

МОСКОВСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ

имени М.В.ЛОМОНОСОВА

На правах рукописи

Мусин Артем Игоревич

**Исследование механизмов распыления  
монокристаллов методами молекулярной  
динамики**

1.3.8 – Физика конденсированного состояния

**АВТОРЕФЕРАТ**

диссертации на соискание ученой степени

кандидата физико-математических наук

Москва – 2023

Работа выполнена в *Московском государственном областном педагогическом университете* на кафедре фундаментальной физики и нанотехнологии физико-математического факультета.

**Научный руководитель:** **Самойлов Владимир Николаевич**  
кандидат физико-математических наук

**Официальные оппоненты:** **Бачурин Владимир Иванович**  
доктор физико-математических наук, доцент  
Ярославский Филиал ФГБУН Физико-технологического института имени К.А. Валиева РАН, лаборатория диагностики микро- и наноструктур, ведущий научный сотрудник

**Борисюк Петр Викторович**  
доктор физико-математических наук, доцент  
ФГАОУ ВО «Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ», Институт лазерных и плазменных технологий, заведующий кафедрой «Физико-технические проблемы метрологии»

**Буга Сергей Геннадьевич**  
доктор физико-математических наук  
ФГБУН «Технологический институт сверхтвердых и новых углеродных материалов», отдел алмазной электроники, главный научный сотрудник

Защита состоится 25 мая 2023 г. в 15 ч. 30 мин. на заседании диссертационного совета МГУ.013.3 *Московского государственного университета имени М.В.Ломоносова* по адресу:

г. Москва, Ленинские горы, д. 1, стр. 2, физический факультет, ауд. \_\_\_\_.

E-mail: [malyshkinaia@my.msu.ru](mailto:malyshkinaia@my.msu.ru)

С диссертацией можно ознакомиться в отделе диссертаций научной библиотеки МГУ имени М.В.Ломоносова (Ломоносовский просп., д. 27)

и на портале: <https://dissovet.msu.ru/dissertation/013.3/2488>.

Автореферат разослан «\_\_\_\_» \_\_\_\_\_ 2023 г.

Ученый секретарь  
диссертационного совета,  
к.ф.-м.н.

*И.А. Малышкина*

## Общая характеристика работы

**Актуальность темы исследования.** Применение пучков ионов в научно-исследовательских и прикладных задачах требует понимания процессов взаимодействия ионов с поверхностью твердого тела. Спектр таких задач довольно широк: напыление тонких пленок, очистка и травление поверхности, легирование полупроводников, модификация поверхности и создание наноструктур, и даже получение ультраструктурных изображений живых клеток.

Бомбардировка поверхности твердых тел ускоренными ионами приводит к распылению — выбиванию атомов с поверхности мишени. Изучение особенностей угловых и энергетических распределений распыленных частиц позволяет получить ценную информацию о поверхности, поэтому явление распыления лежит в основе методов структурного и элементного состава поверхности твердых тел и тонких пленок, таких как масс-спектрометрия распыленных нейтральных атомов (Secondary Neutral Mass Spectrometry, SNMS) [1] и масс-спектрометрия вторичных ионов (Secondary Ion Mass Spectrometry, SIMS) [2], а также спектрометрия нейтральных атомов с энергетическим и угловым разрешением (Energy and Angle Resolved Neutral Spectrometry, EARNs).

В настоящее время не до конца ясно, каким образом формируется распределение по энергии и углам атомов, распыленных с поверхности кристалла при бомбардировке ионами, по причине воздействия поверхности на изменение углов и энергии эмитированных атомов. Недостаточное понимание этих механизмов приводит к тому, что не удается полностью решить задачу обратного преобразования распределения распыленных атомов. Это тормозит развитие научных представлений в области взаимодействия заряженных частиц с поверхностью, а также не позволяет в полной мере раскрыть большие возможности методов SIMS и SNMS. В связи с этим актуальными представляются фундаментальные исследования распыления, поскольку детальное изучение механизмов вылета распыленных частиц с поверхности поможет улучшить существующие

методы элементного и структурного анализа твердых тел.

**Степень разработанности темы исследования.** При падении иона (с достаточной энергией) на поверхность твердого тела образуется каскад столкновений — область, в которой атомы выведены из равновесных положений. Некоторые из атомов каскада получают энергию, достаточную для пересечения поверхности и преодоления потенциального барьера, становясь распыленными. Особенности угловых и энергетических распределений атомов, распыленных с поверхности монокристалла, формируются за счет процессов, происходящих в каскаде (каскадные механизмы) и за счет процессов на поверхности (поверхностные механизмы). Вначале были разработаны каскадные механизмы: фокусонный механизм Силсби [3], механизм Лемана-Зигмунда [4] и механизм линзовой фокусировки Нельсона-Томпсона [5]. В дальнейшем оказалось, что главную роль в распылении играют поверхностные механизмы, связанные с движением атомов в верхних слоях [6].

В поверхностных механизмах учитывается тот факт, что в процессе отлета атома от поверхности продолжается его отталкивание от ближайших рассеивающих центров. Следовательно, не только для монокристаллических, но даже для аморфных мишеней необходимо учитывать дискретность поверхности мишени [7]. Аналитические модели распыления с учетом дискретности поверхности развивались В. Н. Самойловым, О. С. Корсаковой и соавторами в работах [8–12]. По азимутальному углу распыленные атомы были разделены на собственные, фокусированные и перефокусированные.

Численные модели распыления с учетом дискретной поверхности в рамках метода молекулярной динамики были предложены В. Н. Самойловым и Н. В. Носовым [13] для стадии эмиссии атомов с поверхности (001) Ni и (001) Au. Были рассчитаны вклады собственных, фокусированных и перефокусированных атомов в формирование сигнала распыленных атомов в фиксированных интервалах азимутального угла.

**Цели и задачи диссертационной работы.** Целями работы являются

1. исследование механизмов формирования угловых и энергетических распределений атомов при эмиссии с поверхности грани (001) однокомпонентного монокристалла, в том числе дифференциальных, с разрешением по углам и энергии наблюдения;
2. исследование механизмов фокусировки и перефокусировки атомов при эмиссии с поверхности грани (001), выявление вклада перефокусированных атомов в наблюдаемое распределение при изменении параметров мишени, проведение сравнения с полномасштабной МД-моделью распыления монокристалла (с падением ионов).

Для достижения поставленных целей были решены следующие задачи.

1. Разработка параллельного МД-алгоритма для расчета эмиссии атомов с поверхности грани (001) Ni и алгоритмов обработки получаемых данных.
2. Расчет дифференциальных распределений эмитированных атомов с разрешением по полярному углу и энергии наблюдения для несимметричных относительно направления  $\langle 010 \rangle$  интервалов азимутального угла.
3. Определение вклада фокусированных и перефокусированных атомов в распределения из п. 2, анализ траекторий перефокусированных атомов для выявления механизмов перефокусировки.
4. Расчет дифференциальных распределений эмитированных атомов по начальному азимутальному углу и энергии наблюдения, их анализ на предмет многозначности.
5. Поиск интервалов полярного и азимутального углов вылета и энергии наблюдения, для которых сигнал формируется в основном за счет перефокусированных атомов.
6. Расчет распределений перефокусированных распыленных атомов при изменении атомного номера, энергии связи вещества мишени, при ферромагнитном фазовом переходе.
7. Модификация существующей полномасштабной МД-модели (с падением ионов) для анализа эффектов фокусировки и перефокусировки при рас-

пылении с поверхности грани (001) Ni для 0 К и 300 К.

8. Сравнение распределений, полученных в п. 2, с аналогичными распределениями, полученными в полномасштабной МД-модели.

**Объект и предмет исследования.** Объектом диссертационного исследования являются механизмы формирования распределений атомов, распыленных с поверхности монокристалла при бомбардировке одноэлементными ионами. Предмет исследования — один из аспектов объекта: механизмы формирования угловых и энергетических распределений распыленных атомов по азимутальному углу на примере монокристаллической мишени (001) Ni.

**Научная новизна.** В представленной работе впервые:

- с помощью метода молекулярной динамики были изучены эффекты фокусировки и перефокусировки атомов по азимутальному углу, которые эмитировались с поверхности монокристалла (001) Ni, а также рассмотрены принципы формирования дифференциальных распределений распыленных атомов;
- рассчитаны дифференциальные распределения перефокусированных распыленных атомов, обнаружена многозначность сигналов перефокусированных атомов по азимутальному углу;
- найдены такие телесные углы и значения энергии наблюдения, в которых все распыленные атомы на 100% являются перефокусированными относительно центра линзы;
- в распределениях с одновременным разрешением по энергии и полярному углу обнаружены и проанализированы отдельные максимумы для фокусированных и перефокусированных атомов;
- рассчитано, насколько смещаются максимумы фокусированных и перефокусированных атомов с ростом энергии связи, атомного номера вещества мишени, а также при изменении магнитного состояния мишени.

**Теоретическая и практическая значимость.** Изучение механизмов формирования распределений распыленных атомов существенно необходимы

для развития методов анализа поверхности, таких как спектрометрия нейтральных атомов с энергетическим и угловым разрешением (EARNs), масс-спектрометрия распыленных нейтральных атомов (SNMS) и масс-спектрометрия вторичных ионов (SIMS). Результаты, изложенные в диссертации, могут быть использованы для обратного преобразования экспериментальных распределений распыленных атомов в рамках указанных методов. Рассчитанные в работе распределения обладают свойством многозначности сигнала, то есть атомы, наблюдаемые в одном и том же телесном угле и с близкими значениями энергии, могут иметь существенно различные начальные углы вылета (азимутальный и полярный), а также различные значения начальной энергии эмиссии. Анализируя сигнал с детектора вторичных частиц, необходимо учитывать эту многозначность при расшифровке экспериментальных данных.

**Методология и методы исследования.** Методологической основой диссертационного исследования послужили метод моделирования, метод абстрагирования, метод идеализации — из разряда общенаучных методов, метод молекулярной динамики и метод средней силы — из разряда специальных.

*Метод моделирования* заключался в построении модели поверхности монокристалла и модели эмиссии атомов с этой поверхности при ионном распылении, в исследовании построенных моделей.

Применение *метода абстрагирования* позволило исключить из модели при выполнении исследования такие процессы, как падение иона и формирование каскада столкновений, и сосредоточиться на наиболее значимом процессе эмиссии атомов, в котором значение поверхности является определяющим.

*Метод идеализации* применялся при исследовании влияния различных факторов на процесс эмиссии атомов с поверхности. Чтобы выявить вклад каждого фактора, конструировались идеальные объекты, не существующие в реальности, например, поверхность монокристалла никеля в ферромагнитном состоянии, у которого энергия связи соответствует парамагнитному состоянию; поверхность монокристалла, для которой энергия связи и постоянная решетки

соответствуют никелю, а атомный номер — другим металлам.

В рамках *метода молекулярной динамики* атомы поверхности рассматривались как частицы, движение которых описывается дифференциальными уравнениями классической механики. Уравнения движения решались численно с помощью *метода средней силы* — метода с переменным шагом, который относится к группе методов “предиктор-корректор”.

### **Положения, выносимые на защиту**

- Поверхностные механизмы фокусировки адекватно описывают формирование углового распределения атомов, эмитируемых с поверхности грани (001) Ni, даже при отсутствии каскадных механизмов. Имеет место высокая эффективность фокусировки эмитируемых атомов в процессе вылета в потенциальном поле поверхности монокристалла.
- При эмиссии атомов с поверхности грани (001) Ni эффект перефокусировки играет важную роль. При этом возможно наблюдение перефокусированных атомов в экспериментах с высоким разрешением одновременно по углам и энергии.
- Перефокусированные атомы многозначны по начальной энергии эмиссии вследствие многократного рассеяния на атомах поверхности.
- Фокусированные и перефокусированные атомы чувствительны к изменению атомного номера вещества мишени, энергии связи и магнитного состояния.

**Степень достоверности и апробация результатов.** Основные результаты работы докладывались и обсуждались на Международных конференциях “Взаимодействие ионов с поверхностью” (Москва, 2015, 2017, 2019 и Ярославль, 2021); на Международных Тулиновских конференциях “Физика взаимодействия заряженных частиц с кристаллами” (Москва, 2014–2019, 2021–2022); на Международной школе-конференции студентов, аспирантов и молодых ученых “Биомедицина, материалы и технологии XXI века” (Казань, 2015); на Всероссийской школе-конференции студентов, аспирантов и молодых ученых “Материалы и



технологии XXI века” (Казань, 2014); на Всероссийской научно-практической конференции “Музруковские чтения” (Саров, 2018).

**Публикации.** Материалы диссертации опубликованы в 25 печатных работах, из них 3 статьи [A1–A3] в рецензируемых научных журналах, индексируемых в базах данных Web of Science, Scopus, RSCI, 5 статей в сборниках трудов конференций [A4–A8] и 17 тезисов докладов. Список основных публикаций представлен в конце автореферата.

**Личный вклад автора.** Содержание диссертации и основные положения, выносимые на защиту, отражают персональный вклад автора в опубликованные работы. Подготовка к публикации полученных результатов проводилась совместно с соавторами, причем вклад диссертанта был определяющим. Все представленные в диссертации результаты получены лично автором.

**Структура и объем диссертации.** Диссертация состоит из введения, 4-х глав, заключения и библиографии. Общий объем диссертации 136 страниц, из них 110 страниц текста, включая 66 рисунков. Библиография включает 143 наименования на 14 страницах.

## Содержание работы

**Во Введении** обоснована актуальность диссертационной работы, сформулирована цель и аргументирована научная новизна исследований, показана практическая значимость полученных результатов, представлены выносимые на защиту научные положения.

**В первой главе** приведен обзор литературы по теме ионного распыления. Рассмотрена история открытия явления и развитие представлений о причинах его возникновения. Указаны основные механизмы (каскадные и поверхностные), которые предлагались для объяснения возникновения пятен Венера при распылении монокристаллов. Кратко изложены подходы к построению аналитических и численных моделей распыления, отмечена важность учета дис-

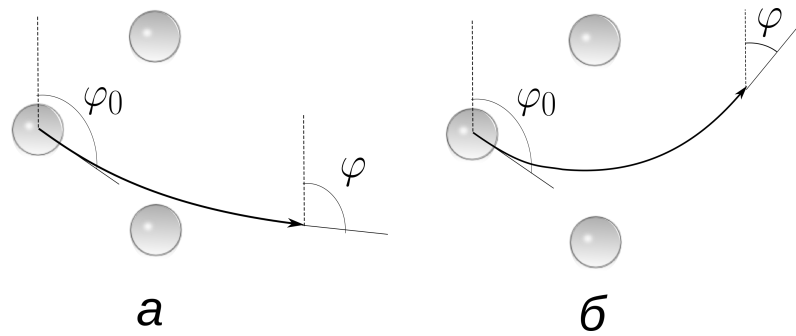


Рис. 1. Траектории вылета фокусированных атомов (а) и перефокусированных атомов (б) при эмиссии с поверхности монокристалла. Вид сверху

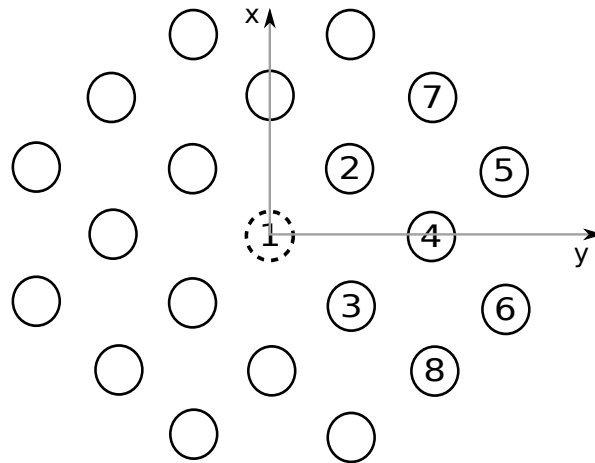


Рис. 2. Фрагмент грани (001), использующийся в модели 20 атомов (вид сверху). 1 — эмитируемый атом; 2,3 — атомы, образующие линзу; 4 — атом за линзой, являющийся рассеивающим центром. Направлению на центр линзы 2–3 соответствует азимутальный угол  $\varphi = 90^\circ$

кретной поверхности мишени на стадии вылета. Рассмотрено влияние фазовых переходов I и II рода на распыление. Приведена классификация атомов, эмитируемых с поверхности монокристалла, по азимутальному углу, введены понятия фокусированных и перефокусированных атомов (рис. 1).

В разделе 1.6 описана вычислительная модель 20 атомов (рис. 2), используемая для исследований механизмов фокусировки и перефокусировки атомов в настоящей работе. В рамках этой модели рассматривалась только последняя стадия распыления — эмиссия атомов с поверхности грани (001) Ni. Поверхность была представлена 20 атомами — ближайшими к узлу решетки, из которого происходила эмиссия атома. Эмиссия атома из центрального узла происходила с энергией  $E_0$  под углом  $\theta_0$  от нормали к поверхности в направлении,

задаваемом азимутальным углом  $\varphi_0$ . Начальная энергия  $E_0$  менялась в диапазоне от 0.5 эВ до 100 эВ с шагом 0.01 эВ, угол  $\varphi_0$  — от  $0^\circ$  до  $180^\circ$  с шагом  $0.5^\circ$ ,  $\theta_0$  — от  $0^\circ$  до  $90^\circ$  с шагом по  $\cos \theta_0$   $1/450$ . После рассеяния на ближайших атомах для эмитируемого атома учитывается плоский потенциальный барьер высотой 4.435 Å. Атомы, которые преодолели потенциальный барьер, отмечаются как распыленные.

**Во второй главе** методами молекулярной динамики с помощью модели 20 атомов проводилось исследование эффекта перефокусировки атомов при эмиссии с поверхности грани (001) Ni, систематически исследовался процесс формирования распределений распыленных атомов на стадии эмиссии с поверхности (001) Ni с разрешением по углам и энергии наблюдения. Был выяснен вклад перефокусированных атомов в наблюдаемое распределение распыленных атомов и выявлены механизмы возникновения многозначности перефокусированных по начальному азимутальному углу.

В разделе 2.1 представлено угловое распределение эмитированных атомов в полярных координатах  $(\rho; \varphi)$ , где  $\rho \propto \operatorname{tg} \theta$ , которое соответствует распределению распыленных атомов, наблюдаемых экспериментально на плоском коллекторе. За счет эффекта фокусировки атомов по азимутальному углу при взаимодействии с линзой из двух атомов в этом распределении наблюдаются пятна Венеры. В процессе эмиссии атомов с поверхности грани (001) Ni равномерное по начальному азимутальному углу  $\varphi_0$  распределение эмитированных атомов преобразуется в распределение по азимутальному углу наблюдения  $\varphi$  с выраженным максимумом в направлении на центр линзы ( $\varphi = 90^\circ$ ), ширина которого (на половине высоты) составляет  $13.8^\circ$ .

В разделе 2.2 изучаются двумерные распределения эмитированных атомов с разрешением одновременно по полярному углу и энергии наблюдения: интегральное и дифференциальные для направления на центр линзы ( $90^\circ \pm 1.5^\circ$ ) и на ближайший атом поверхности ( $45^\circ \pm 1.5^\circ$ ). Отмечены особенности распределений: максимум в виде “хребта” и область тени, характеризующуюся значения

ми полярных углов и энергий наблюдения, с которыми атомы не распыляются. “Хребты” простираются практически во всем диапазоне энергий от 0.5 до 100 эВ, благодаря этому в модели 20 атомов максимум энергоспектра распыленных атомов при увеличении полярного угла наблюдения  $\theta$  будет сдвигаться в сторону меньших энергий, в соответствии с экспериментальными данными [14–16].

В разделе 2.3 выясняется вклад перефокусированных атомов в наблюдаемое распределение эмитированных атомов при эмиссии с грани (001) Ni. Обнаружены области полярного и азимутального углов вылета и энергии, в которых сигнал распыленных атомов на 100% формируется за счет перефокусированных атомов. При этом, в отличие от работы [13], где использовалась модель 4 атомов, наблюдается многозначность перефокусированных атомов по начальному азимутальному углу  $\varphi_0$ , так как атомы, наблюдаемые в одном и том же интервале углов  $\varphi$ , эмитируются с существенно разными углами  $\varphi_0$ . Также оказалось, что имеет место многозначность перефокусированных атомов и по углу наблюдения  $\varphi$ . Эффект многозначности сигнала перефокусированных атомов при эмиссии с поверхности монокристалла следует учитывать при обратном преобразовании угловых и энергетических распределений распыленных атомов, получаемых экспериментально при анализе поверхности.

В распределении распыленных атомов по энергии и полярному углу для несимметричного относительно направления  $\langle 100 \rangle$  интервала азимутального угла  $\varphi = 78^\circ \pm 1.5^\circ$  отчетливо различаются отдельные хребты — максимумы распределений для фокусированных и перефокусированных атомов. Максимум распределения перефокусированных атомов наблюдается в области энергии и полярных углов, при которых нет вылета других групп атомов. Перефокусированные атомы на 100% формируют наблюдаемый сигнал. Следовательно, 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. 3) состоит из вкладов фокуси-

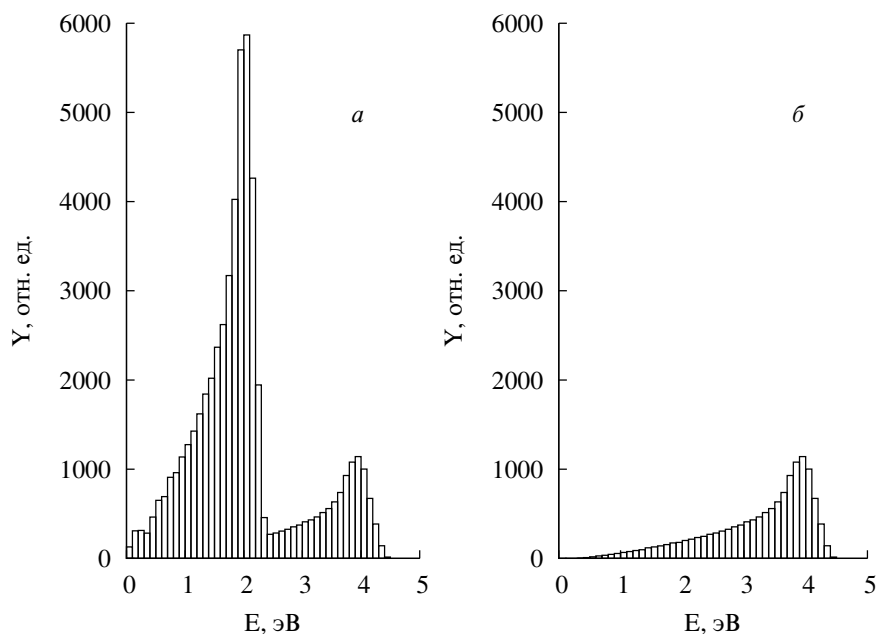


Рис. 3. Распределения всех распыленных атомов (а) и только перефокусированных распыленных атомов (б) по энергии наблюдения  $E$  при эмиссии с грани (001) Ni для полярных углов вылета  $\theta$  [56.3°; 57.8°] и азимутальных углов вылета  $\varphi$  [76.5°; 79.5°]

рованных атомов — левый максимум, перефокусированных атомов — правый максимум, и небольшого вклада собственных атомов при  $0 < E < 1,2$  эВ. Кроме того, как и в работе [17], при энергиях  $E > 20$  эВ здесь наблюдался высокоэнергетический максимум, который образован фокусированными, а не перефокусированными атомами, и поэтому на рис. 3 не показан.

В разделе 2.4 рассматриваются механизмы вылета перефокусированных атомов на основе анализа траекторий всех эмитированных атомов, полученных методами молекулярной динамики в модели 20 атомов. Для выделенных интервалов полярного и азимутального углов наблюдения ( $\theta$  [49.9°; 51.5°] и  $\varphi$  [76.5°; 79.5°]) были построены распределения эмитированных атомов по начальной энергии  $E_0$ , а также по начальному полярному углу  $\theta_0$  и начальному азимутальному углу  $\varphi_0$  эмиссии. Перефокусированные атомы разбиваются на группы: первая, с начальными энергиями атомов от 13 до 17 эВ, и вторая, с начальными энергиями атомов от 17 до 21 эВ. Перефокусированные атомы обеих групп летят под практически одинаковыми начальными углами  $\theta_0 \approx 69.5^\circ$  и являются сильно блокированными ( $\theta < \theta_0$ ). При этом указанные две груп-

пы перефокусированных атомов имеют четкую дифференциацию по углу  $\varphi_0$ . Атомы с бóльшей энергией  $E_0$  вылетают под бóльшим углом ( $\varphi_0 \approx 115^\circ$ ) в направлении ближе к атому линзы и, таким образом, сильнее разворачиваются, поэтому теряют больше энергии. Путем анализа отдельных траекторий в программе VMD, а также сравнения с моделью 4 атомов было показано, что дополнительная энергия эмитируемого атома теряется при рассеянии на атоме, находящимся непосредственно за линзой. Таким образом, в основе многозначности сигнала перефокусированных атомов по углу  $\varphi_0$  действительно лежит многократное рассеяние эмитированного атома на атомах поверхности.

Результаты второй главы опубликованы в работах [A1,A4,A6,A8].

**В третьей главе** изучался вопрос, насколько распыленные атомы, особенно перефокусированные атомы, чувствительны к изменению параметров мишени, таких как атомный номер, энергия связи и магнитное состояние (пара- и ферромагнитное).

В разделе 3.1 рассматривается эволюция распределений распыленных атомов с изменением атомного номера вещества мишени  $Z$ . Увеличение  $Z$  приводит к увеличению жесткости потенциала взаимодействия двух атомов и (вследствие этого) к большему отклонению эмитируемых атомов в сторону нормали к поверхности в процессе вылета. В работе исследовалось изменение распределений фокусированных и перефокусированных атомов с разрешением по углам и энергии при увеличении атомного номера от  $Z = 28$  (Ni) до  $Z = 79$  (Au).

На рис. 4 показаны распределения по энергии  $E$  всех эмитированных атомов для несимметричного относительно центра линзы направления при углах наблюдения  $\varphi$  [76.5°; 79.5°] и  $\theta$  [49.9°; 51.5°]. Для  $Z = 28$  (соответствует Ni) наблюдается максимум фокусированных атомов при энергии 3 эВ и максимум перефокусированных атомов при энергии 6 эВ. При увеличении  $Z$  до 29 (Cu) оба максимума смещаются менее чем на 0.5 эВ в сторону более низких энергий. При увеличении  $Z$  до 47 (Ag) и далее до 79 (Au) максимум фокусированных атомов сдвигается на 2.5 эВ в сторону меньших энергий, в то время как максимум

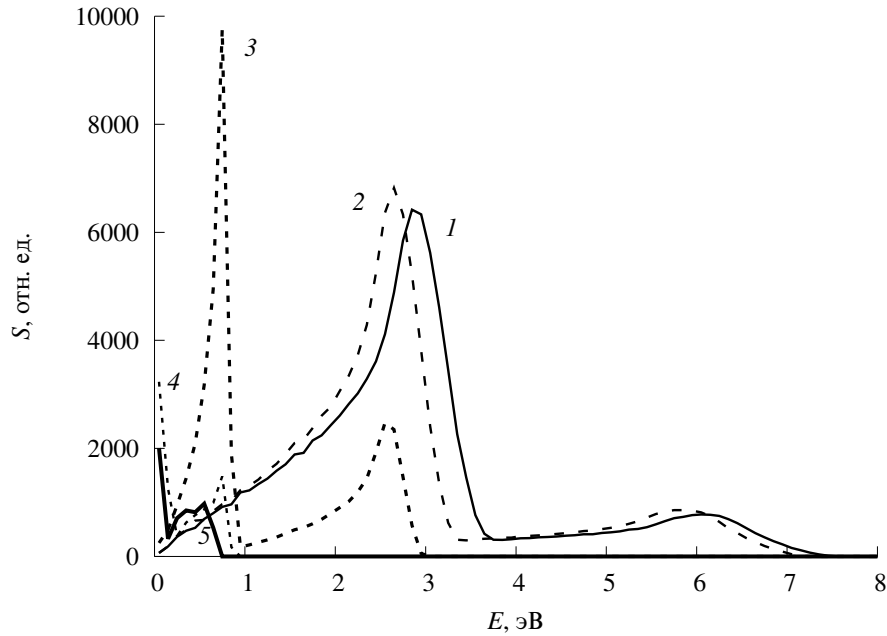


Рис. 4. Распределение всех распыленных атомов по энергии  $E$ , наблюдаемых в интервале углов  $\varphi$   $[76.5^\circ; 79.5^\circ]$  и  $\theta$   $[49.9^\circ; 51.5^\circ]$  для атомных номеров  $Z$  вещества мишени: 28 (1), 29 (2), 47 (3), 74 (4), 79 (5). Левый максимум образован фокусированными атомами, правый — перефокусированными атомами

перефокусированных атомов сдвигается более чем на 5 эВ в ту же сторону. Таким образом, при низких энергиях максимум перефокусированных распыленных атомов является более чувствительным к изменению атомного номера вещества мишени, чем максимум фокусированных атомов.

В разделе 3.2 была изучена эволюция полярных угловых распределений распыленных атомов с одновременным разрешением по энергии  $E$  и азимутальному углу  $\varphi$  при изменении атомного номера  $Z$  вещества мишени. Увеличение  $Z$  приводит к сдвигу максимумов (фокусированных и перефокусированных атомов) дифференциального распределения эмитированных атомов по полярному углу в сторону нормали к поверхности. Все сдвиги связаны с возрастанием сечения взаимодействия атомов при увеличении  $Z$  и получили наглядное объяснение при рассмотрении распределений распыленных атомов с одновременным разрешением по энергии и полярному углу (рис. 5).

Действительно, если в распределении на рис. 5 мысленно выделить по горизонтали интервал углов  $\theta$   $[49.9^\circ; 51.5^\circ]$ , то становится понятной структура

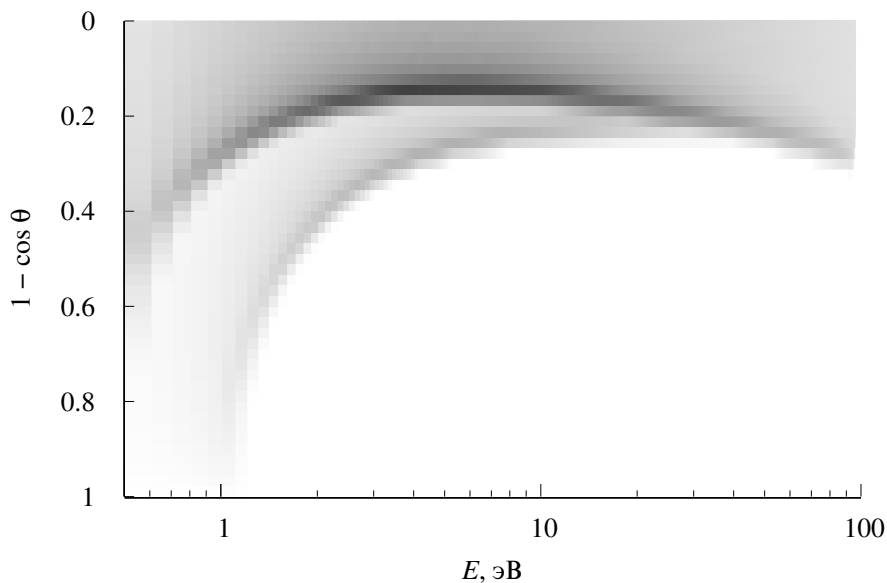


Рис. 5. Распределение распыленных атомов при эмиссии с грани (001) Ag ( $Z = 47$ ) одновременно по  $1 - \cos \theta$  и энергии  $E$  для интервала азимутальных углов  $\varphi$   $[76.5^\circ; 79.5^\circ]$ . Верхний хребет образован в основном фокусированными атомами, нижний — только перефокусированными атомами

наблюдаемых максимумов на рис. 4. С увеличением атомного номера  $Z$  вещества мишени происходит сдвиг всей структуры распределения в сторону нормали к поверхности (вверх). Становится понятным, почему при этом происходит сдвиг низкоэнергетических максимумов фокусированных и перефокусированных атомов в сторону меньших энергий (рис. 4), сдвиг высокоэнергетического максимума в сторону бóльших энергий и расширение области “запрещенных” энергий между низкоэнергетической частью и высокоэнергетической частью распределения по энергии, то есть увеличение области тени.

В разделе 3.3 был рассчитан параметр  $m_{\text{eff}}$  в зависимости коэффициента распыления от энергии связи, который не совпадает с параметром  $m$  из функции начального распределения атомов при эмиссии из узла решетки на поверхности грани (001) Ni. Параметр  $m$  численно характеризует жесткость взаимодействия атомов друг с другом в энергетическом сечении столкновения



Линхарда

$$\frac{d\sigma(T)}{dT} = C\epsilon^{-m}T^{-1-m}, \quad 0 \leq m \leq 1, \quad (1)$$

где  $\epsilon$  — энергия падающего иона или атома,  $T$  — энергия отдачи, константы  $C$  и  $m$  зависят от атомных номеров и масс частиц. Сечение Линхарда приводит к начальной функции распределения

$$F_0(E_0, \cos \theta_0) = \frac{\cos \theta_0}{E_0^{2-2m}}, \quad (2)$$

с помощью которой П. Зигмунд получил зависимость коэффициента распыления от энергии связи в виде  $Y \propto 1/E_b^{1-2m}$  [18]. Как было показано ранее, применительно к однокомпонентным мишеням [19] рассеяние эмитированных атомов на стадии вылета приводит к сдвигу значения параметра  $m_{\text{eff}}$  в зависимости коэффициента распыления от энергии связи  $Y \propto 1/E_b^{1-2m_{\text{eff}}}$  в сторону значений, меньших  $m$ , в том числе в сторону отрицательных значений при  $m = 0$ .

Уменьшение параметра  $m$  в модели 20 атомов в результате эмиссии с поверхности (001) Ni показывает определяющую роль надповерхностного рассеяния при распылении атома. Значение  $m_{\text{eff}}$  (при  $m = 0$ ), рассчитанное по методу наименьших квадратов, составляет  $-0.073$  для всех эмитированных атомов,  $-0.148$  отдельно для фокусированных атомов,  $-0.389$  отдельно для перефокусированных атомов (что в 2.6 раза больше, чем для фокусированных атомов).

В разделе 3.4 рассматривалось влияние изменения энергии связи и магнитного состояния материала мишени на эффект перефокусировки атомов при эмиссии с грани (001) Ni. Было обнаружено, что при увеличении поверхностной энергии связи максимумы дифференциальных энергетических распределений (как фокусированных, так и перефокусированных атомов) сдвигаются в сторону более высоких энергий. Сдвиг приблизительно в 2 раза превышает изменение энергии связи. При изменении магнитного состояния Ni из парамагнитного в ферромагнитное не только увеличивается энергия связи (на 5%), но и возникает добавка к потенциалу взаимодействия атомов из-за эффекта спинового

обменного взаимодействия. Оба изменения приводят к сдвигу максимумов в одну сторону, суммарный сдвиг для (001) Ni составляет около 2 эВ, то есть 45% энергии связи парамагнитного никеля. Таким образом, фокусированные и перефокусированные атомы очень чувствительны к изменению энергии связи, особенно при магнитном фазовом переходе.

Результаты третьей главы опубликованы в работах [A2–A3,A5].

**В четвертой главе** проводилось сопоставление модели 20 атомов с приближенной к реальному эксперименту полномасштабной МД-моделью, в которой монокристаллический блок (001) Ni бомбардировался ионами Ar с энергией 200 эВ. В рамках полномасштабной модели использовался наиболее реалистичный потенциал Акланда, учитывающий многочастичные взаимодействия атомов Ni. Использование диссипативного члена в уравнениях движения классической механики позволило погрузить монокристаллический блок в термостат, температура которого задавалась равной 300 К или 0 К. Для всех распыленных атомов были рассчитаны энергия и углы (полярный и азимутальный) не только на большом расстоянии от поверхности атомного блока (10 Å), но и на высоте 0.3 Å от усредненной поверхности кристалла — так называемые *начальные* энергия и углы.

В разделе 4.1 был рассчитан интегральный коэффициент распыления и угловые распределения распыленных атомов. Пятна Венера наблюдаются в направлении, соответствующего направлению плотной упаковки  $\langle 011 \rangle$  в кристаллической решетке. Хотя в конечном распределении распыленных атомов (по полярному углу наблюдения) наблюдается максимум на угле  $45^\circ$ , в распределении по начальному полярному углу такой максимум отсутствует, что говорит о слабом влиянии каскадных механизмов на формирование пятен Венеры.

В рамках полномасштабной МД-модели был выявлен немонотонный сдвиг максимума распределения распыленных атомов по полярному углу с разрешением по энергии наблюдения. Этот эффект наблюдался как экспериментально, так и в модели 20 атомов. При низких энергиях (2–3 эВ) максимум наблюдает-

ся на угле  $53^\circ$ , затем при увеличении энергии максимум смещается в сторону меньших углов до положения  $43^\circ$  (при энергии 8–10 эВ), с дальнейшим ростом энергии максимум смещается в противоположную сторону (уже не так быстро), достигая положения  $46^\circ$  при 20–30 эВ. Немонотонный сдвиг был наглядно продемонстрирован, как и в предыдущих главах, с помощью распределения распыленных атомов одновременно по полярному углу и энергии наблюдения.

В разделе 4.2 обсуждаются распределения распыленных атомов по азимутальному углу, полученные в рамках полномасштабной МД-модели для 0 К и 300 К. В направлении  $\langle 010 \rangle$  на центр линзы ( $90^\circ$ ) из двух атомов поверхности наблюдается максимум распределения распыленных атомов по азимутальному углу наблюдения, который наблюдается и в распределении по начальному азимутальному углу. Показано, что в несимметричных относительно центра линзы интервалах азимутального угла наблюдаются атомы, перефокусированные через центр линзы. Перефокусированные атомы в целом составляют 36% и 33% от общего числа распыленных атомов, для 0 К и 300 К соответственно.

В разделе 4.3 обсуждается распределение распыленных атомов одновременно по полярному углу и энергии для несимметричного относительно центра линзы интервала азимутального угла наблюдения  $87^\circ \pm 1.5^\circ$  (рис. 6). Подобно модели 20 атомов, в этом распределении наблюдаются отдельные хребты.

Анализ показал, что хотя хребты разных групп атомов смешиваются друг с другом, тем не менее, можно сказать, что хребты II и III образованы в основном перефокусированными атомами, хребты I и IV — собственными и фокусированными атомами. Таким образом, в экспериментах по распылению грани (001) Ni с хорошим угловым и энергетическим разрешением при низких температурах можно ожидать наличие тонкой структуры в распределениях распыленных атомов для несимметричных относительно направления  $\langle 010 \rangle$  интервалов азимутального угла.

Результаты четвертой главы опубликованы в работе [A7].

**В Заключение** приведены результаты и выводы исследования:

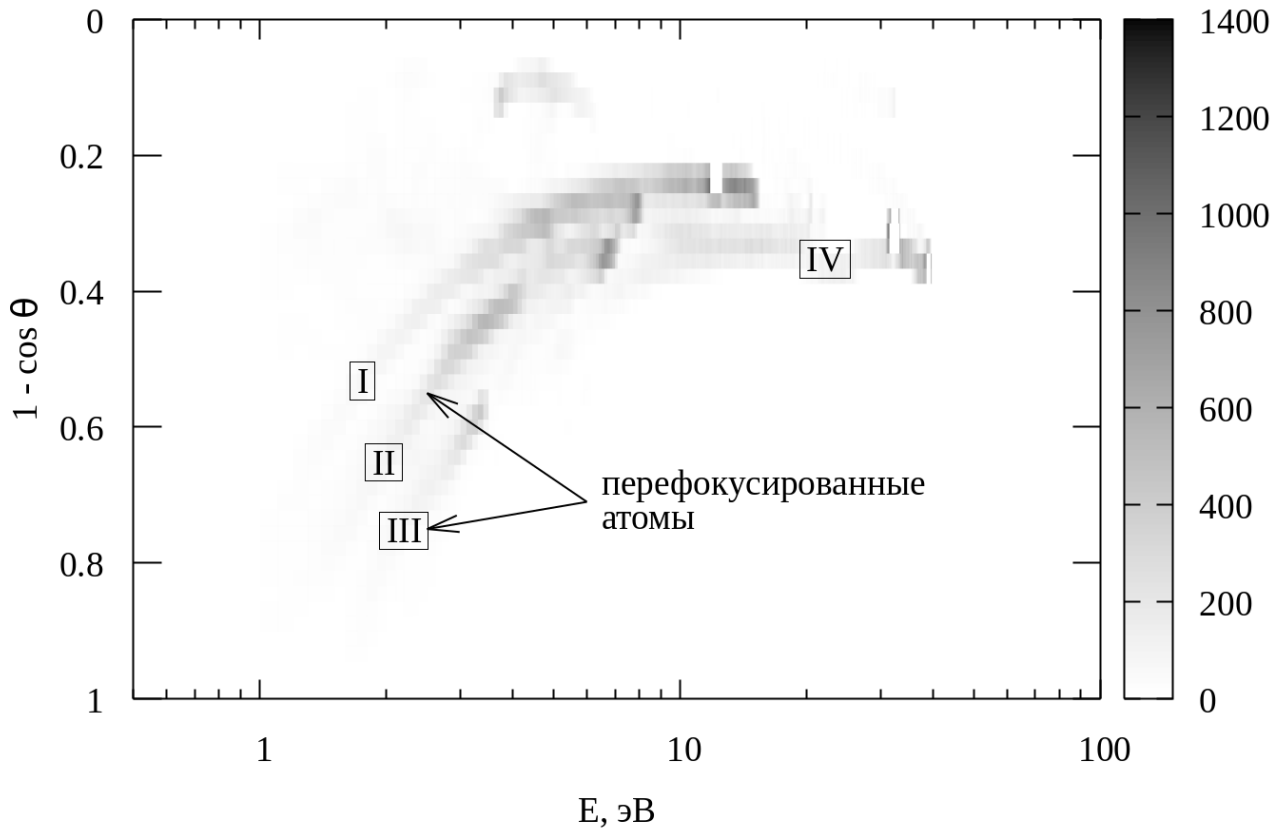


Рис. 6. Распределение распыленных атомов по энергии  $E$  и  $1 - \cos \theta$ , наблюдаемых в интервале азимутальных углов  $\varphi$   $[85.5^\circ; 88.5^\circ]$ . Два нижних хребта образованы в основном перефокусированными атомами

1. Рассчитаны распределения атомов, распыленных с поверхности монокристалла (001) Ni, по начальному азимутальному углу и энергии наблюдения. Обнаружена многозначность фокусированных и перефокусированных атомов по начальному азимутальному углу при низких энергиях наблюдения. Многозначность связана с двумя различными траекториями рассеяния перефокусированных атомов: на одном или на двух атомах-соседях.
2. Найдены такие телесные углы и значения энергии наблюдения, в которых все распыленные атомы на 100% являются перефокусированными. В распределении с разрешением одновременно по полярному углу и энергии разрешаются отдельные максимумы для фокусированных и перефокусированных атомов в виде “хребтов”. Показано, что сигнал перефокусированных атомов можно выделить экспериментально при достаточном

разрешении по углам и энергии.

3. Установлено, что при переходе никеля из парамагнитного состояния в ферромагнитное уменьшается количество распыленных атомов. Группы фокусированных и перефокусированных атомов более чувствительны, чем все распыленные атомы в целом, при изменении магнитного состояния мишени.
4. Обнаружены сильные сдвиги максимумов в распределении атомов по углам и энергии с ростом энергии связи и фазовом переходе II рода из парамагнитного в ферромагнитное состояние. При увеличении энергии связи максимумы фокусированных и перефокусированных атомов смещаются вправо по оси энергий. Сформулированы условия лучшего разрешения максимумов фокусированных и перефокусированных атомов — использование мишени с большей энергией связи.
5. Обнаружено изменение распределений фокусированных и перефокусированных распыленных атомов по энергии с разрешением одновременно по полярному и азимутальному углам с ростом атомного номера вещества мишени. При этом происходит сдвиг низкоэнергетических максимумов в сторону меньших энергий. Максимум при высоких энергиях, который формируется фокусированными сильно заблокированными атомами, напротив, смещается в сторону более высоких энергий.
6. Найдены сдвиги максимумов в распределениях распыленных атомов по полярному углу при увеличении атомного номера вещества мишени. Отдельные максимумы фокусированных и перефокусированных атомов при энергиях до 10 эВ с ростом атомного номера сдвигаются в сторону нормали к поверхности, как и высокоэнергетический максимум. Сдвиг к нормали связан с усилением эффекта блокировки, вклад которого растет из-за увеличения сечения взаимодействия.
7. Из-за роста сечения взаимодействия атомов структура распределения распыленных атомов с одновременным разрешением по энергии и полярному

углу резко сдвигается в сторону нормали к поверхности (по углу) и в сторону более низких энергий распыленных атомов.

8. Именно поверхностные механизмы фокусировки ответственны за формирование пятен Венера, поскольку в распределении распыленных атомов по начальному полярному углу (рассчитанному на расстоянии  $0.3 \text{ \AA}$  от поверхности) отсутствует максимум на угле  $45^\circ$ , наличие которого предсказывается фокусонным механизмом, а также другими каскадными механизмами.
9. Модель 20 атомов хорошо согласуется с полномасштабной МД-моделью. В рамках обеих моделей: полномасштабной МД-модели и модели 20 атомов обнаружен немонотонный сдвиг максимума распределения распыленных атомов по полярному углу с увеличением энергии наблюдения, который наблюдается экспериментально.
10. В полномасштабной МД-модели также были найдены атомы, перефокусированные через центр линзы, которые составляют 36% всех атомов при температуре мишени 0 К и 33% при температуре 300 К. Для несимметричного относительно направления  $\langle 010 \rangle$  на центр линзы интервала азимутального угла наблюдения в распределении распыленных атомов одновременно по полярному углу и энергии найдены отдельные хребты, подобные тем, что были обнаружены в модели 20 атомов. Показано, что в экспериментах по распылению грани (001) Ni с хорошим угловым и энергетическим разрешением при низких температурах можно ожидать наличие тонкой структуры в распределениях распыленных атомов для несимметричных относительно направления  $\langle 010 \rangle$  интервалов азимутального угла.

## Публикации автора по теме диссертации

Статьи в рецензируемых научных журналах, индексируемых в базах данных Web of Science, Scopus, RSCI, а также в изданиях, рекомендованных для защиты в диссертационном совете МГУ по специальности:

- A1. *Самойлов В. Н., Мусин А. И., Ананьева Н. Г.* Об особенностях распределений перефокусированных распыленных атомов, эмитированных с грани (001) Ni, по углам и энергии // [Известия РАН. Серия физическая](#). 2016. Т. 80, № 2. С. 122–125. In English: *V. N. Samoilov, A. I. Musin, N. G. Ananieva*. Specific features of the angular and energy distributions of overfocused sputtered atoms ejected from the (001) Ni face // [Bull. Russ. Acad. Sci. Phys.](#) **80** (2), 109–112 (2016). Импакт-фактор 0.238 (Scopus). Вклад автора — 0.6
- A2. *Самойлов В. Н., Мусин А. И.* Эффекты фокусировки атомов, эмитированных с грани (001) Ni, с разрешением по углам и энергии // [Известия РАН. Серия физическая](#). 2018. Т. 82, № 2. С. 171–176. In English: *V. N. Samoilov, A. I. Musin*. Effects of Focusing for Atoms Sputtered from a Ni (001) Face with Angle and Energy Resolution // [Bull. Russ. Acad. Sci. Phys.](#) **82** (2), 150–154 (2018). Импакт-фактор 0.238 (Scopus). Вклад автора — 0.7
- A3. *Самойлов В. Н., Мусин А. И.* Эволюция энергетических и угловых распределений эмитированных атомов с изменением атомного номера вещества мишени // [Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования](#). 2020. № 7. С. 104–112. In English: *V. N. Samoilov, A. I. Musin*. Evolution of the Energy and Angular Distributions of Emitted Atoms with a Variation in the Atomic Number of the Target Substance // [J. Surf. Investig.](#) **14** (4), 743–750 (2020). Импакт-фактор 0.206 (Scopus). Вклад автора — 0.7

**Статьи в сборниках трудов конференций:**

- А4. *Самойлов В. Н., Мусин А. И.* Об особенностях распределений перефокусированных атомов, эмитированных с грани (001) Ni, по углам и энергии // Труды 22-й Международной конференции “Взаимодействие ионов с поверхностью (ВИП-2015)”, Москва, 20-24 августа 2015. Москва: Изд-во НИЯУ МИФИ, 2015. Т. 1. С. 143–146.
- А5. *Самойлов В. Н., Мусин А. И.* Эффекты фокусировки атомов, эмитированных с грани (001) Ni, с разрешением по углам и энергии // Труды 23-й Международной конференции “Взаимодействие ионов с поверхностью (ВИП-2017)”, Москва, 21-25 августа 2017. Москва: Изд-во НИЯУ МИФИ, 2017. Т. 1. С. 130–133.
- А6. *Мусин А. И.* Поверхностные механизмы фокусировки и перефокусировки атомов, эмитированных с поверхности грани (001) Ni // IV Музруковские Чтения: Материалы Всероссийской научно-практической конференции, Саров, 15 февраля 2018 г. Саров: Интерконтакт, 2018. С. 135–138.
- А7. *Мусин А. И., Корнич Г. В., Самойлов В. Н.* Распыление поверхности Ni (100) ионами Ag низкой энергии: молекулярно-динамическое моделирование // Труды 24-й Международной конференции “Взаимодействие ионов с поверхностью (ВИП-2019)”, Москва, 19-23 августа 2019. Москва: Изд-во НИЯУ МИФИ, 2019. Т. 1. С. 99–102.
- А8. *Мусин А. И., Самойлов В. Н.* Формирование энергетического распределения атомов, эмитированных с поверхности Ni (100) и наблюдаемых в малом телесном угле // Труды 25-й Международной конференции “Взаимодействие ионов с поверхностью (ВИП-2021)”, Ярославль, 23-27 августа 2021. Москва: Изд-во НИЯУ МИФИ, 2021. Т. 1. С. 123–127.



## Список литературы

1. Oechsner H. Secondary neutral mass spectrometry (SNMS) – recent methodical progress and applications to fundamental studies in particle/surface interaction // [International journal of mass spectrometry and ion processes](#). — 1995. — Vol. 143. — P. 271–282.
2. Benninghoven A. Surface analysis by secondary ion mass spectrometry (SIMS) // [Surf. Sci.](#) — 1994. — Vol. 299. — P. 246–260.
3. Silsbee R. H. Focusing in collision problems in solids // [J. Appl. Phys.](#) — 1957. — Vol. 28, no. 11. — P. 1246–1250.
4. Lehmann C., Sigmund P. On the mechanism of sputtering // [Physica status solidi \(b\)](#). — 1966. — Vol. 16, no. 2. — P. 507–511.
5. Nelson R. S., Thompson M. W. Atomic collision sequences in crystals of copper, silver and gold revealed by sputtering in energetic ion beams // [Proc. Royal Society. Series A. Math. Phys. Sci.](#) — 1961. — Vol. 259, no. 1299. — P. 458–479.
6. Harrison D. E. et al. Computer simulation of sputtering // [J. Appl. Phys.](#) — 1968. — Vol. 39, no. 8. — P. 3742–3761.
7. Самойлов В. Н. К вопросу о корректности описания углового распределения распыленных атомов в рамках аналитических моделей распыления аморфных мишеней // [Известия АН СССР, серия физическая](#). — 1990. — Т. 54, № 7. — С. 1283–1287.
8. Самойлов В. Н., Корсакова О. С., Елесин В. А. Механизмы образования угловых распределений атомов, распыленных с граней (001) и (111) Ni // [Известия РАН. Серия физическая](#). — 2000. — Т. 64, № 4. — С. 821–826.
9. Корсакова О. С. и др. Исследование поверхностного механизма фокусировки атомов, эмитируемых с поверхности грани (001) Ni, методом молекулярной динамики // [Поверхность](#). — 1997. — № 2. — С. 77–92.
10. SamoiloV V. N. et al. Contribution of the surface mechanism to sputtering

- of (001) Ni: molecular dynamics computer simulation studies // *Nucl. Instr. Meth. B.* — 1999. — Vol. 153, no. 1–4. — P. 319–325.
11. Шпиньков В. И., Самойлов В. Н. О фокусировке атомов, распыленных с грани (001) Ni, в случае гауссовых пучков эмитируемых атомов // *Поверхность.* — 2009. — № 3. — С. 73–79.
  12. 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.* — 2011. — № 4. — С. 34–46.
  13. Самойлов В. Н., Носов Н. В. Эффекты фокусировки по азимутальному углу атомов, эмитированных с граней (001) Ni и (001) Au // *Поверхность.* — 2014. — № 3. — С. 81–92.
  14. van Veen A. Sputtering and Scattering by Interaction of Low Energy Noble Gas Ions with Monocrystalline Metal Surfaces : Ph.D. Thesis / A. van Veen ; Univ. Utrecht, Utrecht, Netherlands. — 1979. — International Nuclear Information System [RN:11495566](#) (online; accessed: April 17, 2023).
  15. Baxter J. P. et al. Energy and angle-resolved studies of neutrals desorbed from ion bombarded polycrystalline metal surfaces // *Nucl. Instr. Meth. B.* — 1986. — Vol. 17, no. 4. — P. 300–304.
  16. Garrison B. J. Energy distributions of atoms sputtered from polycrystalline surfaces // *Nucl. Instr. Meth. B.* — 1986. — Vol. 17, no. 4. — P. 305–308.
  17. Самойлов В. Н., Дехтяр К. В. О некоторых новых особенностях распыления грани (111) Ni с одновременным угловым и энергетическим разрешением // *Известия РАН. Серия физическая.* — 2001. — Т. 65, № 9. — С. 1324–1327.
  18. Sigmund P. Recollections of fifty years with sputtering // *Thin Solid Films.* — 2012. — Vol. 520, no. 19. — P. 6031–6049.
  19. Shulga V. I. The density and binding effects in sputtering by ions of widely varying masses // *Nucl. Instr. Meth. B.* — 2002. — Vol. 195, no. 3–4. — P. 291–301.