 28. No. 11. P. 1246-1250.
4. Lehmann Chr., Sigmund P. *On the mechanism of sputtering* // Phys. Stat. Sol. 1966. V. 16. No. 2. P. 507-511.
5. Harrison D.E., Johnson J.P., Levy N.S. *Spot patterns and Silsbee chains of a Cu single crystal* // Appl. Phys. Lett. 1966. V. 8. No. 2. P. 33-36.
6. Nelson R.S., Thompson M.W. *Atomic collision sequences in crystals of copper, silver and gold revealed by sputtering in energetic ion beams* // Proc. Roy. Soc. 1961. V. A259. No. 1299. P. 458-479.
7. Самойлов В.Н., Корсакова О.С., Елесин В.А. *Механизмы образования угловых распределений атомов, распыленных с граней (001) и (111) Ni* // Изв. РАН. Сер. физ. 2000. Т. 64. № 4. С. 821-826.
8. Самойлов В.Н. *К вопросу о корректности описания углового распределения распыленных атомов в рамках аналитических моделей распыления аморфных мишеней* // Изв. АН СССР. Сер. физ. 1990. Т. 54. № 7. С. 1283-1287.
9. Шпиньков В.И., Самойлов В.Н. *О фокусировке атомов, распыленных с грани (001) Ni, в случае гауссовых пучков эмитируемых атомов* // Поверхность. Рентген., синхротр. и нейтрон. исслед. 2009. № 3. С. 73-79.
10. Корсакова О.С., Алешкевич В.А., Самойлов В.Н., Никитин А.М. *Исследования поверхностного механизма фокусировки атомов, эмитируемых с поверхности грани (001) Ni, методом молекулярной динамики* // Поверхность. Рентген., синхротр. и нейтрон. исслед. 1997. № 2. С. 77-92.
11. Туляков Н.Ю., Левкович-Маслюк Ф.Л., Самойлов В.Н. *Аналитические расчеты эмиссии атомов с поверхности граней (111) Ni, (001) Ni и (001) Au в рамках трехмерной модели* // Поверхность. Рентген., синхротр. и нейтрон. исслед. 2011. № 4. С. 34-46.

12. Шульга В.И. *Фокусировка частиц атомными линзами в кристаллах* // Вестн. Моск. ун-та. Серия 3. Физика. Астрономия. 2002. № 3. С. 47-50.
13. Самойлов В.Н., Носов Н.В. *Эффекты фокусировки по азимутальному углу атомов, эмитированных с граней (001) Ni и (001) Au* // Поверхность. Рентген., синхротр. и нейтрон. исслед. 2014. № 3. С. 81.
14. Sigmund P. *Recollections of fifty years with sputtering* // Thin Solid Films. V. 520. No. 19. P. 6031-6049.
15. Shulga V., Sigmund P. *Simulation of energy-dependent isotope sputtering* // Nucl. Instr. and Meth. in Phys. Res. 1995. V. B103. P. 383-386.
16. Shulga V. *The density and binding effects in sputtering by ions of widely varying masses* // Nucl. Instr. and Meth. in Phys. Res. 2002. V. B195. No. 3-4. P. 291-301.
17. Самойлов В.Н., Гурко И.Б., Башмаков А.П., Судоргин А.С. *О некоторых новых особенностях распыления атомов, эмитированных с поверхности однокомпонентных и двухкомпонентных монокристаллов* // Материалы 16-й Международной конференции “Взаимодействие ионов с поверхностью (ВИП-2003)”, Звенигород, 25–29 августа 2003. Т. 1. Москва, 2003. С. 178–179.
18. Самойлов В.Н., Дехтяр К.В. *О некоторых новых особенностях распыления грани (111) Ni с одновременным угловым и энергетическим разрешением* // Известия РАН. Сер. физ. 2001. Т. 65. № 9. С. 1324–1327.
19. Shapiro M. H. *Kinetic energy loss in sputtering* // Nucl. Instr. and Meth. in Phys. Res. 1989. V. B42. No. 2. P. 290-292.
20. Chakarov I.R., Cherepin V.T., Karpuzov D.S., Kosyachkov A.A., Vichev R.G. *Angle and energy distributions of sputtered particles from molybdenum (110) surfaces* // Nucl. Instr. and Meth. in Phys. Res. 1989. V. B39. No. 1-4. P. 81-85.
21. Samoilo V.N., Tatur A.E., Yastrzhembsky V.I. *Computer simulation studies of preferential sputtering of Ni₄Mo (001) single crystal* // Radiat. Eff. Def. Solids. 1997. V. 142. No 1–4. P. 323.
22. van Veen A. *Sputtering and Scattering by Interaction of Low Energy Noble Gas Ions with Monocrystalline Metal Surfaces*: Ph. D. Thesis. Univ. Utrecht, Utrecht, Netherlands, 1979. 177 p.

23. Корсакова О.С. *Механизмы формирования угловых и энергетических распределений атомов, распыленных с поверхности кристаллов при ионной бомбардировке*. Дис. ... канд. физ.-мат. наук. М.: МГУ, 1997. 183 с.
24. Носов Н.В. *Эффекты фокусировки по азимутальному углу атомов, эмитируемых с поверхности граней (001) Ni и (001) Au*. Дипломная работа. М.: Физический факультет МГУ, 2011. 57 с.
25. Рапапорт Д.К. *Искусство молекулярной динамики*. М.–Ижевск: Ижевский институт компьютерных исследований, 2012. 632 с.
26. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. *Курс теоретической физики в 10 томах. Т.1. Механика*. 4-е изд. М.: Наука. Гл. ред. физ.-мат. лит., 1988. 216 с.
27. Воеводин Вл.В., Жуматий С.А., Соболев С.И., Антонов А.С., Брызгалов П.А., Никитенко Д.А., Стефанов К.С., Воеводин Вад.В. *Практика суперкомпьютера “Ломоносов” // Открытые системы*. 2012. № 7. С. 36-39.
28. Мусин А.И., Самойлов В.Н. *Эффект перефокусировки по азимутальному углу атомов, эмитированных с поверхности грани (001) Ni: сравнение двух моделей расчета // Тезисы докладов 44-й Международной Тулиновской конференции “Физика взаимодействия заряженных частиц с кристаллами”, Москва, 27–29 мая 2014*. М.: Университетская книга, 2014. С. 73. Устный доклад.
29. Самойлов В.Н., Мусин А.И. *О вкладе в распыление перефокусированных атомов при эмиссии с поверхности граней (001) Ni и (001) Au // Тезисы докладов 44-й Международной Тулиновской конференции “Физика взаимодействия заряженных частиц с кристаллами”, Москва, 27–29 мая 2014*. М.: Университетская книга, 2014. С. 88. Стендовый доклад.
30. Мусин А.И., Самойлов В.Н. *О многозначности сигнала перефокусированных атомов, эмитированных с поверхности грани (001) Ni // Сборник тезисов “Материалы и технологии XXI века”, Казань, 11–12 декабря 2014*. Казань: Изд-во Казанского федерального университета, 2014. С. 276. / [Электронный ресурс] – 1 электрон. опт. диск (CDROM), 12 см. Стендовый доклад.
31. Самойлов В.Н., Мусин А.И. *О наблюдаемости перефокусированных распыленных атомов при эмиссии с поверхности грани (001) Ni // Тезисы докладов 45-й Международной Тулиновской конференции “Физика взаимодействия заряженных частиц с кристаллами”, Москва, 26–28 мая 2015*. М.: Университетская книга, 2015. С. 86. Стендовый доклад.

32. Мусин А.И., Самойлов В.Н. *О значениях показателя степени в зависимости коэффициента распыления от энергии связи при эмиссии атомов с грани (001) Ni* // Тезисы докладов 45-й Международной Тулиновской конференции “Физика взаимодействия заряженных частиц с кристаллами”, Москва, 26–28 мая 2015. М.: Университетская книга, 2015. С. 85. Устный доклад.
33. Самойлов В.Н., Мусин А.И. *Об особенностях распределений перефокусированных атомов, эмитированных с грани (001) Ni, по углам и энергии* // Сборник: Труды 22-й Международной конференции “Взаимодействие ионов с поверхностью (ВИП 2015)”, Москва, 20–24 августа 2015. Т. 1. С. 143-146. Стендовый доклад.
34. Мусин А.И., Самойлов В.Н. *Об изменении показателя степени в зависимости коэффициента распыления от энергии связи при магнитном фазовом переходе* // Сборник тезисов I Международной школы-конференции студентов, аспирантов и молодых ученых “Биомедицина, материалы и технологии XXI века”, Казань, 25–28 ноября 2015. Казань: Изд-во Казанского федерального университета, 2015. С. 490. Стендовый доклад.
35. Самойлов В.Н., Мусин А.И. *Перефокусированные атомы при распылении поверхности монокристалла: загадки и реальность* // Сборник тезисов I Международной школы-конференции студентов, аспирантов и молодых ученых “Биомедицина, материалы и технологии XXI века”, Казань, 25–28 ноября 2015. Казань: Изд-во Казанского федерального университета, 2015. С. 539. Стендовый доклад.
36. Самойлов В.Н., Мусин А.И., Ананьева Н.Г. *Об особенностях распределений перефокусированных распыленных атомов, эмитированных с грани (001) Ni, по углам и энергии* // Изв. РАН. Сер. физ. 2016. Т. 80. № 2. С. 122-125.
37. V.N. Samoilo, A.I. Musin, N.G. Ananieva. *The peculiarities of distributions of overfocused sputtered atoms ejected from (001) Ni with energy and angular resolution* // Bull. Russ. Acad. Sci. Phys. 2016. V. 80. No. 2. P. 109-112.