

УДК 537.534

ОБ ОСОБЕННОСТЯХ ФОРМИРОВАНИЯ ПОЛЯРНОГО РАСПРЕДЕЛЕНИЯ РАСПЫЛЕННЫХ АТОМОВ В МД-МОДЕЛИ РАСПЫЛЕНИЯ ГРАНИ (001) Ni

© 2025 г. А. И. Мусин^{a, b}, В. Н. Самойлов^c, *

^aМосковский государственный технологический университет “СТАНКИН”, Институт цифровых интеллектуальных систем, Москва, 127994 Россия

^bВятский государственный университет, Институт математики и информационных систем, Киров, Кировская область, 610000 Россия

^cМосковский государственный университет имени М. В. Ломоносова, Физический факультет, Москва, 119991 Россия

*e-mail: samoilov@polly.phys.msu.ru

Поступила в редакцию 24.11.2024 г.

После доработки 12.01.2025 г.

Принята к публикации 12.01.2025 г.

С помощью современной полной молекулярно-динамической модели распыления монокристаллов с учетом падения ионов на поверхность исследованы механизмы формирования распределения по полярному и азимутальному углам вылета атомов, распыленных с поверхности грани (001) Ni ионами Ar с энергией 200 эВ. Показано, что распыленные атомы, перефокусированные по азимутальному углу, вылетают только вблизи направлений, соответствующих направлениям на центры линз из двух атомов — ближайших к эмитирующему атому соседей в плоскости поверхности. Обнаружено, что в полярном угловом распределении распыленных атомов с энергией 2.5 ± 0.1 эВ в интервале азимутального угла $87^\circ \pm 1.5^\circ$, близкого к центру линзы, наблюдаются три максимума, сформированные атомами с различными механизмами вылета. Сделан вывод о том, что эти максимумы возникают только за счет поверхностного механизма распыления монокристалла.

Ключевые слова: распыление монокристаллов, распыленные атомы, перефокусированные атомы, поверхностный механизм распыления, метод молекулярной динамики.

DOI: 10.31857/S1028096025030039, **EDN:** EKSWMQ

ВВЕДЕНИЕ

Взаимодействие ионных пучков с поверхностью твердых тел имеет множество практических приложений, например, травление поверхности [1], ее модификация [2], напыление тонких пленок [3]. Одним из часто используемых материалов для мишени является никель или соединения с никелем [3–5].

Если начальная энергия иона больше так называемой пороговой энергии, то начинается процесс распыления атомов мишени, который необходимо учитывать. Распределение распыленных атомов по углам и энергии несет ценную информацию о структуре и элементном составе поверхности.

Известная каскадная теория Зигмунда [6] приемлемо описывает интегральный коэффициент распыления, но, к сожалению, не может объяснить особенности дифференциальных характеристик распыленных атомов. Даже в случае аморфных мишеней, не говоря уже о монокристаллических, требуется учитывать силы отталкивания, действующие на вылетающий атом со стороны ближайших соседей, что было показано в [7].

Ранее в [8] проведено исследование распыления монокристалла (001) Ni ионами Ar с энергией 200 эВ с использованием современной молекулярно-динамической модели, наиболее приближенной к эксперименту. Был исследован немонотонный сдвиг

максимума полярного углового распределения распыленных атомов при увеличении их энергии.

В настоящей работе исследования угловых распределений распыленных атомов, в том числе с разрешением по энергии, были продолжены. Была поставлена задача выявить механизмы формирования, наблюдаемого полярного углового распределения распыленных атомов для определенных значений энергии и азимутального угла в рамках современной полной молекулярно-динамической модели распыления монокристаллов с учетом падения ионов на поверхность, без учета тепловых колебаний кристаллической решетки.

МОДЕЛЬ РАСЧЕТА

Для получения результатов, как и в [8], применяли модель численного моделирования, созданную на основе модели из [9, 10] и использующую метод молекулярной динамики. В модели создан монокристаллический блок (001) Ni из 14 слоев (4032 атома), который бомбардировали ионы Ar с энергией 200 эВ по нормали к поверхности. Расчеты были проведены для температуры 0 К.

Для взаимодействия Ni–Ni использовали комбинированный потенциал: на больших расстояниях взаимодействие описывали многочастичным потенциалом Акланда [11], на малых расстояниях при столкновении атомов в каскаде использовали потенциал Зиглера–Бирсака–Литтмарка (ZBL) [12]. Эти потенциалы сшивали подобно [13]. Взаимодействие Ar–Ni описывали исключительно потенциалом ZBL.

Расчеты выполняли на суперкомпьютере “Ломоносов-2”. Было рассчитано около 10^6 событий падения иона на поверхность. Ионы падали на поверхность грани (001) Ni по нормали к поверхности в элементарную треугольную область, точки

прицеливания выбирали случайным образом с использованием равномерного распределения.

Регистрировали вылетающие с бомбардируемой поверхности атомы на расстоянии $z_1 = 0.3$ и $z_2 = 10 \text{ \AA}$ над усредненной поверхностью кристалла. Записывали три параметра: энергию, полярный и азимутальный углы, характеризующие направление вектора скорости распыленного атома в сферической системе координат. Полярный угол отсчитывали от нормали к поверхности, азимутальный угол $\phi = 90^\circ$ соответствовал направлению $<010>$ на центр линзы из двух ближайших к узлу на поверхности атомов поверхности.

Параметры E_0 , ϑ_0 , ϕ_0 на высоте z_1 далее называются начальными параметрами вылета распыленного атома, а параметры E , ϑ , ϕ на высоте z_2 — параметрами наблюдения, или конечными параметрами вылета.

РЕЗУЛЬТАТЫ И ИХ ОБСУЖДЕНИЕ

Перефокусированные атомы среди всех распыленных атомов

Ранее на более простой модели (без падения ионов) было показано [14, 15], что среди всех распыленных атомов можно выделить группу перефокусированных атомов, которые изначально вылетали с одной стороны от центра линзы из двух атомов, ближайших к вылетающему атому соседей в плоскости поверхности, а наблюдаются с другой стороны от центра линзы (рис. 1). Кроме перефокусированных атомов, среди распыленных атомов есть собственные по азимутальному углу, которые наблюдаются в том же интервале азимутального угла, в котором происходил их вылет, и фокусированные атомы, для которых интервал наблюдения по азимутальному углу и интервал начального азимутального угла вылета хоть и не совпадают, но находятся с одной стороны от цен-

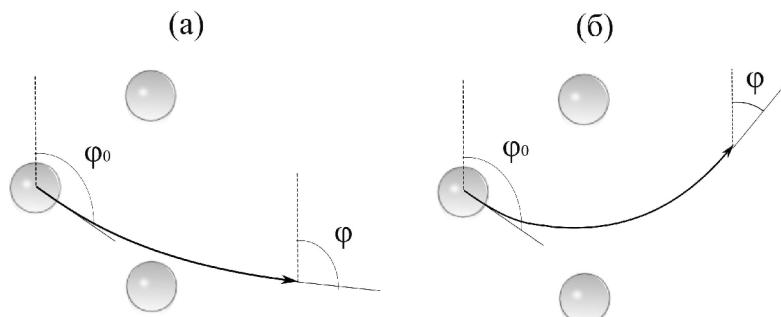


Рис. 1. Характерные траектории вылета фокусированных (а) и перефокусированных (б) атомов при рассеянии на линзе из двух ближайших к эмиттируемому атому атомов поверхности (вид сверху).

тра линзы. Для фокусированных атомов конечный азимутальный угол ϕ оказывается ближе к азимутальному направлению на центр линзы, чем начальный азимутальный угол вылета ϕ_0 . В алгоритме обработки данных для МД-модели с падением ионов были помечены все перефокусированные атомы, благодаря чему их легко идентифицировать во всех рассчитанных распределениях.

Коэффициент распыления в рамках настоящей модели без учета тепловых колебаний кристаллической решетки составил 0.93 ат./ион, что меньше значения 1.6 ат./ион из [16], где также моделировали распыление грани (001) Ni ионами Ar с энергией 200 эВ, однако с меньшей статистикой, с меньшим размером атомного блока и с использованием не многочастичных, а парных потенциалов. В [16] отмечено, что полученное в работе значение коэффициента распыления завышено из-за использования в модели сферического, а не плоского потенциального барьера для распыленных атомов.

На рис. 2 представлено двумерное угловое распределение распыленных атомов (одновременно по полярному и азимутальному углам) в полярных координатах (ρ, ϕ) , где $\rho \propto \operatorname{tg}\theta$. Здесь наблюдаются максимумы эмиссии (так называемые пятна Венера) в азимутальных направлениях $\phi = 0^\circ, 90^\circ, 180^\circ$ и 270° , что согласуется с данными экспериментов [17–19] и моделирования [16]. Азимутальные направления на максимумы эмиссии совпадают с направлениями на центры линз из двух атомов, на которых происходит фокусировка и перефокусировка атомов (рис. 1).

На рис. 3 показано двумерное угловое распределение распыленных атомов, аналогичное рис. 2, но только для перефокусированных распыленных атомов. Видно, что перефокусированные атомы наблюдаются вблизи азимутальных направлений $\phi = 0^\circ, 90^\circ, 180^\circ$ и 270° , соответствующих направлениям на центры линз из двух атомов. В остальных азимутальных направлениях сигнал перефокусированных атомов практически отсутствует. Поэтому для анализа перефокусированных атомов необходимо выбирать несимметричные относительно направления на центр линзы интервалы азимутального угла, но достаточно близкие к нему.

Отдельные максимумы в полярном угловом распределении распыленных атомов для фиксированных интервалов азимутального угла и энергии

На рис. 4 показано распределение распыленных атомов по $1 - \cos\theta$, наблюдаемых в интервале азимутального угла $\phi = 87^\circ \pm 1.5^\circ$ для энергии

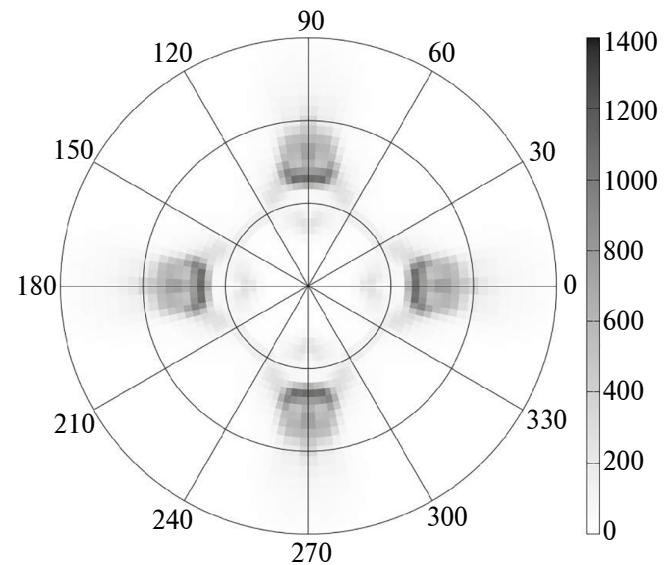


Рис. 2. Угловое распределение всех распыленных атомов, полученное в МД-модели распыления грани (001) Ni ионами Ar с энергией 200 эВ при температуре мишени 0 К. Количество падающих ионов $\sim 10^6$.

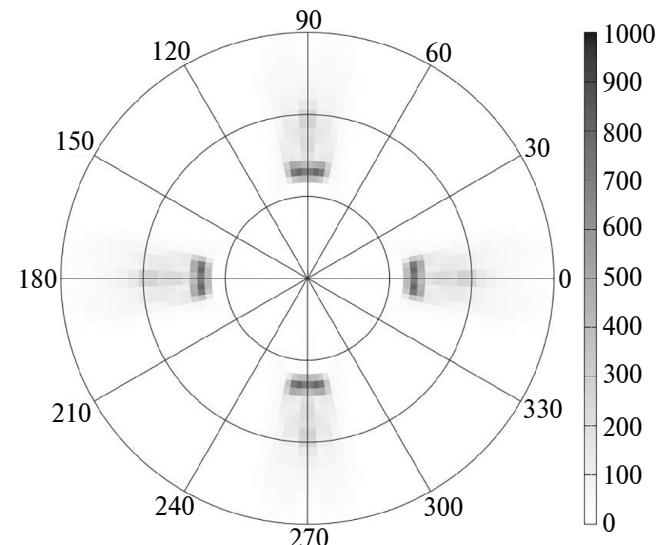


Рис. 3. Угловое распределение перефокусированных распыленных атомов, полученное в МД-модели распыления грани (001) Ni ионами Ar с энергией 200 эВ при температуре мишени 0 К. Количество падающих ионов $\sim 10^6$.

$E = 2.5 \pm 0.1$ эВ. Видны три отдельных максимума, обозначенные I, II и III, для удобства они отделены друг от друга пунктирными линиями. Окрестности максимумов заданы интервалами полярного угла θ : I — $[51.7^\circ; 58.0^\circ]$, II — $[60.7^\circ; 67.7^\circ]$, III — $[70.1^\circ; 75.5^\circ]$.

Был проведен анализ групп атомов, образующих эти максимумы. Те атомы, которые формируют максимум I, в основном вылетали вблизи

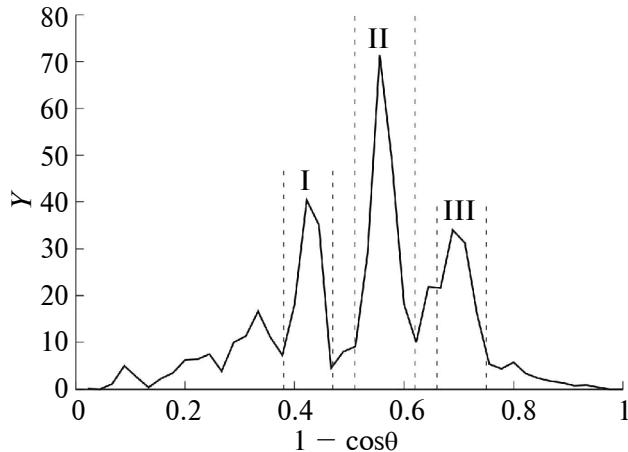


Рис. 4. Распределение по $1 - \cos\theta$ распыленных с грани (001) Ni при бомбардировке ионами Ar с энергией 200 эВ атомов, наблюдаемых в интервале азимутального угла $\phi = 87^\circ \pm 1.5^\circ$ с энергией $E = 2.5 \pm 0.1$ эВ. Три отдельных максимума образованы собственными по азимутальному углу атомами (максимум I) и в основном перефокусированными атомами (максимумы II, III).

поверхности в направлениях азимутального угла $\phi_0 = 87^\circ \pm 1.5^\circ$, т.е. являются собственными по азимутальному углу. По полярному углу эти атомы являются сильно блокированными — следуя [20, 21], так называем атомы, для которых полярный угол наблюдения ϑ меньше начального полярного угла ϑ_0 . Блокировка, т.е. отклонение по полярному углу в направлении нормали к поверхности, происходит из-за столкновения вылетающего атома с атомами-соседями. Если эффект блокировки превалирует над противоположным эффектом — отклонением в сторону от нормали к поверхности за счет притяжения к поверхности, тогда $\vartheta < \vartheta_0$, и атом как раз называется сильно блокированным.

Атомы указанной группы вылетают под углами ϑ_0 порядка $60^\circ - 70^\circ$ от нормали к поверхности с начальной энергией от 7 до 9 эВ. Их рассеяние происходит на двух ближайших к эмитируемому атому атомах поверхности (т.е. линзе из двух атомов), из-за этого их траектория значительно изгибаются к нормали к поверхности из-за сильной блокировки. В зависимости от начальной энергии атом может рассеиваться не только на линзе из двух ближайших атомов поверхности, но и на атоме, расположеннем непосредственно за линзой, в среднем передавая атомам линзы энергию около 5 эВ.

Для атомов из группы, образующих максимум II, в целом полярный угол наблюдения ϑ не сильно отличается от начального полярного угла ϑ_0 . Это означает, что блокировка атома компенсиру-

ется притяжением в потенциальном поле поверхности кристалла. Атомы группы II в основном перефокусированные, они вылетают с начальными азимутальными углами ϕ_0 порядка $100^\circ - 106^\circ$. В процессе перефокусировки их траектория разворачивается по азимутальному углу на $13^\circ - 19^\circ$. Средние потери энергии при перефокусировке составляют около 5.5 эВ.

Атомы из группы, образующие максимум III, в основном также перефокусированные. Однако механизм их вылета иной, чем для атомов из группы II. Начальные азимутальные углы у атомов группы III отличаются — порядка $95^\circ - 100^\circ$, и они вылетают ближе к нормали, чем атомы группы II. Из-за этого взаимодействие с соседними атомами поверхности гораздо слабее, поэтому траектории атомов группы III разворачиваются по азимутальному углу всего на $8^\circ - 13^\circ$, и средние потери энергии составляют 4 эВ. Сильная блокировка для этих атомов отсутствует, поэтому оказывается, что $\vartheta > \vartheta_0$, т.е. притяжение к поверхности в процессе вылета доминирует над отклонением атомов в сторону нормали к поверхности.

Полученные результаты показывают, что в рамках использованной модели в распределении распыленных атомов по полярному углу для фиксированных интервалов азимутального угла и энергии обнаружены три максимума, каждый из которых формируется за счет различных механизмов надповерхностного рассеяния. Таким образом, анализ распределений распыленных атомов может дать ценную информацию о механизмах распыления и способствовать дифференциации этих механизмов.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

С помощью современной полной молекулярно-динамической модели распыления монокристаллов с учетом падения ионов на поверхность исследованы механизмы формирования полярного углового распределения распыленных атомов для определенных значений энергии и азимутального угла наблюдения при бомбардировке поверхности грани (001) Ni ионами Ar с энергией 200 эВ при температуре 0 К.

В рамках указанной модели впервые рассчитано двумерное угловое распределение перефокусированных распыленных атомов. Обнаружено, что перефокусированные атомы наблюдаются вблизи азимутальных направлений $\phi = 0^\circ, 90^\circ, 180^\circ$ и 270° , соответствующих направлениям на центры линз из двух атомов. В других азимутальных направлениях сигнал перефокусированных атомов практически отсутствует.

Показано, что в полярном угловом распределении распыленных атомов с энергией 2.5 ± 0.1 эВ в интервале азимутального угла $87^\circ \pm 1.5^\circ$, близком к центру линзы, наблюдаются три максимума I, II, III. Эти максимумы сформированы атомами с различными механизмами вылета.

Благодаря фиксации значений энергии и углов (E, ϑ, ϕ) распыленных атомов не только на большом расстоянии от поверхности, но также и на расстоянии 0.3 \AA от поверхности (E_0, ϑ_0, ϕ_0), впервые проанализирована предыстория вылета этих атомов и описаны механизмы их вылета. Проведена классификация атомов, образующих максимумы I, II, III. Атомы, образующие максимум I, — собственные по азимутальному углу и сильно блокированные ($\vartheta < \vartheta_0$), II — перефокусированные и “собственные” по полярному углу, т.е. для них $\vartheta \approx \vartheta_0$, III — перефокусированные, со слабой блокировкой по полярному углу ($\vartheta > \vartheta_0$).

Таким образом, в экспериментах по распылению грани (001) Ni с одновременным высоким разрешением по полярному и азимутальному углам и энергии при низких температурах можно ожидать тонкую структуру распределений распыленных атомов для несимметричных относительно направления $\langle 010 \rangle$ интервалов азимутального угла.

Анализ не только конечных (E, ϑ, ϕ) параметров вылета распыленных атомов, но также сравнение их с начальными параметрами вылета (E_0, ϑ_0, ϕ_0) позволяет сделать важный вывод. Он заключается в том, что формирование максимумов в полярном угловом распределении распыленных атомов (рис. 4) происходит только за счет поверхностного механизма распыления монокристалла, хотя в используемой молекуллярно-динамической модели с падением ионов представлены и каскадные, и поверхностные механизмы. Таким образом, подтверждается корректность численных моделей, которые использованы ранее [14, 15] без учета каскадных механизмов распыления.

БЛАГОДАРНОСТИ

Расчеты выполнены с использованием оборудования Центра коллективного пользования сверхвысокопроизводительными вычислительными ресурсами МГУ им. М.В. Ломоносова [22].

КОНФЛИКТ ИНТЕРЕСОВ

Авторы заявляют об отсутствии конфликта интересов.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Михайленко М.С., Пестов А.Е., Зорина М.В., Чернышев А.К., Чхало Н.И., Шевчук И.Э. // Поверхность. Рентген., синхротр. и нейтрон. исслед. 2023. № 12. С. 25.
<https://doi.org/10.31857/S1028096023120154>
2. Андрианова Н.Н., Борисов А.М., Машкова Е.С., Овчинников М.А., Суминов И.В. // Поверхность. Рентген., синхротр. и нейтрон. исслед. 2023. № 4. С. 10.
<https://doi.org/10.31857/S1028096023040027>
3. Лядов Н.М., Базаров В.В., Вахитов И.Р., Гумаров А.И., Ибрагимов Ш.З., Кузина Д.М., Файзрахманов И.А., Хайбуллин Р.И., Шустов В.А. // Физика твердого тела. 2021. Т. 63. № 10. С. 1687.
<https://doi.org/10.21883/FTT.2021.10.51424.117>
4. Хисамов Р.Х., Тимирязев Р.Р., Сафаров И.М., Мулюков Р.Р. // Письма о материалах. 2020. Т. 10. № 2. С. 223.
<https://doi.org/10.22226/2410-3535-2020-2-223-226>
5. Борисов А.М., Машкова Е.С., Овчинников М.А., Хисамов Р.Х., Мулюков Р.Р. // Поверхность. Рентген., синхротр. и нейтрон. исслед. 2022. № 3. С. 71.
<https://doi.org/10.31857/S1028096022030062>
6. Sigmund P. // Phys. Rev. 1969. V. 184. № 2. P. 383.
<https://doi.org/10.1103/PhysRev.184.383>
7. Самойлов В.Н. // Изв. АН СССР. Сер. физ. 1990. Т. 54. № 7. С. 1283.
8. Мусин А.И., Самойлов В.Н. // Поверхность. Рентген., синхротр. и нейтрон. исслед. 2024. № 6. С. 20.
9. Kornich G.V., Betz G. // Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. B. 1998. V. 143. № 4. P. 455.
[https://doi.org/10.1016/S0168-583X\(98\)00410-8](https://doi.org/10.1016/S0168-583X(98)00410-8)
10. Kornich G.V., Betz G., Bazhin A.I. // Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. B. 1999. V. 153. № 1–4. P. 383.
[https://doi.org/10.1016/S0168-583X\(99\)00218-9](https://doi.org/10.1016/S0168-583X(99)00218-9)
11. Ackland G.J., Tichy G., Vitek V., Finnis M.W. // Phil. Mag. A. 1987. V. 56. № 6. P. 735.
<https://doi.org/10.1080/01418618708204485>
12. Ziegler J.F., Biersack J.P., Littmark U. // Charge States and Dynamic Screening of Swift Ions in Solids. Proc. of the U.S.-Japan Seminar on Charged-Particle Penetration Phenomena, 25–29 January 1982, Honolulu, Hawaii, the U.S.A. The Oak Ridge National Laboratory Publ., Oak Ridge, Tennessee, U.S.A, 1983. P. 88.
13. Gao F., Bacon D.J., Ackland G.J. // Phil. Mag. A. 1993. V. 67. № 2. P. 275.
<https://doi.org/10.1080/01418619308207158>
14. Самойлов В.Н., Мусин А.И. // Изв. РАН. Сер. физ. 2018. Т. 82. № 2. С. 171.
<https://doi.org/10.7868/S0367676518020084>
15. Самойлов В.Н., Мусин А.И., Ананьев Н.Г. // Изв. РАН. Сер. физ. 2016. Т. 80. № 2. С. 122.
<https://doi.org/10.7868/S0367676516020289>
16. Eltekov V.A., Samoylov V.N., Yurasova V.E., Motaweh H.A. // Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. B. 1986. V. 13. № 1–3. P. 443.
[https://doi.org/10.1016/0168-583X\(86\)90544-6](https://doi.org/10.1016/0168-583X(86)90544-6)
17. Wehner G.K. // J. Appl. Phys. 1955. V. 26. № 8. P. 1056.
<https://doi.org/10.1063/1.1722136>

18. Юрасова В.Е., Плещивцев Н.В., Орфанов И.В. // ЖЭТФ. 1959. Т. 37. Вып. 4. С. 966.
19. Rübesame D., Niedrig H. // Radiat. Eff. Def. Solids. 1996. V. 138. № 1–2. P. 49.
<https://doi.org/10.1080/10420159608211508>
20. Samoilov V.N., Tatur A.E., Kovaleva N.A., Kozhanov A.E. // Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. B. 1999. V. 153. № 1–4. P. 319.
[https://doi.org/10.1016/S0168-583X\(99\)00216-5](https://doi.org/10.1016/S0168-583X(99)00216-5)
21. Шпицков В.И., Самойлов В.Н. // Поверхность. Рентген., синхротр. и нейтрон. исслед. 2009. № 3. С. 73.
22. Voevodin Vl.V., Antonov A.S., Nikitenko D.A., Shvets P.A., Sobolev S.I., Sidorov I.Yu., Stefanov K.S., Voevodin Vad.V., Zhumatiy S.A. // Supercomputing Frontiers and Innovations. 2019. V. 6. № 2. P. 4.
<https://doi.org/10.14529/jsfi190201>

On the Features of the Formation of Polar Distribution of Sputtered Atoms in the MD Model of the (001) Ni Face Sputtering

A. I. Musin^{1,2}, V. N. Samoilov^{3,*}

¹*Moscow State University of Technology “STANKIN”, Institute of Digital Intelligent Systems, Moscow, 127994 Russia*

²*Vyatka State University, Institute of Mathematics and Information Systems, Kirov, Kirov Region, 61000 Russia*

³*Lomonosov Moscow State University, Faculty of Physics, Moscow, 119991 Russia*

**e-mail: samoilov@polly.phys.msu.ru*

Using a modern complete molecular dynamics model of single crystal sputtering taking into account ion incidence on the surface, the mechanisms of formation of the polar and azimuthal angle distribution of atoms sputtered from the surface of the (001) Ni face by Ar ions with an energy of 200 eV are studied. It is shown that the sputtered atoms, over focused by the azimuthal angle, eject only near the directions corresponding to the directions to the centers of lenses of two atoms in the surface plane neighboring to the ejecting atom. It is found that in the polar angular distribution of sputtered atoms with an energy of 2.5 ± 0.1 eV in the range of the azimuthal angle of $87^\circ \pm 1.5^\circ$, close to the center of the lens, three maxima formed by atoms with significantly different mechanisms of emission are observed. It is concluded that the formation of these maxima occurs only due to the surface mechanism of single crystal sputtering.

Keywords: single crystal sputtering, sputtered atoms, over focused atoms, the surface mechanism of sputtering, molecular dynamics method.