

Федеральное государственное бюджетное
образовательное учреждение высшего образования
“Московский государственный областной педагогический университет”

На правах рукописи

Мусин Артем Игоревич

**Исследование механизмов распыления
монокристаллов методами молекулярной
динамики**

1.3.8 – Физика конденсированного состояния

ДИССЕРТАЦИЯ

на соискание ученой степени

кандидата физико-математических наук

Научный руководитель

к. ф.-м. н.

Самойлов Владимир Николаевич

Москва – 2023

Оглавление

Введение	4
Глава 1. Обзор литературы по ионному распылению кристаллов	11
1.1. Ионное распыление. Фундаментальные процессы, ответственные за распыление атомов с поверхности	11
1.2. Общие сведения об экспериментальных методах анализа вторичных частиц	18
1.3. Аналитические модели ионного распыления	25
1.4. Учет дискретной поверхности мишени на стадии вылета в аналитических моделях распыления	27
1.5. Использование методов компьютерного моделирования в исследованиях распыления	34
1.6. Фазовые переходы I и II рода и распыление	40
1.7. Численные модели, используемые в работе	43
Выводы к главе 1	48
Глава 2. Эффект перефокусировки при эмиссии атомов с поверхности грани (001) Ni	50
2.1. Пятна Венера и фокусировка по азимутальному углу	50
2.2. Распределения распыленных атомов по E и $1 - \cos \theta$	53
2.3. Вклад перефокусированных атомов в наблюдаемое распределение	55
2.4. Механизмы вылета перефокусированных атомов	60
Выводы к главе 2	65
Глава 3. Чувствительность распыленных атомов к изменению параметров мишени	67
3.1. Эволюция распределений распыленных атомов с изменением атомного номера вещества мишени	67

3.2. Зависимость коэффициента распыления от энергии связи	76
3.3. Перефокусировка при различных энергиях связи и магнитном фазовом переходе	81
Выводы к главе 3	86
Глава 4. Распределения распыленных атомов в МД-модели с па- дением ионов при 0 К и 300 К	88
4.1. Пятна Венеры и полярное угловое распределение	88
4.2. Фокусировка по азимутальному углу при 0 К и 300 К	96
4.3. Распределения распыленных атомов для несимметричных интер- валов азимутального угла	101
Выводы к главе 4	108
Основные результаты и выводы	111
Публикации автора по теме диссертации	114
Список литературы	119
Список сокращений и условных обозначений	133
Словарь терминов	134
Благодарности	136

Введение

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 [1], и даже получение ультраструктурных изображений живых клеток [2].

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 [3], 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) [4] и масс-спектрометрия вторичных ионов (Secondary Ion Mass Spectrometry, SIMS) [5], 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 [6], механизм Лемана-Зигмунда [7] и механизм линзовой фокусировки Нельсона-Томпсона [8]. В дальнейшем оказалось, что главную роль в распылении играют поверхностные механизмы, связанные с движением атомов в верхних слоях [9].

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 [10]. Аналитические модели распыления с учетом дискретности поверхности развивались В. Н. Самойловым, О. С. Корсаковой и соавторами в работах [11–16]. По азимутальному углу распыленные атомы были разделены на собственные, сфокусированные и пересфокусированные.

Численные модели распыления с учетом дискретной поверхности в рамках метода молекулярной динамики были предложены В. Н. Самойловым и Н. В. Носовым [17, 18] для стадии эмиссии атомов с поверхности (001) Ni и (001) Au. Были рассчитаны вклады собственных, сфокусированных и пересфокусированных 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 в рецензируемых научных журналах, индексируемых в базах данных Web of Science, Scopus, RSCI, 5 статей в сборниках трудов конференций и 17 тезисов докладов. Все публикации отражены на личной странице автора в системе ИСТИНА: <https://istina.msu.ru/profile/fgir>.

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.

Глава 1

Обзор литературы по ионному распылению кристаллов

1.1. Ионное распыление. Фундаментальные процессы, ответственные за распыление атомов с поверхности

В середине XIX в. В. Р. Гроув исследовал газовые разряды и обнаружил, что материал, из которого сделан катод, оказывается на стеклянных стенках разрядной камеры [19], как бы испаряясь. Это явление в настоящее время называют “ионным распылением”, поскольку при взаимодействии ионов из разряда с поверхностью катода атомы распылялись и осаждались на стенках. Количество распыление характеризуется *коэффициентом распыления*:

$$Y = \frac{N(M)}{N(A^+)}, \quad (1.1)$$

где $N(A^+)$ — число ионов A^+ , упавших на поверхность материала, $N(M)$ — количество распыленных атомов M . Также возможно ввести коэффициент распыления димеров M_2 , тримеров M_3 и так далее, а также тех или иных молекул.

Около 100 лет считалось, что распыление происходит из-за локального нагрева падающей частицей поверхности и последующего испарения. Однако в 1955 г. Г. Венер при распылении монокристалла серебра медленными ионами ртути (с энергией менее 300 эВ) обнаружил, что распыленные атомы вылетают преимущественно в направлениях вблизи основных кристаллографических осей [20], то есть эффект анизотропии углового распределения эмитированных атомов. Позднее В. Е. Юрасовой [21, 22] было показано, что анизотропный характер распыления монокристаллов сохраняется и при более высоких энергиях падающих ионов, вплоть до 50 кэВ. Таким образом, экспериментально было доказано, что вылет атомов с поверхности происходит не из-за испарения, иначе

угловое распределение распыленных атомов было бы изотропным.

Гипотезу о термическом испарении опровергают также эксперименты с энергетическим разрешением распыленных атомов. В работе [23] экспериментально были получены распределения по энергии вылета E распыленных атомов поликристалла Au при бомбардировке ионами Ag с энергиями от 10 до 41 кэВ. Все распределения имеют следующие характерные особенности: максимум при низких энергиях и убывание при более высоких энергиях, при этом всегда имеются атомы с энергиями выше тепловых.

Процесс формирования максимумов эмиссии двумерного углового распределения (они называются *пятнами Венеры*) — первый из обнаруженных ориентационных эффектов, имеющих место при взаимодействии ионов с поверхностью монокристалла. В дальнейшем были обнаружены и другие ориентационные эффекты: каналирование ионов [24, 25], анизотропия вторичной ионной [26, 27] и электронной [28, 29] эмиссии.

Открытие Венеры привело к всплеску научного интереса к распылению. Возникла потребность выяснить, какие *фундаментальные механизмы* ответственны за распыление атомов с поверхности. На сегодняшний день выделяют три режима распыления (рис. 1.1) в модели упругих столкновений.

1. **Режим первичного выбивания.** Атомы, выбитые из равновесных положений в результате ион-атомных столкновений, получают энергию, достаточную для того, чтобы быть распыленными, но слишком малую для того, чтобы создать каскад выбитых атомов.
2. **Режим линейных каскадов.** Атомы, выбитые в результате ион-атомных столкновений из равновесных положений, получают энергию, достаточную для того, чтобы создать целый каскад выбитых атомов (рис. 1.2). Плотность распределения выбитых атомов невелика, так что преобладают столкновения движущихся атомов с неподвижными, а столкновения двух движущихся атомов происходят редко.

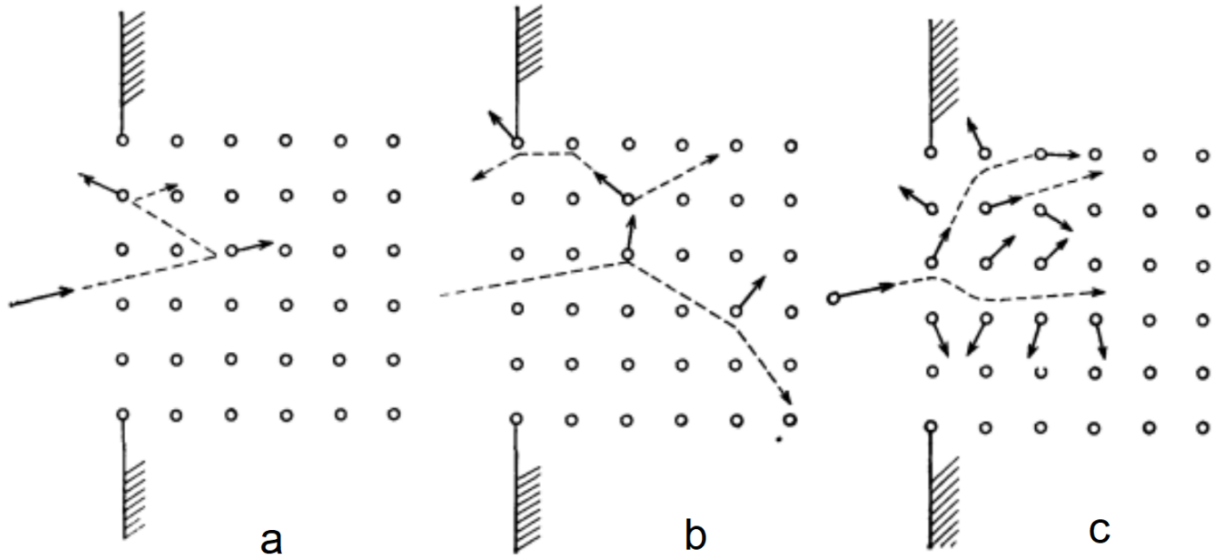


Рис. 1.1. Три режима распыления: режим первичного прямого выбивания (а), режим линейных каскадов (b), режим тепловых пиков (с) [3]

3. Режим тепловых пиков. Плотность распределения атомов отдачи высока настолько, что большинство атомов внутри некоторого объема (объема теплового пика) находится в движении.

В случае (а) энергия упавшего иона передается атомам мишени, которые могут после небольшого числа дальнейших столкновений выйти через поверхность. Если атом выбивается прямым столкновением, можно рассмотреть классическую механическую задачу упругого столкновения двух тел. В этом случае энергии частиц определяются по формулам

$$E_1 = E_0 \left(\frac{m_1 \cos \gamma \pm \sqrt{m_2^2 - m_1^2 \sin^2 \gamma}}{m_1 + m_2} \right)^2, \quad (1.2)$$

$$E_2 = \frac{4m_1 m_2}{(m_1 + m_2)^2} E_0 \cos^2 \gamma. \quad (1.3)$$

Здесь E_0 — энергия налетающей частицы 1, начальная энергия частицы 2 полагается равной нулю, γ — угол рассеяния.

Процессы многократного рассеяния в режимах (b) и (с) можно исследовать на основе теории переноса и получить аналитические формулы для коэффициента распыления. Это было сделано П. Зигмундом для аморфных и поликристаллических мишеней в режиме линейных каскадов [31], в дальнейшем им же

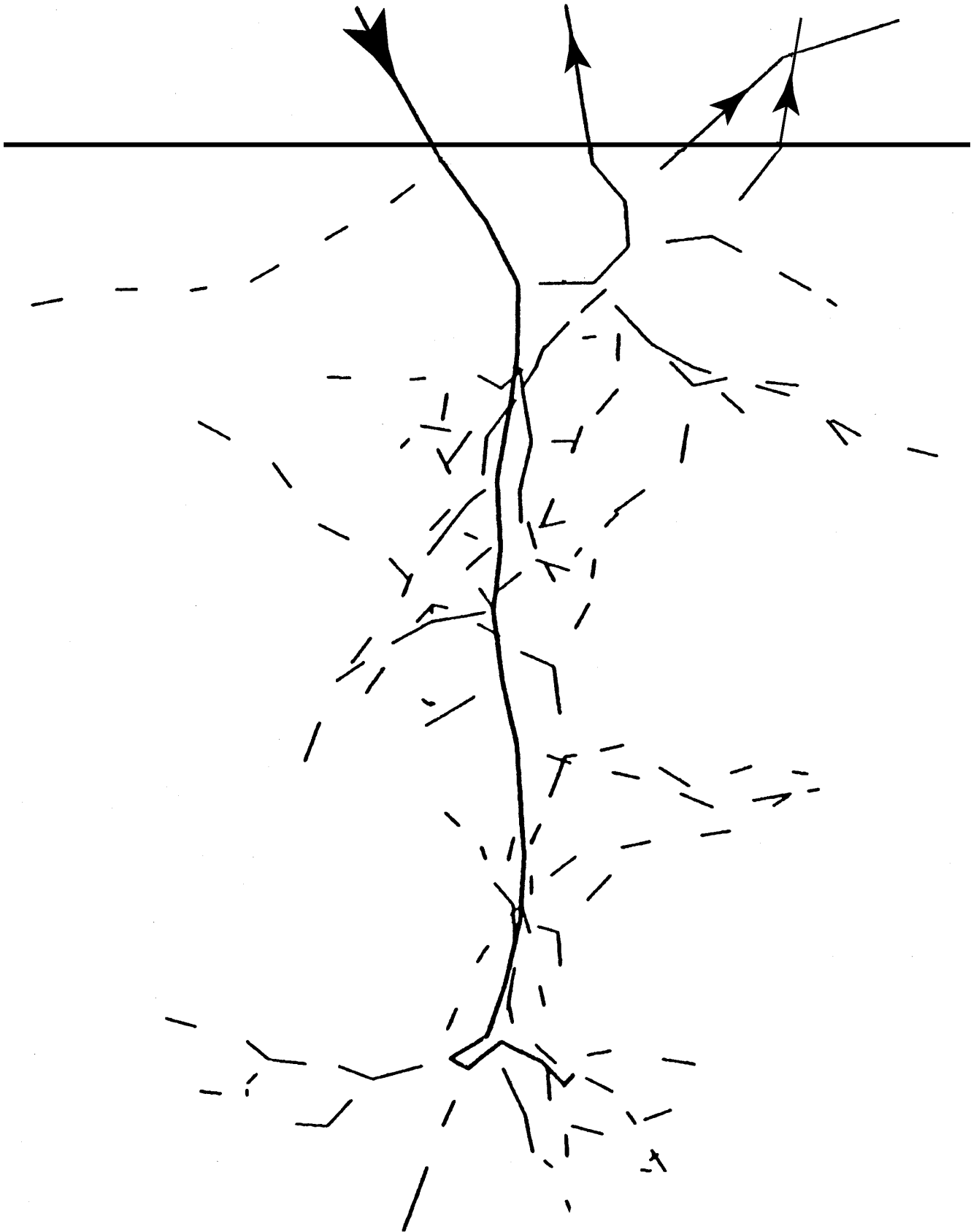


Рис. 1.2. Пример [30] каскада столкновений, вызванный ионом Ar с энергией 1 кэВ при падении под углом 30° на поверхность Ni, рассчитанный в программе TRIM.SP. Каскад привел к распылению трех атомов

были получены результаты для режима тепловых пиков [32].

В теории Зигмунда коэффициент распыления в режиме линейных каскадов может быть вычислен по формуле

$$Y = \Lambda \iint E_D(x, y, z)|_{z=0} dx dy, \quad (1.4)$$

где Λ — константа, зависящая от вещества мишени, $E_D(x, y, z)$ — пространственное распределение энергии в каскаде столкновений. Таким образом, коэффициент распыления оказывается пропорционален той части энергии каскада, которая поглотилась приповерхностным слоем атомов мишени.

Теория Зигмунда приобрела настолько значительную популярность, что к началу 1980-х, как отмечает Дж. Фальконе в своем обзоре [33], “вопреки самим авторам”, теория использовалась для описания распыления без выяснения области ее применимости. Однако теория не лишена существенных недостатков — она использует приближение сплошной среды и не учитывает структуру мишени. Поэтому формулу (1.4) нельзя применить для расчета коэффициента распыления монокристаллов. Однако для аморфных тел теория Зигмунда может быть вполне применима. Неоднократно предпринимались попытки улучшить и модифицировать модель Зигмунда, например [34, 35].

Для объяснения специфических особенностей распыления монокристаллов проводились интенсивные теоретические исследования влияния кристаллической решетки на развитие атомных столкновений в твердых телах и на вылет атомов с поверхности.

В 1957 г. была опубликована работа Р. Силсби, в которой он рассмотрел задачу с последовательными фокусированными столкновениями в цепочке атомов [6]. Силсби считал, что такая последовательность столкновений (фокусон) зарождается на глубине во много атомных слоев от поверхности кристалла и эффективно передает импульс в плотноупакованных направлениях кристаллической решетки, что и приводит к распылению атомов именно в этих направлениях. Если считать атомы жесткими сферами, то фокусировка столкновений

будет иметь место при энергиях, меньших некой предельной E_f , которая называется энергией фокусировки.

Позднее в ряде экспериментов было показано, что пятна Венера могут наблюдаться и в направлениях, не совпадающих с плотноупакованными направлениями. Например, при бомбардировке поверхности (111) металла было обнаружено, что пятна Венера наблюдаются не на углах 55° (угол, под которым цепочка атомов $\langle 001 \rangle$ выходит на поверхность (111)), а на углах около 40° от нормали к поверхности [3]. Подобный эффект был обнаружен также для цепочки атомов $\langle 011 \rangle$, выходящей на поверхность (001) кристалла под углом 45° . Эксперименты [36] показали, что в этом случае пятна Венера отклоняются в противоположном направлении от нормали к поверхности и наблюдаются под углом около 50° .

Фокусонный механизм Силсби был исследован с помощью методов компьютерного моделирования в ряде работ [37–39] с энергиями падающих ионов выше 1 кэВ. Однако данный механизм оказался не в состоянии объяснить образование пятен Венера при бомбардировке монокристаллов низкоэнергетичными ионами (с энергиями несколько десятков эВ), которые тем не менее наблюдаются экспериментально [40]. При таких условиях низкой энергии иона недостаточно для возникновения фокусированной цепочки столкновений из глубоких слоев, приводящей к распылению, т.к. у эмитированного с поверхности атома не хватает энергии для преодоления сил притяжения к атомам поверхности. Впрочем, работа Силсби позволила качественно объяснить формирование пятен Венера и стала классической работой в этой области.

Позднее были предложены и другие механизмы: механизм Лемана-Зигмунда, в котором предполагается, что каскад столкновений из изотропной среды проходит через два упорядоченных слоя [7] и механизм линзовой фокусировки Нельсона-Томпсона, согласно которому импульс фокусируется линзами из атомов [8]. Все эти механизмы называются *каскадными*.

Для объяснения возникновения пятен Венера предлагались также *поверх-*

ностные механизмы фокусировки. Например, в 1957 г. Хеншке предложил механизм фокусировки вблизи поверхности в нескольких атомных слоях [41, 42]. В модели предполагается, что ион при соударении с двумя верхними слоями решетки отражается от нижних слоев атомов, а затем при движении обратно к поверхности выбивает атом первого слоя. Таким образом, упорядоченное положение атомов верхних слоев кристалла определяет направления преимущественного вылета. Модель Хеншке, как и модель Силсби, смогла дать качественное описание картины распыленных атомов, получаемой экспериментально на коллекторе.

В 1968 г. Д. Харрисоном [9] было показано, что фокусоны, если они возникают, в большинстве случаев направлены вглубь кристалла или параллельно поверхности, и, следовательно, не влияют на распыление. Были выделены несколько механизмов выбивания атомов с поверхности. Главную роль в распылении играют поверхностные механизмы, связанные с движением атомов в верхних слоях. Механизмы, связанные с движением атомов в нескольких слоях, дают незначительный вклад в распыление, поэтому авторы работы [9] делают красноречивый вывод: “Сейчас мы уверены, что распыление — это чисто поверхностное явление”.

Вопрос о глубине выхода распыленных атомов исследовался очень подробно как аналитически [43], так и с использованием вычислительных методов: молекулярной динамики, метода парных столкновений, метода Монте-Карло [44]. Был сделан вывод, что средняя глубина выхода распыленных атомов мала.

Дж. Фальконе [45] ввел характеристику $f(\lambda)$, которая обозначает долю атомов, вылетающих из слоев, находящихся глубже слоя с номером λ (таким образом, $f(0) = 1$). В работе [46] было получено выражение

$$f(\lambda) \cong \exp(-5\lambda/4L), \quad (1.5)$$

где L — средняя глубина выхода частиц. Например, при бомбардировке Al ионами кислорода [47] из экспериментальных данных следует, что 86% атомов распыляется из первого слоя, 12% из второго слоя и только 2% из более глубоких слоев.

1.2. Общие сведения об экспериментальных методах анализа вторичных частиц

На сегодняшний день собрано значительное количество экспериментальных данных для коэффициентов распыления различных материалов, особенно для одноатомных металлических мишеней с поликристаллической, монокристаллической и аморфной структурой. Коэффициент распыления зависит от массы, энергии и угла падения бомбардирующего иона, от поверхностной энергии связи, кристаллической структуры и ориентации кристаллографических осей мишени. При энергии иона ниже пороговой (значение пороговой энергии может быть от 5 до 400 эВ для нормального падения) распыление не наблюдается. Увеличение энергии падающего иона приводит вначале к увеличению коэффициента распыления, однако при высоких энергиях (для разных мишеней это от 1 до 150 кэВ) он снижается. Снижение происходит из-за увеличения глубины проникновения иона в поверхность и, вследствие этого, затрудненного выхода частиц из глубоко расположенного каскада столкновений. Все эти результаты обобщались и публиковались в большом количестве обзорных статей и книг, обширную библиографию можно найти, например, в [30].

Вторичные частицы в основном распыляются в нейтральном состоянии и не более 5% в виде ионов. Определенная часть может быть распылена в виде атомных кластеров.

Измерение коэффициента распыления сводится к измерению тока падающих ионов, а также потока распыленных частиц одним из следующих методов:

1. **Взвешивание.** Если за время эксперимента масса мишени уменьшилась на Δm , то коэффициент распыления может быть рассчитан как

$$Y = \frac{\Delta m}{M_2 n_1}, \quad (1.6)$$

где M_2 — масса атома мишени, n_1 — число упавших ионов. Формула справедлива только в случае, если имплантацией ионов можно пренебречь.

2. **Измерение толщины.** При бомбардировке тонкой пленки количество распыленных атомов можно определить, если измерить уменьшение толщины, например, методом резерфордовского обратного рассеяния. Для металлических пленок также можно измерять толщину через электрическое сопротивление [48].
3. **Сбор на коллекторе.** Для этого метода распыленные атомы собирают на специальном устройстве — коллекторе. Погрешности метода возникают из-за ограниченного телесного угла детектирования (который всегда меньше 2π), а также из-за рассеяния и распыления атомов на коллекторе, что особенно существенно при высоких энергиях вторичных частиц.
4. **Полевая ионная микроскопия.** Этот метод позволяет подсчитать отдельные атомы, распыленные с кончика иглы, но возникают проблемы с определением потока падающих ионов [49].
5. **Спектроскопия.** После распыления нейтральные атомы ионизируются: электронным ударом [50, 51] (на этом основан классический метод SNMS), лазерным излучением [52, 53] (в методе лазерного SNMS) или плазмой, расположенной перед мишенью [54]. Полученные ионы сепарируются по массе и формируют масс-спектр. Эффективность пост-ионизации может быть очень высокой и достигать почти 100%, однако зависит от энергии нейтральных атомов.

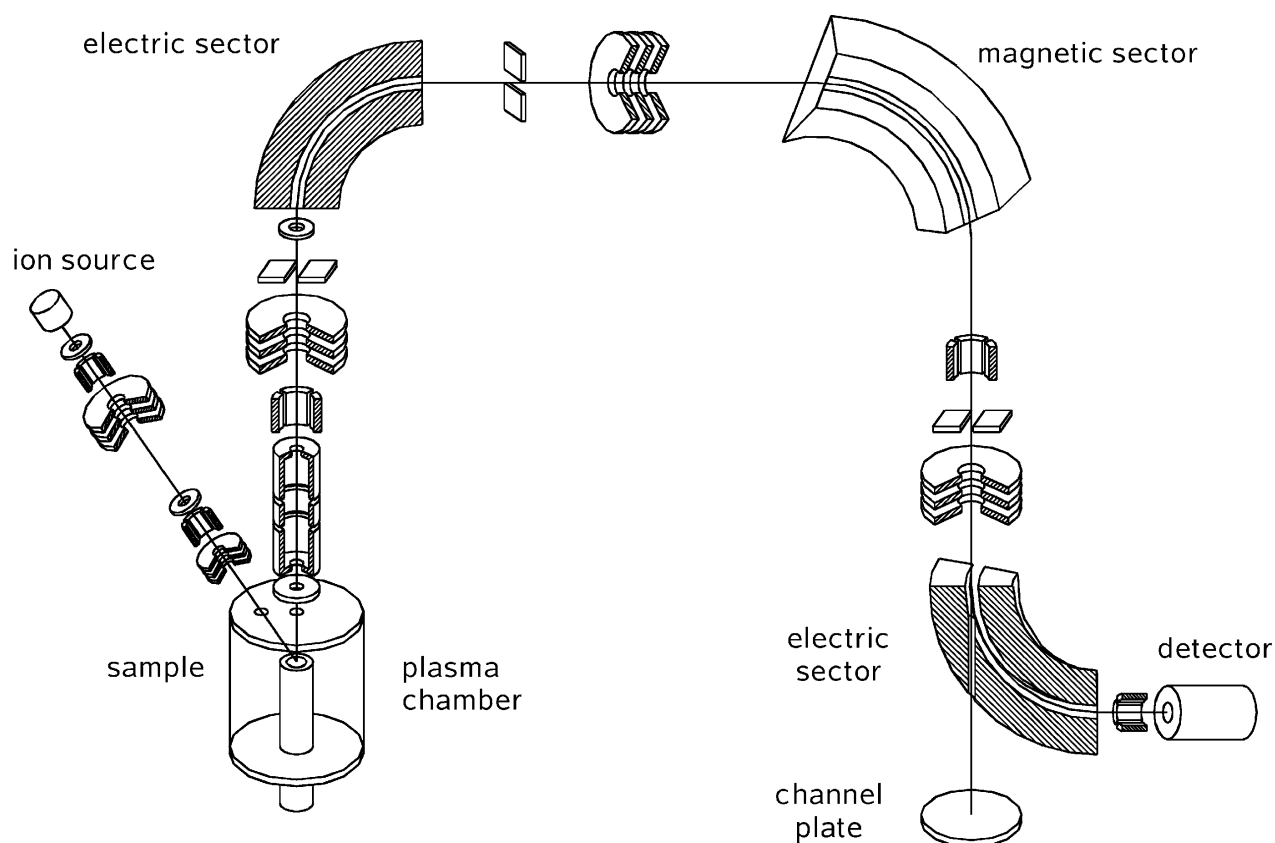


Рис. 1.3. Схема установки для метода SNMS. Электроны разреженной плазмы ионизируют распыленные нейтральные атомы. Спектрометр состоит из последовательных электрических и магнитных анализаторов [55]

Для получения подробной информации о поверхности мишени необходим анализ энергетических и угловых распределений распыленных нейтральных частиц (SNMS) и вторичных ионов (SIMS).

В ранних исследованиях использовались техники динамометрии [56–58] или калометрии [59] для определения *средней* энергии и импульса распыленных атомов. В дальнейшем были разработаны три метода: *метод электростатического анализа, метод флуоресценции и времяпролетный метод.*

В первом методе заряженные частицы направляются в электростатический энергоанализатор сферической или цилиндрической формы. Подобные анализаторы используются и для электронной спектроскопии. В электростатическом поле анализатора частицы разделяются в пространстве по энергии, в зависимости от геометрических параметров анализатора и энергии частиц энергетическое разрешение в таких устройствах может быть от нескольких десятых эВ до

нескольких эВ. Электростатические энергоанализаторы могут комбинироваться с магнитными анализаторами, как показано на рис. 1.3. Также для сепарации широко используется так называемый *квадрупольный масс-анализатор* [60].

Во втором методе используется излучение распыленных атомов, находящихся в возбужденном состоянии. Это излучение может дать информацию о скорости атомов, если измерить интенсивность света как функцию расстояния до поверхности мишени [61]. Хотя метод активно использовался в прошлом, сейчас его применение ограничено из-за возможности возникновения атомов в метастабильных состояниях с большим временем жизни. Для изучения распределения атомов по скоростям применяется доплеровская лазерная флуоресцентная спектроскопия [62]. Так, если атом летит со скоростью v под углом α к лазерному пучку, то его частота возбуждения сдвигается на величину

$$\Delta\omega = \frac{v}{c} \omega_0 \cos \alpha, \quad (1.7)$$

где ω_0 — резонансная частота (без сдвига). Сечение возбуждения атомов обычно довольно велико и не зависит от скорости. При данном методе может получиться разрешение до нескольких м/с по скорости.

Третий метод, времяпролетный, также называют ToF (от time-of-flight). Данный метод использовался для измерения распределения распыленных атомов по скоростям еще в работе Томпсона в 1960-х [63]. Там ToF был реализован благодаря вращающемуся диску с щелью, скорость вращения которого подбиралась так, чтобы пропускать распыленные атомы с определенными скоростями. Таким образом Томпсон и его соавторы измерили энергетические спектры при распылении поликристаллических и монокристаллических мишеней, с разными условиями бомбардировки.

Поскольку времяпролетный метод нечувствителен к массе частиц, он позволяет получить только распределение по скоростям для полного потока распыленных частиц. Чтобы преодолеть это ограничение, ToF комбинируют с масс-анализатором, обычно квадрупольным, как в работе [64].

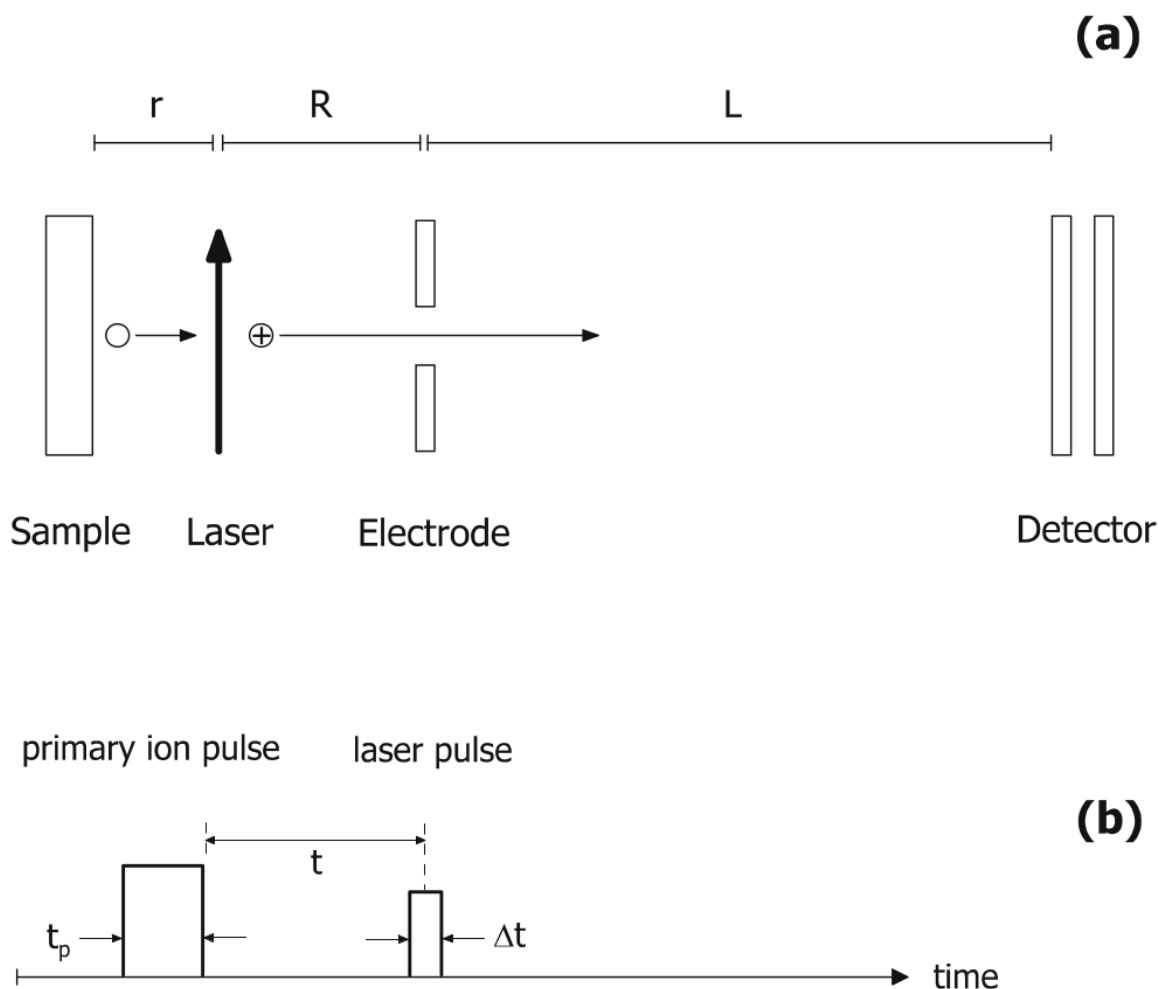


Рис. 1.4. Принцип измерения распределения по скоростям путем лазерной пост-ионизации и времяпролетной масс-спектрометрии [30].

(a) — схема экспериментальной установки, (b) — временная схема

Вышеупомянутая методика лазерного SNMS вообще позволяет элегантно скомбинировать ToF и масс-сепарацию (рис. 1.4). Ионный импульс длительностью t_p ударяет образец и распыляет с поверхности нейтральные атомы, которые пролетают расстояние r до взаимодействия с лазером. Импульсный лазер зажигается на время Δt спустя время t ; изменяя время задержки t , можно получить фотоионизированные частицы с разными скоростями. Далее эти частицы ускоряются на расстоянии R до нескольких кэВ и после электрода пролетают длину L без взаимодействия. Поскольку изначальная скорость фотоионизированных частиц фиксируется, то вторая, времяпролетная, стадия позволяет разделить их по массе.

Применительно ко всем типам ТоF-измерений переход от спектра по времени dY/dt к энергоспектру dY/dE может быть осуществлен согласно формуле

$$\frac{dY}{dE} = -\frac{t^3}{ML^2} \frac{dY}{dt}, \quad (1.8)$$

где M — масса анализируемых частиц, L — длина пролета. Из-за умножения на t^3 высокие пики для больших энергий во времяпролетном спектре могут стать очень низкими в энергетическом спектре.

Для измерения угловых распределений распыленных атомов, то есть количества атомов в каждом элементарном телесном угле, используют *коллекторы*. В этом случае распыленные атомы осаждаются на плоскую, цилиндрическую или сферическую пластину, расположенную возле поверхности мишени. Толщина осажденной пленки пропорциональна дифференциальному коэффициенту распыления $d^2Y/d\Omega$ в элементарный телесный угол.

Получение распределения распыленных атомов одновременно по углам и энергии выглядит еще более трудоемким, однако такие исследования тоже выполнялись. В работе [65] использовалась экспериментальная установка, изображенная на рис. 1.5, в ней ионный источник и энергочувствительный масс-спектрометр (ESMS) могли располагаться под различными углами к нормали к поверхности мишени. На рис. 1.6 показаны энергетические распределения вторичных ионов серебра при распылении мишени ионами аргона с энергией 1 кэВ для различных полярных углов эмиссии.

В целом необходимо отметить, что на сегодняшний день экспериментальных работ, в которых исследуется распределение распыленных атомов с одновременным разрешением по углам и энергии, очень немного, но, вероятно, такие работы будут появляться в будущем из-за разнообразия распылительных эффектов. Тем важнее изучать влияние поверхности на вылет распыляемых частиц для обратного преобразования распределения распыленных атомов по углам и энергии, которая поможет в расшифровке экспериментальных данных.

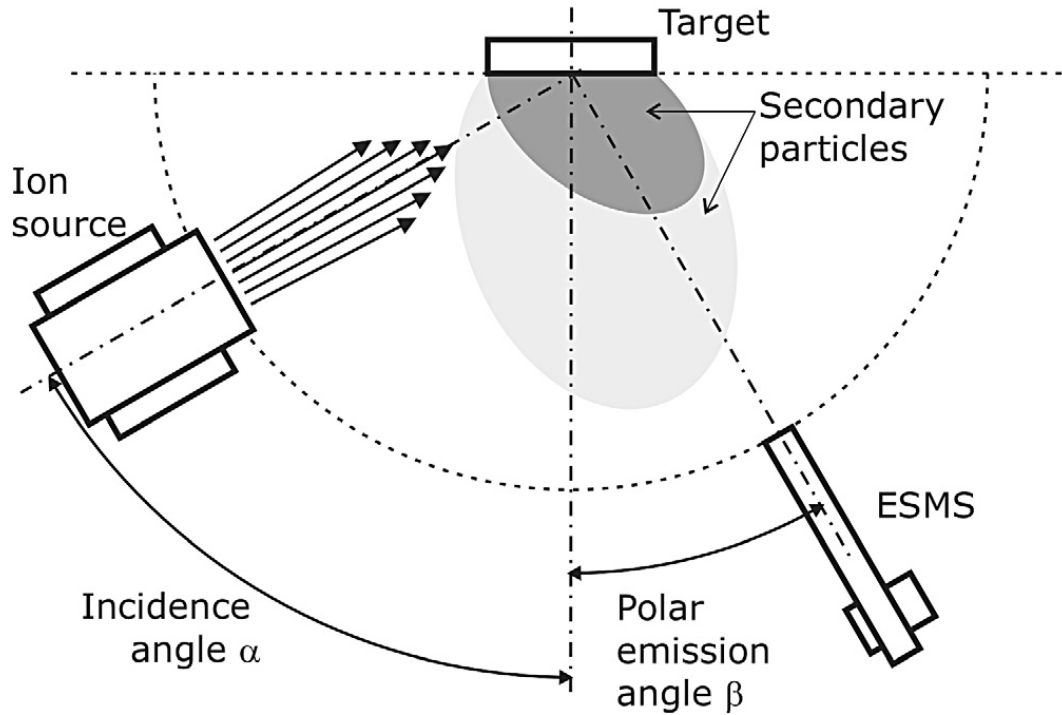


Рис. 1.5. Схема экспериментальной установки из [65], позволяющей снимать распределение распыленных атомов одновременно по полярному углу и энергии

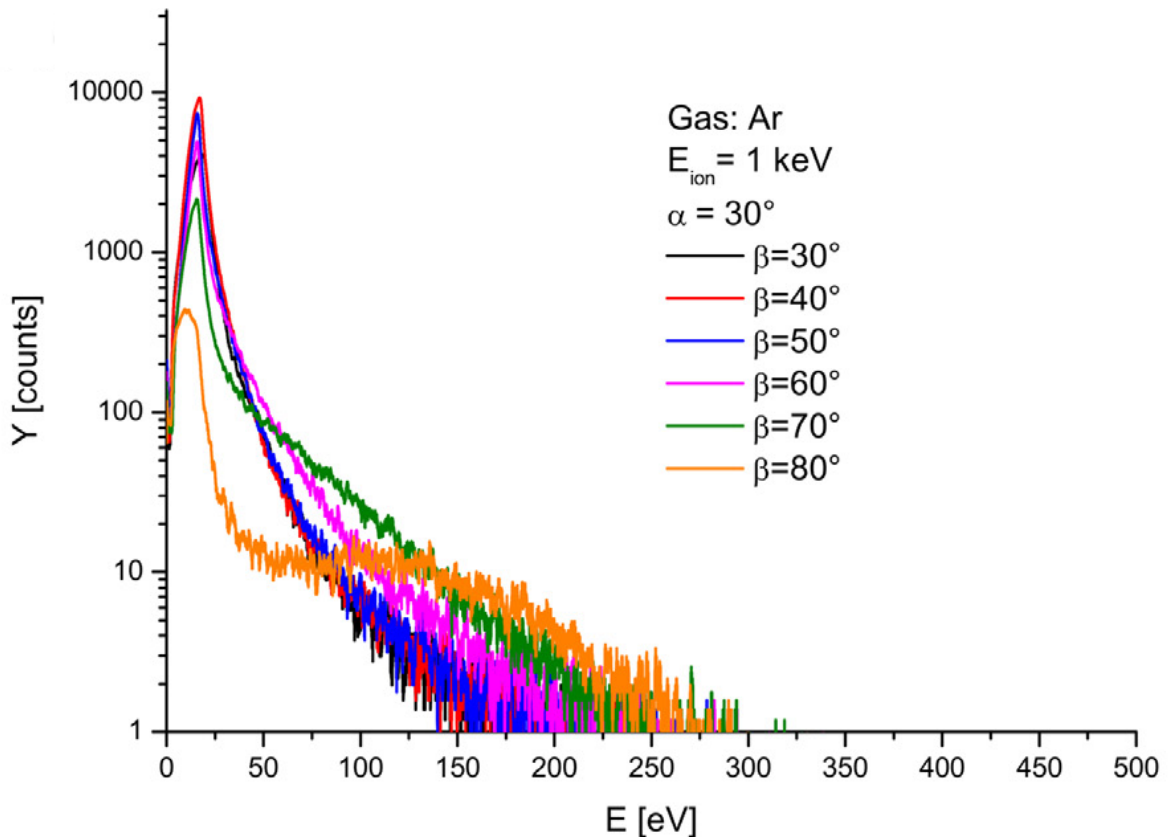


Рис. 1.6. Экспериментальные энергетические распределения вторичных ионов Ag при распылении мишени ионами Ag для выборочных полярных углов эмиссии β [65]

1.3. Аналитические модели ионного распыления

Для описания энергетических спектров и угловых распределений атомов, распыленных с поверхности кристаллов, были предложены несколько аналитических моделей (для аморфных и поликристаллических мишеней). Наиболее известна из существующих теорий распыления теория Зигмунда [3, 31], которая основана на решении уравнения Больцмана для каскада упругих столкновений частиц, развивающегося в безграничной среде. Теория Зигмунда приемлемо описывает интегральный коэффициент распыления в зависимости от энергии бомбардирующих ионов, однако не может объяснить особенности дифференциальных характеристик.

Для энергетической и угловой зависимости распыленных атомов функция распределения $F(E, \cos \theta)$ была получена в виде

$$F(E, \cos \theta) = \frac{E \cos \theta}{(E + E_b)^3}, \quad (1.9)$$

где E — кинетическая энергия эмитированной частицы (предполагается, что E много меньше энергии бомбардирующего иона), θ — полярный угол эмиссии, отсчитываемый от нормали к поверхности, E_b — высота плоского потенциального барьера, определяющего притяжение атома к поверхности кристалла в процессе вылета [31].

Согласно теории распыления Зигмунда, начальное распределение атомов отдачи (при пересечении поверхности), имеет вид [31, 66]:

$$F_0(E_0, \cos \theta_0) = \frac{\cos \theta_0}{E_0^2}. \quad (1.10)$$

Таким образом, функция распределения атомов отдачи обратно пропорциональна квадрату их энергии и отлична от нуля вплоть до энергии бомбардирующих ионов. Согласно формуле (1.9), наблюдаемое энергетическое распределение распыленных атомов должно иметь одинаковое положение максимума энергетического спектра (при $E = E_b/2$) для всех полярных углов вылета θ .

К аналогичному виду энергетического спектра пришел в своей каскадной теории М. Томпсон [67].

В 1963 г. Дж. Линхард [68, 69] предложил описывать упругое рассеяние ион-атом и атом-атом через энергетическое сечение столкновения:

$$\frac{d\sigma(T)}{dT} = C\epsilon^{-m}T^{-1-m}, \quad 0 \leq m \leq 1, \quad (1.11)$$

где ϵ — энергия падающего иона или атома, T — энергия отдачи, константы C и m зависят от атомных номеров и масс частиц. Параметр m характеризует жесткость взаимодействия и медленно увеличивается с ростом энергии ϵ . Сечение Линхарда можно получить, если использовать потенциал взаимодействия $V \propto r^{-1/m}$, краткий вывод содержится в [33].

Используя (1.11), можно получить начальную функцию распределения

$$F_0(E_0, \cos \theta_0) = \frac{\cos \theta_0}{E_0^{2-2m}}. \quad (1.12)$$

Для конечной функции распределения Зигмунд получил следующий результат:

$$F = \frac{E \cos \theta}{(E + E_b)^{3-2m}}, \quad (1.13)$$

что соответствует формуле (1.9) при $m = 0$. Максимум интегрального энергоспектра распыленных атомов наблюдается при $E = E_b/2(1 - m)$ и также не зависит от полярного угла наблюдения θ .

Тем не менее, имеются экспериментальные данные [40, 70, 71], говорящие о смещении максимума энергоспектра распыленных атомов в сторону меньших энергий с ростом полярного угла наблюдения θ . Интересно отметить, что при вторичной ионной эмиссии с поверхности поликристаллов наблюдалась обратная тенденция: при увеличении полярного угла наблюдения θ максимум энергоспектра вторичных ионов смещался в сторону больших энергий [72]. Результаты этих экспериментов противоречат выводам Зигмунда об одинаковом положении максимума энергоспектра для разных полярных углов θ .

Многими авторами предпринимались попытки улучшения теории Зигмунда. Так появилась теория Роозендала-Сандерса [73] (которая описывает сдвиг максимума в сторону больших энергий в [72]) и Урбассека [74]. Отдельно стоит упомянуть теорию Толмачева [75–77], в рамках которой были обобщены результаты теории Зигмунда, Розендала-Сандерса и Урбассека для произвольных энергий распыленных атомов и соотношений масс ион-атом.

Б. Гаррисон [71] в 1986 г. предложила феноменологическую модель, основанную на теории Томпсона [67], в которой исходя из предложенной начальной функции распределения атомов, пересекающих поверхность

$$F_0(E_0, \cos \theta_0) = \frac{\cos^3 \theta_0}{E_0^2} \quad (1.14)$$

была получена функция распределения распыленных атомов в виде:

$$F(E, \cos \theta) = \frac{E \cos \theta}{(E + E_b)^4} (E \cos^2 \theta + E_b). \quad (1.15)$$

Формула (1.15) хорошо согласуется с результатами экспериментов [70, 71], поскольку описывает сдвиг максимума энергоспектра в сторону меньших энергий с увеличением полярного угла наблюдения θ . Максимум интегрального энергоспектра

$$Y(E) \propto \int F(E, \cos \theta) d\Omega \quad (1.16)$$

расположен при значении энергии $E = (\sqrt{2} - 1)E_b \approx 0.41E_b$. Однако причины использования автором указанного начального распределения не ясны, и, таким образом, не прослеживается связь распределения (1.14) с реальными физическими механизмами, ответственными за вылет распыленных атомов.

1.4. Учет дискретной поверхности мишени на стадии вылета в аналитических моделях распыления

В аналитических моделях распыления последняя стадия распыления, которой является *эмиссия* атома с поверхности, заменяется преобразованием энер-

гии и импульса атома, пересекающего плоскость поверхности. При рассмотрении формирования пятен Венера в рамках каскадных механизмов учитывается только влияние *потенциального барьера*, введенного на поверхности вместо потенциального поля взаимодействия. Потенциальный барьер можно задать как плоский [67] либо сферический без преломления [7].

М. В. Кувакин предложил рассмотреть более общую модель сферического потенциального барьера с преломлением [78, 79], в которой начальное положение атома на поверхности не совпадает с центром сферы. Кривизна барьера определяется параметром $\gamma = \alpha/R$, где α (порядка межатомного расстояния) — расстояние от полюса сферы до поверхности мишени, R — радиус сферы, при этом центр сферы лежит на прямой, нормальной к поверхности и проходящей через начальное положение распыляемого атома. В общем случае функция распределения (1.13) видоизменяется:

$$F(E, \cos \theta) = \frac{E \cos \theta}{(E + E_b)^{3-2m}} (n\gamma + 1 - \gamma)^{-2}, \quad (1.17)$$

$$n = \left(\frac{E}{E + E_b} \right)^{1/2}. \quad (1.18)$$

Плоский и сферический непреломляющий барьеры являются частными случаями такого барьера при $\gamma = 0$ и $\gamma = 1$ соответственно.

Модель сферического потенциального барьера с преломлением позволила очень точно аппроксимировать экспериментальные спектры из работы [80], где поликристаллические мишени Al, Ni, Cu, Ag распылялись ионами Ar. Однако, в данной модели может наблюдаться лишь смещение уже сформированного максимума эмиссии по полярному углу наблюдения в сторону к поверхности кристалла. Описание взаимодействия распыляемого атома с поверхностью монокристалла как прохождение только через потенциальный барьер является слишком упрощенным, так как траектории частиц, распыленных с поверхности монокристалла, преломляются более сложным образом, из-за этого в угловом распределении появляются области многозначности [81].

Вне рассмотрения остается также тот факт, что в процессе отлета атома от поверхности продолжается его отталкивание от ближайших рассеивающих центров (эффект надповерхностного рассеяния эмитируемого атома). В частности, в таких моделях не учитывается эффект, состоящий в отклонении атома, пересекающего поверхность мишени, в направлении к нормали вследствие отсутствия азимутальной симметрии в расположении рассеивающих центров [66], также не учитываются затраты энергии эмитируемого атома при таком рассеянии [82], которые, возможно, превышают значение энергии связи [83]. Все это доказывает необходимость введения в аналитическую модель распыления реальной поверхности, состоящей из дискретных атомов, с которыми происходит взаимодействие эмитируемой частицы.

Необходимость учитывать силы отталкивания, действующие на эмитируемый атом со стороны ближайших соседей, даже для случая аморфных мишеней, была указана В. Н. Самойловым [10]. Учет данного фактора увеличивает для эмитируемой частицы вероятность преодоления потенциального барьера, то есть вероятность распыления. Кроме того, угловые и энергетические распределения распыленных атомов, в том числе дифференциальные (с разрешением по энергии и углам наблюдения), становятся отличными от аналогичных, полученных в рамках аналитических моделей без учета дискретной поверхности.

Обозначим за $(E_0; \theta_0; \varphi_0)$ начальную энергию и углы (полярный и азимутальный) вылета эмитируемого атома, за $(E_i; \theta_i; \varphi_i)$ те же параметры после прохождения первого этапа эмиссии — рассеяния эмитируемого атома на ближайших соседях, за $(E; \theta; \varphi)$ те же параметры после преломления на потенциальном барьере. Тогда аналитическая функция распределения атомов, рассеянных на ближайших соседях и прошедших потенциальный барьер, может быть представлена в виде

$$F(E, \cos \theta, \varphi) = F_0(E_0, \cos \theta_0, \varphi_0) \cdot \frac{\mathfrak{D}(E_0, \cos \theta_0, \varphi_0)}{\mathfrak{D}(E_i, \cos \theta_i, \varphi_i)} \cdot \frac{\mathfrak{D}(E_i, \cos \theta_i, \varphi_i)}{\mathfrak{D}(E, \cos \theta, \varphi)} \quad (1.19)$$

или в сокращенной записи:

$$F = F_0 \cdot \mathfrak{D}_{\text{bl}} \cdot \mathfrak{D}_{\text{pot}}. \quad (1.20)$$

Здесь F_0 — начальная функция распределения частиц, пересекающих поверхность мишени в каскаде столкновений — последовательно умножается на *якобиан блокировки* \mathfrak{D}_{bl} и *якобиан потенциального барьера* $\mathfrak{D}_{\text{pot}}$. В качестве начальной функции обычно используется функция распределения Томпсона-Зигмунда (1.10) или изотропная функция Вичанека-Хименез Родригеса-Зигмунда $F_0 = 1/E_0^2$ [43].

Якобиан \mathfrak{D}_{bl} описывает блокировку атомов при эмиссии с поверхности в направлении ближе к нормали, а якобиан $\mathfrak{D}_{\text{pot}}$ — преломление на плоском потенциальном барьере. Конкуренция двух этих факторов приводит к немонотонному сдвигу максимума полярного углового распределения распыленных атомов с ростом их энергии. Данный эффект был подробно описан в работах [11–13] и наблюдался экспериментально [40].

Из законов сохранения энергии и импульса можно получить, что плоский потенциальный барьер высоты E_b вызывает преломление траектории атома [3] согласно следующим соотношениям:

$$E = E_i - E_b, \quad (1.21)$$

$$\cos \theta = \sqrt{\frac{E_i \cos^2 \theta_i - E_b}{E_i - E_b}}, \quad (1.22)$$

$$\varphi = \varphi_i. \quad (1.23)$$

Отсюда можно получить выражение для якобиана потенциального барьера:

$$\mathfrak{D}_{\text{pot}} = \frac{\mathfrak{D}(E_i, \cos \theta_i, \varphi_i)}{\mathfrak{D}(E, \cos \theta, \varphi)} = \frac{E \cos \theta}{\sqrt{(E + E_b)(E \cos^2 \theta + E_b)}}. \quad (1.24)$$

Наиболее сложным представляется вычисление якобиана блокировки \mathfrak{D}_{bl} . В работе О. С. Корсаковой [14] была успешно построена аналитическая модель в приближении жестких сфер, в которой рассеяние эмитируемого атома

происходило на одном ближайшем соседе, а затем атом преодолевал плоский потенциальный барьер величины E_b . Для атомов, эмитируемых из узла на поверхности мишени в направлении $\langle 010 \rangle$, был вычислен якобиан блокировки и получены “конечные” (наблюдаемые) дважды-дифференциальные функции распределения $F(E, \cos \theta)$, где E и θ — энергия и полярный угол распыленного атома (после блокировки и прохождения барьера). При использовании начальной функции Томпсона-Зигмунда конечная функция имеет вид

$$F(E, \cos \theta) = \frac{E \cos \theta}{(E + E_b)^3} \left[1 + \frac{(k - S)(kS - 1)k^2(1 - S^2)}{S(1 + k^2 - 2kS)^3} \right]. \quad (1.25)$$

Здесь $k = l/D$ — отношение первоначального расстояния l между атомами на поверхности и диаметра жестких сфер D , а S определяется выражением

$$S = \sqrt{\frac{E \cos^2 \theta + E_b}{E + E_b}}. \quad (1.26)$$

Выражение (1.25) представляет собой сумму известной функции распределения Зигмунда (1.9) (первое слагаемое) и неотрицательной добавки (второе слагаемое). Учет этой добавки, в частности, обеспечивает наблюдаемое экспериментально смещение максимума интегрального энергоспектра распыленных атомов с поверхности кристалла левее значения $E_b/2$.

При использовании изотропной начальной функции $F_0 = 1/E_0^2$ конечная функция имеет вид:

$$F(E, \cos \theta) = \frac{E \cos \theta}{(E + E_b)^{5/2}(E \cos^2 \theta + E_b)^{1/2}} \left[1 + \frac{(k - S)(kS - 1)k^2(1 - S^2)}{S(1 + k^2 - 2kS)^3} \right]. \quad (1.27)$$

Аналогичный подход был применен для сферического потенциального барьера [14] и получены конечные функции распределения в случае начальной функции Томпсона-Зигмунда:

$$F(E, \cos \theta) = \frac{\cos \theta}{(E + E_b)^2} + \frac{(k - \cos \theta)(k \cos \theta - 1)(1 - \cos^2 \theta)k^2}{(E + E_b)^2(1 + k^2 - 2k \cos \theta)^3} \quad (1.28)$$

и в случае изотропной начальной функции $F_0 = 1/E_0^2$:

$$F(E, \cos \theta) = \frac{1}{(E + E_b)^2} \left[1 + \frac{(k - \cos \theta)(k \cos \theta - 1)(1 - \cos^2 \theta)^{1/2}k^2}{(1 + k^2 - 2k \cos \theta)^{5/2}} \right]. \quad (1.29)$$

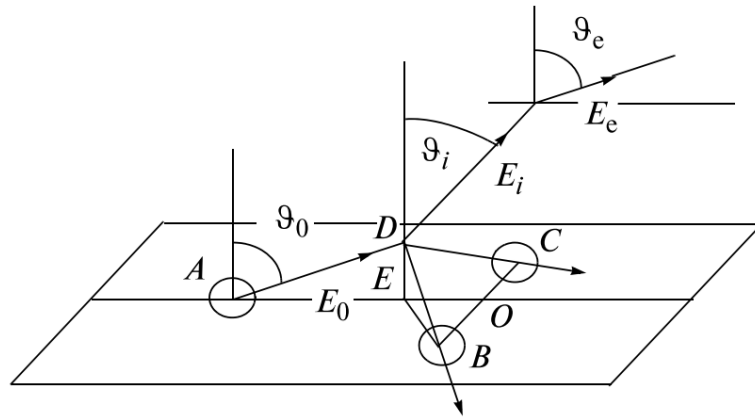


Рис. 1.7. Рассеяние эмитируемого атома на линзе из ближайших атомов-соседей в приближении жестких сфер и последующее преломление на плоском барьере

В работах [12, 15, 84] было подробно рассмотрено рассеяние эмитируемого атома на линзе, состоящей из двух ближайших атомов-соседей в плоскости поверхности. Оказалось, что это рассеяние определяет основные особенности экспериментальных угловых распределений с разрешением по энергии. При этом мы получаем задачу трех тел, которая, как известно, не имеет общего аналитического решения. Однако, в работе [16] при рассмотрении эмиссии атома из узла на поверхности монокристаллов (111) Ni и (001) Ni в модели жестких сфер удалось получить аналитическое решение задачи трех тел для частного случая, а именно при эмиссии в азимутальном направлении на центр линзы из двух ближайших атомов-соседей (рис. 1.7). Такая модель успешно описывает блокировку эмитируемых атомов и фокусировку распыленных атомов по полярному углу.

Было показано, что в картине распыления наблюдаются *первый* и *второй конус вылета* [11]. Первым конусом вылета называется область начальных углов и энергий, при которых распыленные атомы не испытали столкновения; второй конус вылета — область начальных углов и энергий, при которых распыленные атомы испытали на себе *блокировку* (отклонение по полярному углу в направлении нормали к поверхности). На рис. 1.8 изображен график зависимости $1 - \cos \theta$ для распыленных атомов от $1 - \cos \theta_0$. На нем хорошо различимы

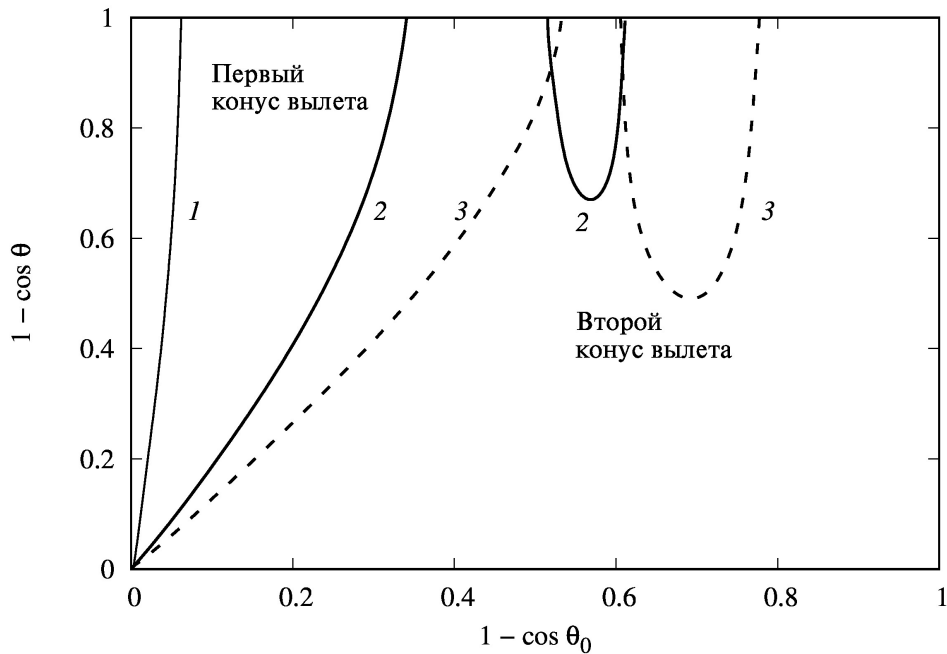


Рис. 1.8. Зависимость $1 - \cos \theta$ от $1 - \cos \theta_0$ для распыленных атомов при значениях начальной энергии E_0 5 эВ (1), 10 эВ (2) и 20 эВ (3)

области, соответствующие первому и второму конусам вылета. Между конусами находится область углов и энергий, при которых атомы не распыляются.

Второй конус вылета образуют *сильно блокированные* атомы [13, 15], вылетающих под полярными углами $\theta < \theta_0$, для которых блокировка больше отклонения в сторону от нормали к поверхности вследствие преломления на плоском потенциальном барьере. Особенно ощутим вклад таких атомов при эмиссии с поверхности грани (111) Ni. Для грани (001) Ni блокировка выражена слабее из-за того, что атомы линзы расположены друг от друга на большем в $\sqrt{2}$ раз расстоянии по сравнению с гранью (111) Ni.

В случае нецентрального столкновения атома с линзой происходит отклонение траектории (*фокусировка*) не только по полярному, но и по азимутальному углу. Применение аналитических методов здесь крайне затруднительно, поэтому чаще используются методы компьютерного моделирования.

1.5. Использование методов компьютерного моделирования в исследованиях распыления

Основные недостатки аналитического подхода обусловлены тем, что в них пренебрегается полной пространственной структурой кристаллов и вынужденно рассматриваются упрощенные модели. Этих недостатков можно избежать при использовании методов компьютерного моделирования.

Одним из методов моделирования является *метод парных столкновений* [85]. Особенно часто данный метод применяется для нахождения глубины проникновения ионов в кристалл при энергиях несколько кэВ. В методе парных столкновений предполагается, что частица распространяется внутри мишени по ломаной линии, участвуя в нескольких последовательных парных столкновениях, независимых друг от друга. Несмотря на то, что данный метод уступает в точности другим методам, он используется во многих известных программах, например SRIM [86]. Если мы имеем дело с аморфными мишенями, то метод парных столкновений применяется в комбинации с *методом Монте-Карло* [87, 88]. Предпринимались попытки использовать метод Монте-Карло для проверки модифицированной модели Зигмунда [35, 89].

Однако наиболее распространенным методом является *метод молекулярной динамики* (МД). В рамках этого метода атомы рассматриваются как частицы, подчиняющиеся уравнениям классической механики Ньютона

$$m_i \frac{d^2 \mathbf{r}_i}{dt^2} = \mathbf{f}_i = - \frac{\partial U}{\partial \mathbf{r}_i}, \quad (1.30)$$

где $U = U(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N)$ — полная потенциальная энергия системы.

Для выделения взаимодействий между отдельными группами частиц ее записывают в виде многочастичного ряда

$$U(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N) = \sum_{i=1}^N V_1(\mathbf{r}_i) + \sum_{1 \leq i < j \leq N} V_2(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j) + \sum_{1 \leq i < j < k \leq N} V_3(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j, \mathbf{r}_k) + \dots \quad (1.31)$$

Здесь V_1 — энергия взаимодействия частицы с внешним полем, V_2 — *потенциал взаимодействия* двух частиц, V_3 — слагаемое, отвечающее за трехчастичное взаимодействие, V_4 — за четырехчастичное 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

$$r_{ij} = |\mathbf{r}_{ij}| = |\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|, \quad (1.32)$$

$$\cos \theta_{ijk} = \frac{\mathbf{r}_{ij} \cdot \mathbf{r}_{kj}}{|\mathbf{r}_{ij}| |\mathbf{r}_{kj}|}. \quad (1.33)$$

Главной проблемой в методе МД является задание потенциала взаимодействия атомов. Существует подход *ab initio* [90], который использует достижения квантовой химии. В этом подходе потенциалы взаимодействия атомов вычисляются на основе метода Хартри-Фока или метода функционала плотности [91] и задаются в табличной форме.

Однако в классической молекулярной динамике взаимодействие атомов задается потенциалами в виде функций с некоторым набором параметров. В качестве примеров таких функций можно привести *потенциал Борна-Майера*

$$V(r) = A \exp(-r/b) \quad (1.34)$$

и широко известный *потенциал Зиглера-Бирсака-Литтмарка* (ZBL) [92, 93]. Эти и многие другие потенциалы являются парными, то есть считается, что ряд (1.31) после V_2 можно обрезать и описывать взаимодействие атомов мишени с падающим ионом и друг с другом как совокупность взаимодействий каждой пары в отдельности.

Однако для металлов нужно учитывать, что энергия конкретного атома зависит не только от расположения соседних атомов, но и от электронной плотности ρ в данной точке, которая может быть рассчитана с использованием методов квантовой химии. Этот подход получил название *метода погруженного атома* (embedded-atom method, ЕАМ) [94]. На основе метода ЕАМ Г. Акландом был разработан параметрический многочастичный потенциал для некоторых

металлов [95] и их сплавов [96].

Метод молекулярной динамики позволяет учесть и влияние температуры. Г. Берендсен показал [97], что в уравнения движения (1.30) можно добавить дополнительное слагаемое, имеющее размерность силы и отвечающее за выравнивание температуры. Модифицированные уравнения имеют вид:

$$m_i \frac{d^2 \mathbf{r}_i}{dt^2} = - \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}_i} U(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N) + \frac{m_i}{2\tau_T} \left(\frac{T_0}{T(t)} - 1 \right) \mathbf{v}_i. \quad (1.35)$$

Уравнения (1.35) позволяют смоделировать атомную систему как находящуюся в термостате. Здесь T_0 — температура термостата, $T(t)$ — текущая температура системы, которая рассчитывается через среднюю кинетическую энергию, τ_T — время температурной релаксации. Предложенное Берендсеном дополнительное слагаемое обеспечивает передачу кинетической энергии в направлении от термостата и к нему [98].

Впервые метод молекулярной динамики применил для моделирования распыления монокристалла Д. Харрисон. В работах [9, 99, 100] использовался атомный блок размером около 10^5 атомов, в котором взаимодействие описывалось потенциалом Борна-Майера (1.34), при этом использовались различные параметры потенциала для взаимодействия атомов между собой и взаимодействия иона с атомами блока. Работа [9] вскрыла основной недостаток использования потенциала Борна-Майера при моделировании распыления блока взаимодействующих атомов — плохое совпадение расчетного значения коэффициента распыления с эмпирическим.

Атомы кристалла на малых расстояниях отталкиваются, на больших — притягиваются. Потенциал (1.34) имеет чисто отталкивающий характер, поэтому для описания притяжения на поверхности вводился потенциальный барьер, высота и форма которого может быть различной. В дальнейшем Харрисон [101, 102] использовал для задания потенциала кусочную функцию, состоящую из нескольких аналитических выражений, которая описывает одновременно и притяжение на больших расстояниях, и отталкивание на малых.

В работе М. Шапиро [103] на основе молекулярно-динамической модели были изучены характеристики распыления блока атомов Cu (111), (110) и (100) при бомбардировке нормально падающими ионами аргона с энергией 5 кэВ. Найдено, что коэффициент распыления первого слоя составляет 85%, 67% и 92% от общего коэффициента распыления для граней (100), (110) и (111) соответственно. Коэффициент распыления второго слоя составляет 13%, 28% и 7% от общего коэффициента распыления для той же последовательности граней. Сравнение энергетических спектров атомов, распыленных из первого и второго слоев, показывает, что для любой грани спектры второго слоя имеют значительно меньшую низкоэнергетичную компоненту. Был сделан вывод, что атомы отдачи второго слоя, в основном, не распыляются сами, а вызывают распыление атомов первого слоя.

Использование метода молекулярной динамики для расчета траекторий движения всех N атомов кристаллического блока довольно затратно с точки зрения вычислительных ресурсов, так как приходится решать систему из $3N$ дифференциальных уравнений (1.30) или (1.35). Особенно остро эта проблема стояла в прошедшем столетии. Из-за этого Д. Джексон [81] в расчетах распыления (001) W предложил рассматривать только финальную стадию распыления — эмиссию атома с поверхности, что позволило существенно сократить время счета. Поверхностный атом решетки получал импульс снизу с энергией от 16,5 до 44 эВ под различными полярным и азимутальным углами, отсчитываемыми от нормали к поверхности и от направления $\langle 100 \rangle$, лежащего на поверхности. Использовался потенциал Морзе

$$V(r) = D \left(e^{-2\alpha(r-r_0)} - 2e^{-\alpha(r-r_0)} \right), \quad (1.36)$$

учитывающий притяжение между атомами. Часть атомов, ближайшая к первичному смещенному, была подвижной, а остальные (для ускорения счета) не двигались. Учитывалось 4 слоя атомов в глубину кристалла. Обычно имелось 50 подвижных атомов и 100 неподвижных.

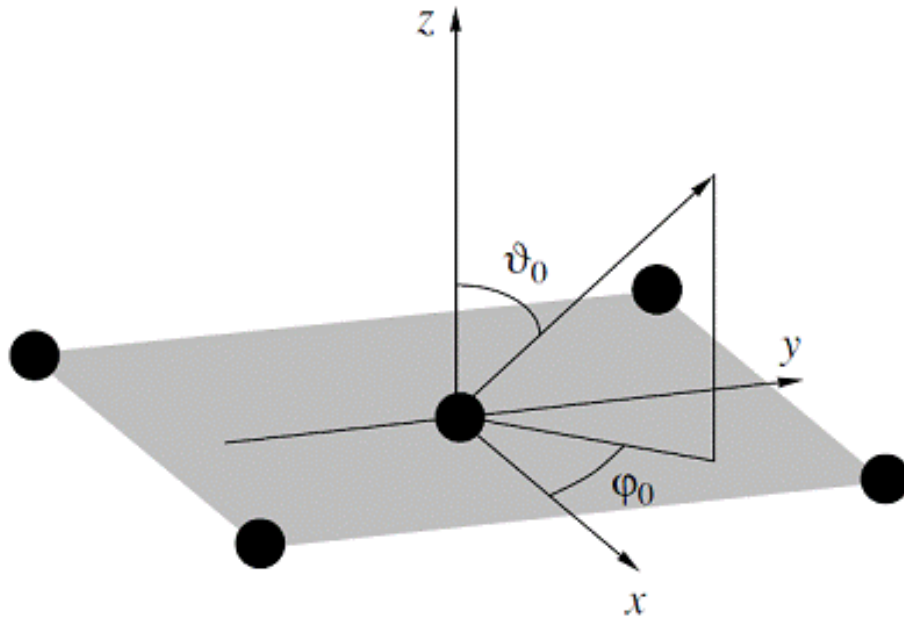


Рис. 1.9. Фрагмент грани (001), используемый в модели 4 атомов при расчетах эмиссии атома с поверхности методом молекулярной динамики

Возможно и использование более простых моделей. Так, в работе [17] также рассматривалась только стадия эмиссии атомов с поверхности (001) Ni и (001) Au. Поверхность кристалла была представлена минимальным фрагментом — кольцом из четырех атомов поверхности, ближайших к узлу решетки, из которого происходила эмиссия атома (рис. 1.9). Такая модель (далее будем называть ее **модель 4 атомов**), тем не менее, позволяет воспроизвести основные особенности распределения распыленных атомов, в частности пятна Венеры и эффект немонотонного сдвига максимума углового распределения распыленных атомов с увеличением энергии наблюдения.

В работах [11–13, 18] вводилась классификация атомов, эмитируемых с поверхности монокристалла. По полярному углу особо выделялась группа *сильно блокированных* атомов, о которых уже упоминалось в разд. 1.4. По азимутальному углу φ для несимметричных относительно направления на центр линзы интервалов углов φ выделяются следующие группы атомов:

- “*собственные*” атомы, начальный угол вылета которых φ_0 принадлежит интервалу углов φ (φ_0 и φ очень близки друг ко другу);

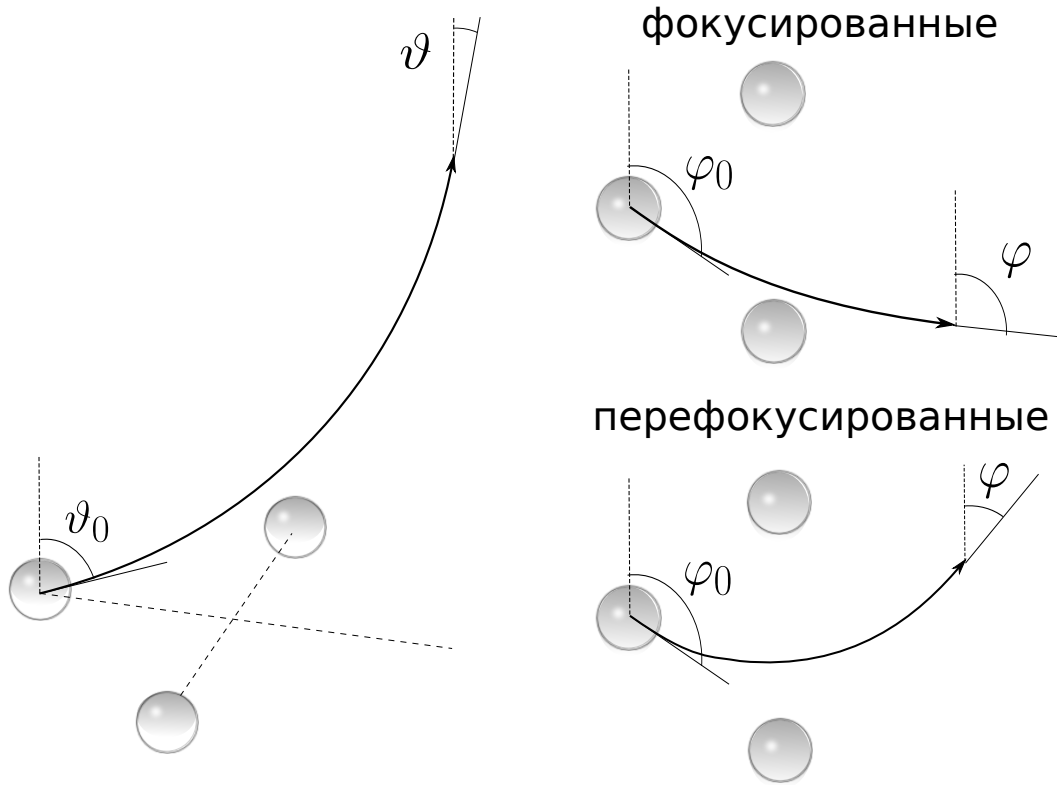


Рис. 1.10. Траектории вылета сильно блокированных атомов (слева), фокусированных и перифокусированных атомов (справа) при эмиссии с поверхности монокристалла

- *фокусированные* атомы, для которых углы φ и φ_0 лежат по одну сторону от направления на центр линзы;
- *перифокусированные* атомы, для которых углы φ и φ_0 лежат по разные стороны от направления на центр линзы.

Схематично траектории вылета сильно блокированных, фокусированных и перифокусированных атомов показаны на рис. 1.10.

В работе [17] было показано, что для грани (001) Au сильно блокированные атомы практически полностью формируют интегральное распределение эмитированных атомов по азимутальному углу φ из-за большой жесткости линзы. Был рассчитан вклад собственных, фокусированных и перифокусированных атомов в формирование сигнала распыленных атомов в фиксированных интервалах углов φ . При смене никелевой мишени (001) Ni на золотую (001) Au резко увеличивается сигнал перифокусированных и сильно блокированных атомов.

1.6. Фазовые переходы I и II рода и распыление

К настоящему времени установлено, что коэффициент распыления для металлических мишеней с поликристаллической структурой слабо изменяется с температурой, вплоть до температуры плавления [104]. При распылении монокристаллов наблюдаются как небольшие увеличения, так и небольшие уменьшения коэффициента распыления с ростом температуры. Например, при распылении ионами аргона с энергией 30 кэВ монокристалла Cu наблюдается рост коэффициента распыления для грани (110) и убыль коэффициента распыления для грани (111) с ростом температуры [105].

Особый интерес представляет изучение температурной зависимости коэффициента распыления $Y(T)$ вблизи точек перехода между двумя твердыми фазами. Примерами таких переходов являются *полиморфное превращение* и переход металла из ферромагнитного состояния в парамагнитное.

При изменении температуры в ряде металлов может происходить перестройка кристаллической решетки. Примером такого металла является кобальт, решетка которого при переходе через критическую температуру T_{crit} испытывает полиморфное превращение и из гексагонально плотноупакованной α -Co ($a = 2.50 \text{ \AA}$, $c = 4.06 \text{ \AA}$) перестраивается в кубическую гранецентрированную β -Co ($a = 3.54 \text{ \AA}$) [106]. При изменении решетки меняется и удельный объем вещества, что позволяет отнести полиморфное превращение к фазовым переходам I рода. Температура перехода $\alpha \rightarrow \beta$ у кобальта относительно низкая (около 420°C), поэтому кобальт представляет собой удобный объект для экспериментальных исследований.

Эксперименты [107–110] показали, что полиморфное превращение в кобальте и особенности температурной зависимости $Y(T)$ достаточно сложны и в сильно зависят от условий бомбардировки мишени. В [111, 112] было проведено моделирование распыления грани (0001) α -Co, которая при полиморфном превращении переходила в грань (111) β -Co, ионами аргона с различными

энергиями методом молекулярной динамики. Было установлено, что наибольшее влияние на коэффициент распыления оказывает перестройка структуры кристалла при увеличении энергии падающих ионов до 10 кэВ.

У металлов, обладающими ферромагнитными свойствами, при нагревании выше температуры Кюри T_C наблюдается переход из ферромагнитного (f) состояния в парамагнитное (p). Этот переход относится ко II роду и не сопровождается изменением удельного объема.

В работе [113] впервые было обнаружено резкое возрастание коэффициента распыления в точке Кюри при бомбардировке монокристалла никеля ионами Ar с энергией 15 кэВ. Влияние f→p перехода на ионное распыление монокристалла Ni исследовалось и в дальнейшем [114, 115]. Были получены температурные зависимости коэффициента распыления поликристалла Ni [116], а также граней (111) и (110) монокристалла Ni [117]. Оказалось, что коэффициент распыления поли- и монокристалла Ni в парамагнитном (p) состоянии на $\approx 10\%$ превышает коэффициент распыления для ферромагнитного (f) состояния. Значение $Y(T)$ для грани (110) Ni в окрестности точки Кюри более чем в 1.5 раза превышало значение коэффициента распыления при температуре $\approx 200^\circ\text{C}$.

Численное моделирование распыления Ni при f→p переходе по методу молекулярной динамики было проведено в работах [112, 118]. Было рассчитано влияние f→p перехода Ni на коэффициент распыления, рассмотрено изменение пространственных и энергетических распределений распыленных атомов. В работе [119] было показано, что отклонение полярного угла наблюдения θ от полярного угла вылета θ_0 исключительно чувствительно к магнитному состоянию кристалла.

В никеле ферромагнетизм связан с прямым обменным взаимодействием двух атомов, осуществляемым посредством корреляции направления спинов 3d электронов. Если принять, что в ферромагнитном состоянии спины всех атомов ориентированы параллельно, а в парамагнитном состоянии ориентация спиновых моментов атомов носит случайный характер, то можно вычислить добавку

к потенциалу взаимодействия в f-состоянии. М. В. Кувакин [120] получил выражение для добавки к потенциалу взаимодействия, которое можно записать в виде

$$\Delta V_f(r) = -5.16 \exp(-0.8112r^2) \quad (1.37)$$

(ΔV_f измеряется в эВ, r в Å). Появление этой добавки, а также изменение энергии связи — для никеля энергии связи в f- и p-состояниях связаны соотношением $E_b^{(f)} = 1.05E_b^{(p)}$ (было рассчитано в работе [121]) — и приводит к изменению коэффициента распыления. Предпринимались также попытки вычислений спин-зависящей добавки к потенциальной энергии взаимодействия атомов другого ферромагнитного металла — гадолиния Gd, ферромагнетизм которого определяется не прямым, а косвенным обменным взаимодействием, что вносит свою специфику в расчеты [122, 123].

Изменение энергии связи мишени при f→p переходе позволяет исследовать зависимость коэффициента распыления Y от энергии связи E_b . Расчет зависимости $Y(E_b)$ был проведен Зигмундом в предположении, что потенциал парного взаимодействия атомов имеет вид

$$V(r) \propto \frac{1}{r^{1/m}}, \quad (1.38)$$

где m — параметр сечения Линхарда (1.11).

Использование соответствующей начальной функции распределения (1.12) приводит к зависимости $Y \propto 1/E_b^{1-2m}$ [124]. Данный подход был развит для аморфных, поликристаллических и двухкомпонентных мишеней [125]. Применительно к однокомпонентным мишеням [126] рассеяние эмитированных атомов на стадии вылета приводит к сдвигу значения параметра m_{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 $m = 0$ [127].

1.7. Численные модели, используемые в работе

В работах последних лет в основном исследуются механизмы фокусировки по полярному углу вылета. Исследованиям фокусировки распыленных атомов по азимутальному углу φ посвящено не очень большое число работ. В настоящей работе изучалась фокусировка атомов по углу φ при эмиссии с поверхности монокристалла, формирование угловых и энергетических распределений фокусированных и перефокусированных атомов с использованием методов молекулярной динамики.

Была создана вычислительная **модель 20 атомов** (рис. 1.11), используемая для исследований механизмов фокусировки и перефокусировки атомов в настоящей работе. Значение постоянной решетки бралось равным 3.5168 \AA . Данная модель является логическим развитием **модели 4 атомов** (см. рис. 1.9), которая использовалась в [17].

В рамках этой модели рассматривалась только последняя стадия распыления — эмиссия (вылет) атомов с поверхности монокристалла (001) Ni. Поверхность была представлена вылетающим атомом и 20 ближайшими атомами-соседями. Вылет атома из центрального узла происходил с энергией E_0 под углом θ_0 от нормали к поверхности в направлении, задаваемом азимутальным углом φ_0 . Используемые значения $(E_0; \varphi_0; \cos \theta_0)$ указаны в табл. 1.1. После рассеяния на ближайших атомах для эмитируемого атома учитывается плоский потенциальный барьер высотой 4.435 \AA . Атомы, которые преодолели потенциальный

	E_0 (эВ)	φ_0	$\cos \theta_0$
от	0.5	0°	1
до	100	180°	0
шаг	0.01	0.5°	1/450

Таблица 1.1. Начальные параметры эмиссии, используемые в работе

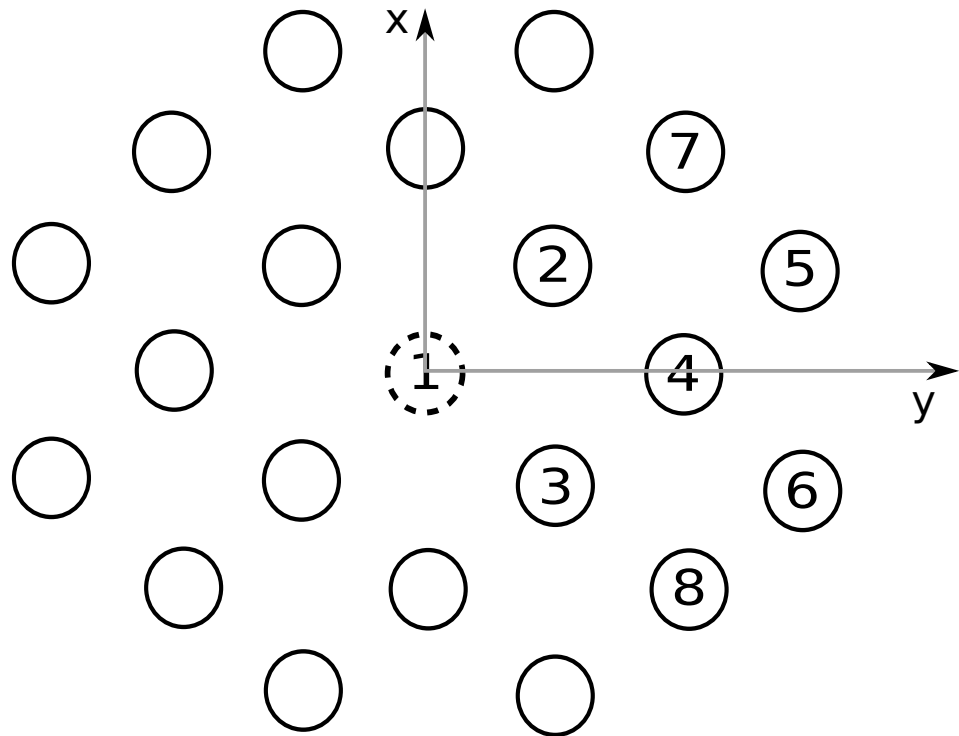


Рис. 1.11. Фрагмент грани (001), использующийся для расчета (вид сверху). 1 — эмитируемый атом; 2,3 — атомы, образующие линзу; 4 — атом за линзой, являющийся рассеивающим центром. Направлению на центр линзы 2–3 соответствует азимутальный угол $\varphi = 90^\circ$

барьер, отмечаются как распыленные.

Расчеты эмиссии выполнялись с помощью авторского программного кода, написанного на языке программирования Fortran с использованием технологии параллельного программирования MPI. Использовались классические уравнения движения (1.30) в рамках метода молекулярной динамики. Рассматривалось только парное взаимодействие атомов, которое описывалось с помощью потенциала Борна-Майера (1.34), параметры которого $A = 23853.96$ эВ и $b = 0.196$ Å были взяты из работы [128]. На расстояниях $r < 2b$ потенциал Борна-Майера непрерывно сшивался с обратноквадратичным потенциалом $V = C/r^2$ (с сохранением непрерывности производной). Для облегчения интегрирования на расстояниях, больших радиуса обрезания $r_{\text{cut}} = 3$ Å, производная полагается равной нулю, и для всех r “поднимается” на величину $(A/b) \exp(-r_{\text{cut}}/b)$, для сохранения непрерывности. Таким образом, для силы получалось выражение:

$$f(r) = \begin{cases} \frac{2C}{r^3} - \frac{A}{b} \exp\left(-\frac{r_{\text{cut}}}{b}\right), & r < 2b; \\ \frac{A}{b} \exp\left(-\frac{r}{b}\right) - \frac{A}{b} \exp\left(-\frac{r_{\text{cut}}}{b}\right), & 2b < r < r_{\text{cut}}; \\ 0, & r > r_{\text{cut}}. \end{cases} \quad (1.39)$$

Для численного решения уравнений движения (1.30) использовался *метод средней силы* [129] с переменным шагом по времени. Данный метод относится к группе методов “предиктор-корректор” и является частным случаем многошагового метода Адамса, применение которого для молекулярной динамики очень подробно описано в [130].

В рамках метода средней силы интегрирование уравнений вида $\ddot{x} = f(x, v, t)$ состоит из двух частей. Сначала координата и скорость предсказываются в момент времени $t+h$ на основе значения ускорения в предыдущий момент времени t , а потом на основе предсказанных значений $x_s(t+h)$ и $v_s(t+h)$ вычисляется значение ускорения и скорректированные значения $x(t+h)$ и $v(t+h)$. Расчетные формулы имеют следующий вид:

$$x_s(t+h) = x(t) + hv(t) + \frac{h^2}{2}f(x, v, t); \quad (1.40)$$

$$v_s(t+h) = v(t) + hf(x, v, t); \quad (1.41)$$

$$x(t+h) = x(t) + hv(t) + \frac{h^2}{2}f(x_s, v_s, t+h); \quad (1.42)$$

$$v(t+h) = v(t) + hf(x_s, v_s, t+h). \quad (1.43)$$

Ошибка метода при этом составляет $\mathcal{O}(h^2)$. Величина временного шага вычислялась по формуле

$$h = \min\left(\frac{d}{v_{\text{max}}}; \sqrt{\frac{2d}{a_{\text{max}}}}\right), \quad (1.44)$$

где $d = 0.05 \text{ \AA}$, v_{max} и a_{max} — максимальные скорость и ускорение в данный момент времени в системе атомов.

После рассеяния на ближайших атомах для эмитируемого атома учитывается плоский потенциальный барьер, высота которого $E_b = 4.435 \text{ эВ}$ (для

никеля). Атомы, которые преодолели потенциальный барьер, отмечаются как распыленные. Распыленные атомы образуют трижды дифференциальное распределение $F(E, \cos \theta, \varphi)$ по энергии E , полярному углу θ и азимутальному углу φ . Это распределение является дискретным, поскольку используются конечные интервалы энергии ΔE , азимутального угла $\Delta \varphi$ и косинуса полярного угла $\Delta(\cos \theta)$. Неравномерные интервалы по полярному углу θ используются из-за геометрических особенностей, так как в экспериментах измеряется число распыленных атомов в телесном угле

$$\Delta \Omega = \sin \theta \Delta \theta \Delta \varphi = \Delta(1 - \cos \theta) \Delta \varphi, \quad (1.45)$$

поэтому для сохранения величины апертуры $\Delta \Omega$ необходим постоянный шаг по косинусу: $\Delta \eta = \Delta(1 - \cos \theta)$. В настоящей работе все зависимости от угла θ рассматриваются в основном как зависимости от параметра $\eta = 1 - \cos \theta$.

Также использовалась **полномасштабная МД-модель**, в рамках которой проводилась бомбардировка грани (001) Ni ионами Ar с энергией 200 эВ и рассчитывались энергия и углы вылета каждого распыленного атома. Данная модель была создана на основе модели Г. В. Корнича [131, 132], которая ранее успешно применялась для расчетов смещений атомов и каскадного перемешивания. Взаимодействие Ni-Ni описывалось с помощью многочастичного потенциала Аккланда [95, 96], взаимодействие Ar-Ni описывалось потенциалом ZBL [92, 93].

Потенциальная энергия атома никеля с номером i записывалась в виде

$$U_i = -f(\rho_i) + \frac{1}{2} \sum_j V(r_{ij}), \quad (1.46)$$

где $V(r_{ij})$ — парный потенциал, описывающий взаимодействие атомов i и j , $f(\rho) = \rho^{1/2}$ — так называемая *функция погружения*, ρ_i имеет смысл электронной плотности в месте нахождения i -го атома и определяется формулой

$$\rho_i = \sum_j \phi(r_{ij}). \quad (1.47)$$

Функции V и ϕ задаются в виде кубических сплайнов согласно формулам:

$$V(r) = \sum_{k=1}^6 a_k (r_k - r)^3 \Theta(r_k - r), \quad (1.48)$$

$$\phi(r) = \sum_{k=1}^2 A_k (R_k - r)^3 \Theta(R_k - R), \quad (1.49)$$

где Θ — функция Хевисайда ($\Theta(x) = 0$ при $x < 0$, $\Theta(x) = 1$ при $x > 0$). Константы сплайнов a_k , r_k , A_k , R_k для никеля были рассчитаны Акландом в работе [95] с использованием экспериментальных данных: параметра решетки, энергии связи, упругих констант и некоторых других.

Чтобы корректно описать упругие столкновения атомов на энергиях, характерных для каскада столкновений, высокоэнергетичная часть парного потенциала $V(r)$ была модифицирована так же, как это было сделано в работе [133]. При таких столкновениях взаимодействие атом-атом описывается как экранированное кулоновское взаимодействие атомных ядер, поэтому на малых расстояниях для $V(r)$ использовался потенциал ZBL [92, 93]

$$V(r) = \frac{Z^2 e^2}{r} \phi_{\text{ZBL}} \left(\frac{r}{a_s} \right), \quad (1.50)$$

где экранирующая функция ϕ_{ZBL} и длина экранировки a_s задаются формулами

$$\phi_{\text{ZBL}}(x) = 0.1818e^{-3.2x} + 0.5099e^{-0.9423x} + 0.2802e^{-0.4029x} + 0.02817e^{-0.2016x}, \quad (1.51)$$

$$a_s = \frac{0.88534a_0}{2Z^{0.23}}. \quad (1.52)$$

Потенциалы Акланда (1.48) и ZBL (1.50) сшивались с помощью функции

$$V(r) = \exp(B_0 + B_1 r + B_2 r^2 + B_3 r^3) \quad (1.53)$$

с четырьмя параметрами B_k , подобранных так, чтобы сохранялась непрерывность $V(r)$ и ее производной в точках сшивания. Полученный таким образом составной потенциал ранее был успешно использован для вычисления пороговых энергий смещения, энергий образования объемных вакансий и различных типов междоузельных атомов [133–135].

Модельный кристалл никеля состоял из 4032 атомов, расположенных в 14 атомных слоях со свободной поверхностью (100). Периодические граничные условия были применены со всех сторон кристалла, исключая дно и свободную поверхность. Самый нижний слой атомов был обездвижен, чтобы предотвратить деформацию и смещение кристалла. Уравнения движения атомов решались методом Верле. Использовался переменный шаг по времени, зависящий от максимальной скорости в данный момент (однако он не превышал 4.5 фс). Время вычисления сокращалось за счет использования списка ближайших соседей.

Расчеты были выполнены при двух температурах: 300 К и 0 К. Кристалл помещался в “термическую ванну Берендсена” с нужной температурой и предварительно релаксировал в течение 10 пс. Использовалось значение диссипативной константы $8.2 \cdot 10^{13} \text{ с}^{-1}$, которая вычислялась аналогично тому, как это делали Ф. Каретта и Г. Урбасек [136]. Бомбардирующие ионы падали случайным образом в элементарную треугольную область поверхности (100) по нормали к поверхности [137]. Моделируемое время развития каскадов столкновений при падении одного иона составляло 4 пс.

Алгоритм регистрировал вылетающие с бомбардируемой поверхности атомы на расстояниях $z_1 = 0.3 \text{ \AA}$ и $z_2 = 10 \text{ \AA}$ над усредненной поверхностью кристалла. Три параметра атома (энергия, полярный и азимутальный углы) на высоте z_2 интерпретировались как наблюдаемые $(E; \theta; \varphi)$, а тот же набор параметров на высоте z_1 — как начальные $(E_0; \theta_0; \varphi_0)$ для эмиссии атома с поверхности (мы используем те же обозначения, что были введены в разд. 1.4).

Выводы к главе 1

При взаимодействии пучка ионов с поверхностью твердого тела часть атомов мишени может распыляться. Явление распыления используют не только для таких целей, как травление поверхности или перенос вещества мишени на другую подложку, но и для исследования структурного и элементного

состава поверхности образца. В этом случае необходимо регистрировать вторичные частицы (атомы или ионы) и из особенностей распределений этих частиц по углам и энергии извлекать информацию о поверхности.

В главе приведен обзор литературы по теме ионного распыления. Рассмотрена история открытия явления и развитие представлений о причинах его возникновения, перечислены основные механизмы (каскадные и поверхностные), которые предлагались для объяснения возникновения пятен Венера при распылении монокристаллов. Указаны основные способы экспериментального измерения коэффициента распыления и базовые принципы, лежащие в основе анализа вторичных частиц при ионном распылении поверхности.

Кратко изложены подходы к построению аналитических и численных моделей распыления, отмечена важность учета дискретной поверхности мишени на стадии вылета. Рассмотрено влияние фазовых переходов на распыление. Приведена классификация атомов, эмитируемых с поверхности монокристалла, по азимутальному углу: собственные, сфокусированные и перефокусированные (см. разд. 1.5 и рис. 1.10).

В разд. 1.7 описаны вычислительные модели, используемые для исследований механизмов фокусировки и перефокусировки атомов с поверхности монокристалла (001) Ni в настоящей работе: модель 20 атомов и полномасштабная МД-модель.

Глава 2

Эффект перефокусировки при эмиссии атомов с поверхности грани (001) Ni

2.1. Пятна Венера и фокусировка по азимутальному углу

При выполнении расчетов эмиссии атомов с поверхности (001) Ni по модели 20 атомов, описанной в разд. 1.7, авторский код сохраняет список эмитированных атомов. У каждого атома в списке приводятся параметры $(E_i; \theta_i; \varphi_i)$ — энергия, полярный угол, отсчитываемый от нормали к поверхности, и азимутальный угол, которые атом имеет на большом удалении от начального положения, и начальные параметры вылета $(E_0; \theta_0; \varphi_0)$ соответственно.

Из формул преломления на плоском барьере (1.21)–(1.23) видно, что после прохождения потенциального барьера энергия атома уменьшается, и его траектория составляет бóльший угол с нормалью к поверхности ($\theta > \theta_i$). Таким образом, атом может распылиться, если выполнены условия:

- энергия E_i достаточна для преодоления барьера, то есть $E_i > E_b$;
- угол θ_i должен быть меньше некоторого критического угла $\theta_{\text{кр}}$, где

$$\cos \theta_{\text{кр}} = \sqrt{\frac{E_b}{E_i}}. \quad (2.1)$$

Для каждого атома из списка проверяется выполнение этих условий, если они выполнены — рассчитываются конечные параметры $(E; \theta; \varphi)$, которые бы наблюдались у атома, распыленного с поверхности грани (001) Ni в реальном эксперименте. При этом считалось, что начальное распределение атомов при вылете с поверхности описывается функцией распределения Томпсона-Зигмунда (1.10), поэтому каждый распыленный атом при построении распределений учитывается с весом $w = \cos \theta_0 / E_0^2$.

Для корректности молекулярно-динамических расчетов проверялось вы-

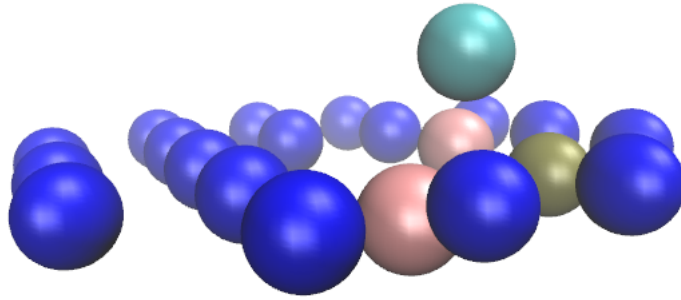


Рис. 2.1. Визуализация эмиссии атома с поверхности монокристалла (001) Ni в программе VMD. Вылетающий атом помечен зеленым цветом

полнение законов сохранения энергии и проекций импульса системы атомов, а также визуально (для нескольких наборов начальных параметров) в программе VMD [138, 139]. На рис. 2.1 показан снимок процесса вылета атома с начальной энергией $E_0 = 12.5$ эВ в направлении, задаваемом углами $\varphi_0 = 105^\circ$ и $\theta_0 = 72.5^\circ$, сделанный с помощью VMD. Зеленым цветом помечен эмитируемый атом (1), красным — атомы линзы (2 и 3), коричневым — атом за линзой (4). (Нумерация атомов в скобках приведена в соответствии с рис. 1.11 на стр. 44.)

Для проверки того, насколько модель соответствует реально наблюдаемому процессу распыления атомов с поверхности грани (001), необходимо построить угловое распределение эмитированных атомов. Распределение, построенное в полярных координатах $(\rho; \varphi)$, где $\rho \propto \tan \theta$, соответствует распределению распыленных атомов, наблюдаемых экспериментально на плоском коллекторе (рис. 2.2). Пятна Венеры в распределении формируются за счет фокусировки атомов по азимутальному углу при взаимодействии с линзой из двух атомов. На рис. 2.3 показано распределение эмитированных атомов по азимутальному углу. Отчетливо видно, что изотропное по начальному азимутальному углу φ_0 распределение атомов превращается в распределение по азимутальному углу наблюдения φ с ярко выраженным максимумом в направлении на центр линзы ($\varphi = 90^\circ$). Ширина этого максимума (на половине высоты) составляет 13.8° .

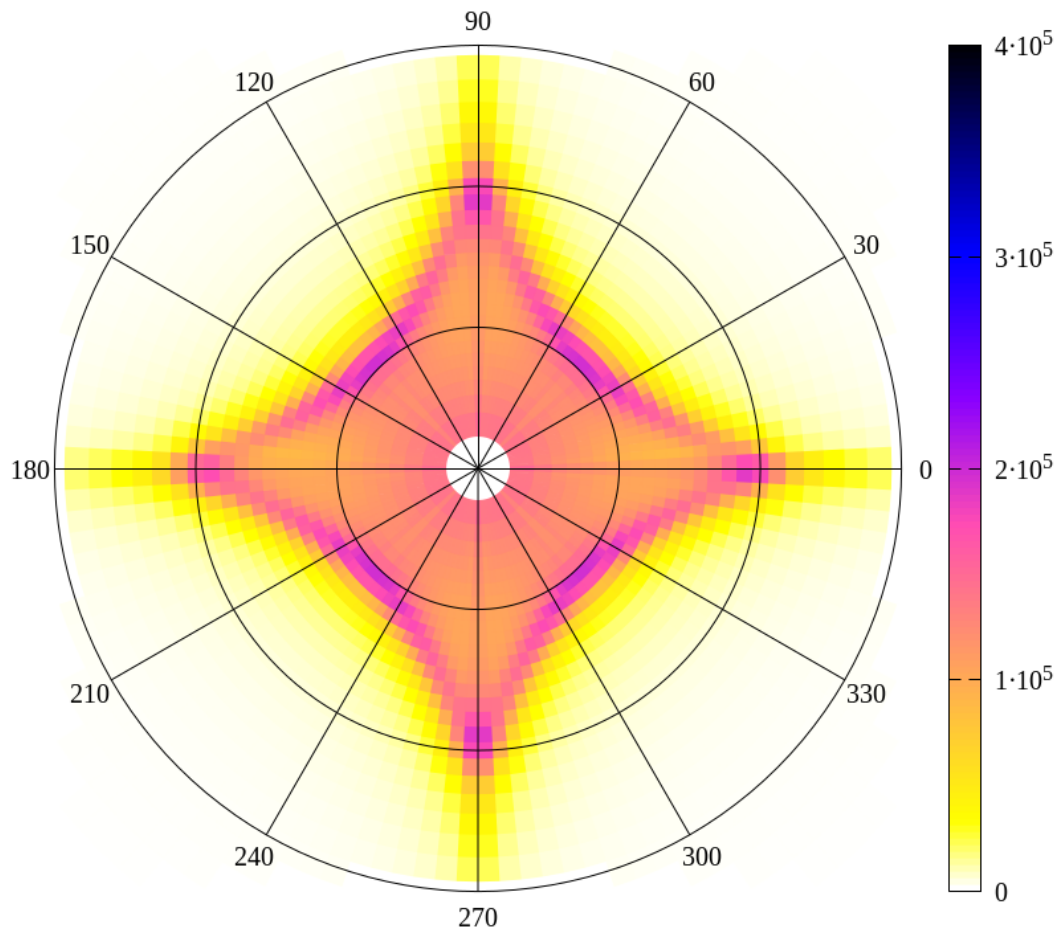


Рис. 2.2. Пятна Венеры при эмиссии с поверхности (001) Ni в модели 20 атомов

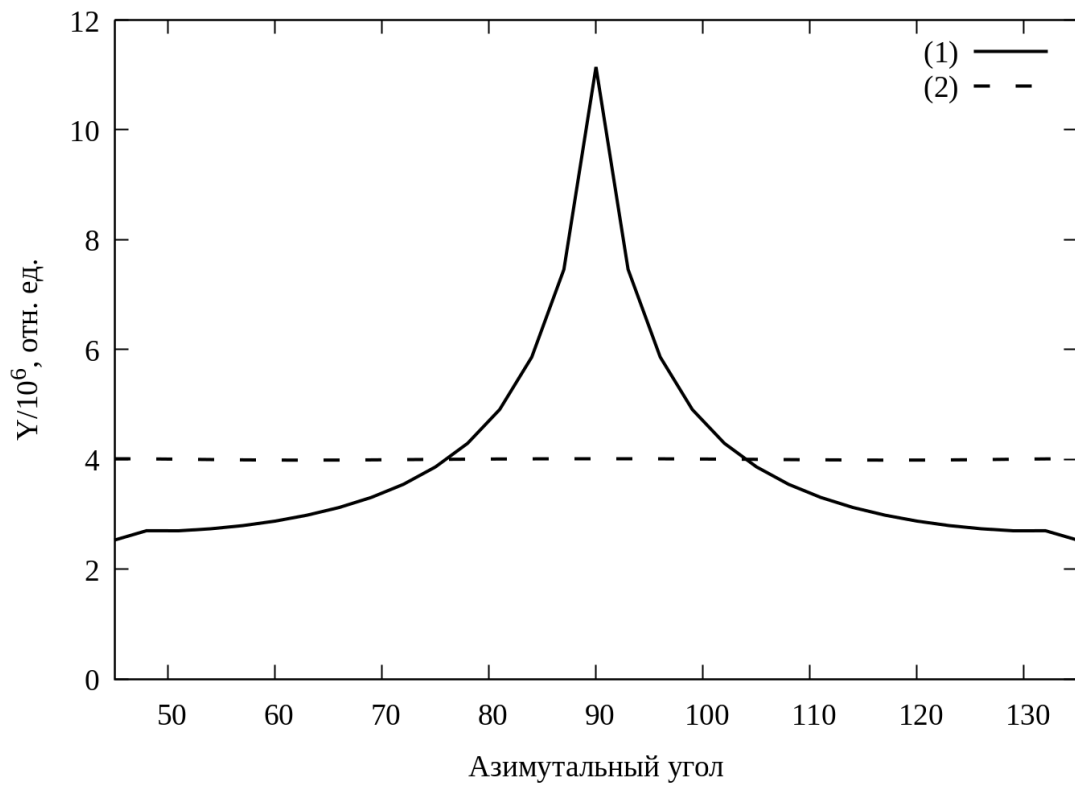


Рис. 2.3. Распределение атомов, эмитированных с поверхности монокристалла (001) Ni, по азимутальному углу наблюдения φ (1) и начальному азимутальному углу φ_0 (2)

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

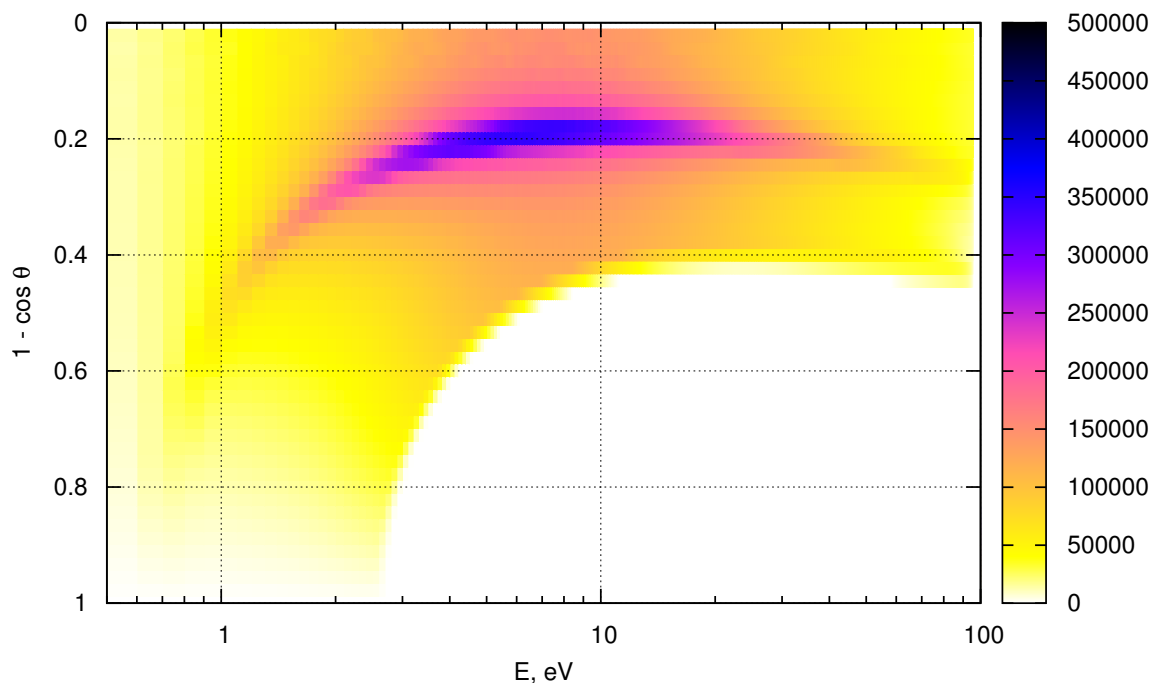


Рис. 2.4. Распределение распыленных атомов по E и $1 - \cos \theta$ для всех углов φ

На рис. 2.4 представлено полученное в рамках модели распределение всех распыленных атомов по энергии E и $1 - \cos \theta$ для всех азимутальных углов φ . Распределение имеет выраженный максимум, который виден на рис. 2.4 как “хребет” другого цвета. Также можно наблюдать область тени: это означает, что атомы с энергиями E и углами θ из данной области не наблюдаются.

Распределение распыленных атомов по энергии E и $1 - \cos \theta$ в азимутальном направлении на центр линзы из двух атомов ($\varphi = 90^\circ$) представлено на рис. 2.5. Интересно отметить, что оно имеет ту же область тени, что и на рис. 2.4, и максимум сдвинут вплотную к границе этой области. Таким образом, бóльшая часть распыленных атомов в этом направлении имеет энергию E и направление $1 - \cos \theta$, близкие к критическим, которые удовлетворяют уравнению границы тени $1 - \cos \theta = f(E)$.

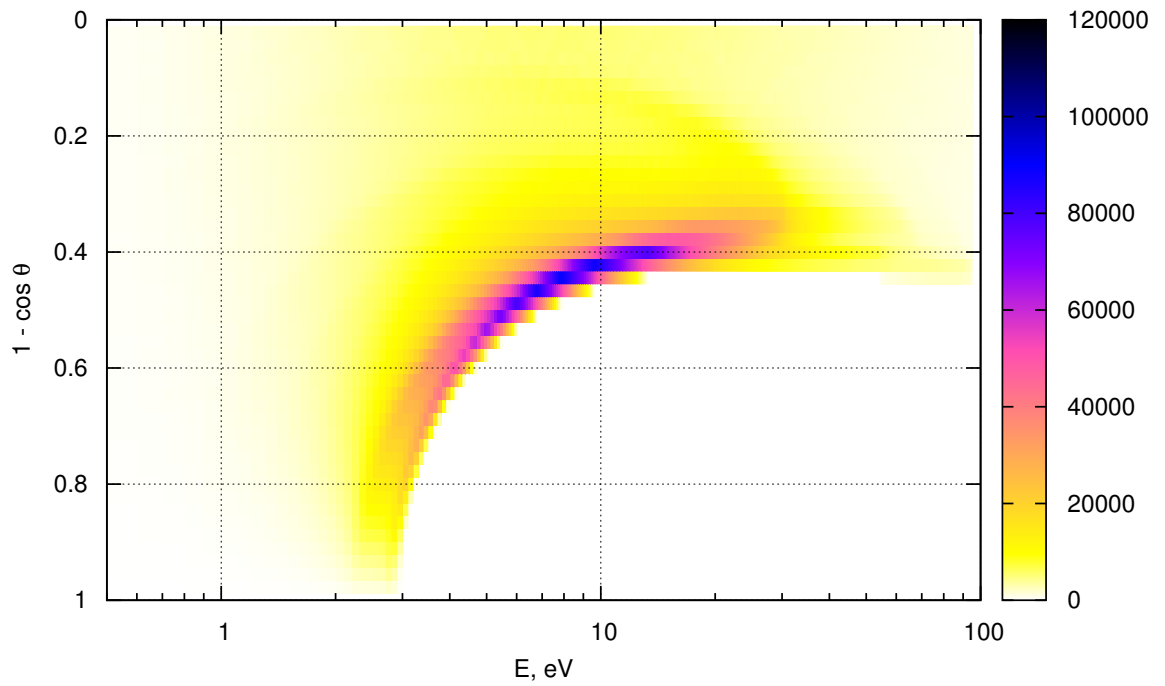


Рис. 2.5. Распределение распыленных атомов по E и $1 - \cos \theta$ для углов φ $[88.5^\circ; 91.5^\circ]$

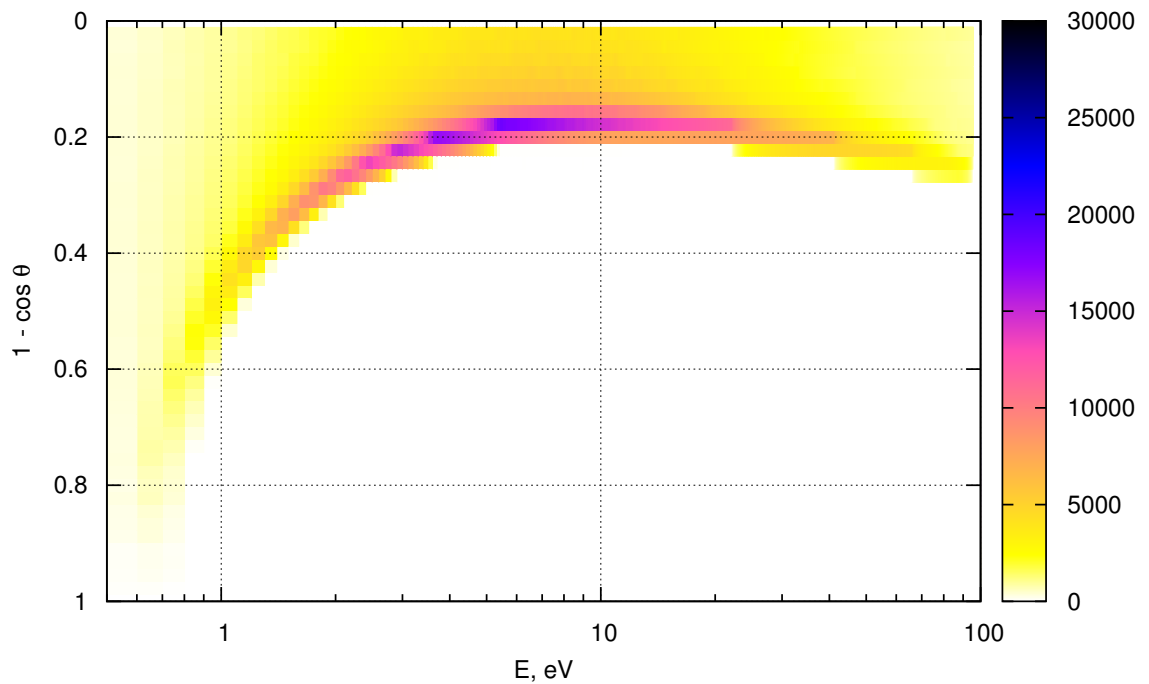


Рис. 2.6. Распределение распыленных атомов по E и $1 - \cos \theta$ для углов φ $[43.5^\circ; 46.5^\circ]$

На рис. 2.6 изображено распределение распыленных атомов по энергии E и $1 - \cos \theta$ в азимутальном направлении на атом линзы ($\varphi = 45^\circ$). Рассеяние эмитируемых атомов на атоме является более жестким, чем рассеяние на линзе из двух атомов. Поэтому в первом случае траектории сильнее “подгибаются” к нормали. Из-за этого на рис. 2.6 мы видим существенно бóльшую область тени.

Характерной особенностью всех трех распределений является то, что “хребты” простираются практически во всем диапазоне энергий E , а не только в окрестности $E = E_b/2$. Благодаря этому в модели 20 атомов максимум энергоспектра распыленных атомов при увеличении полярного угла θ будет сдвигаться в сторону меньших энергий, что соответствует экспериментальным данным [40, 70, 71].

2.3. Вклад перефокусированных атомов в наблюдаемое распределение

На рис. 2.7 представлены распределения атомов, распыленных в азимутальных направлениях 90° , 87° и 84° (ширина интервала 3°) 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 . Такие атомы согласно классификации являются перефокусированными (см. рис. 1.10 на стр. 39). При этом атомы могут перефокусироваться, даже вылетая под небольшим углом к направлению на центр 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 . В работе [17], где использовалась модель 4 атомов (см. рис. 1.9 на стр. 38), были найдены телесные углы и значения энергии, для которых все распыленные атомы на 100% являются перефокуси-

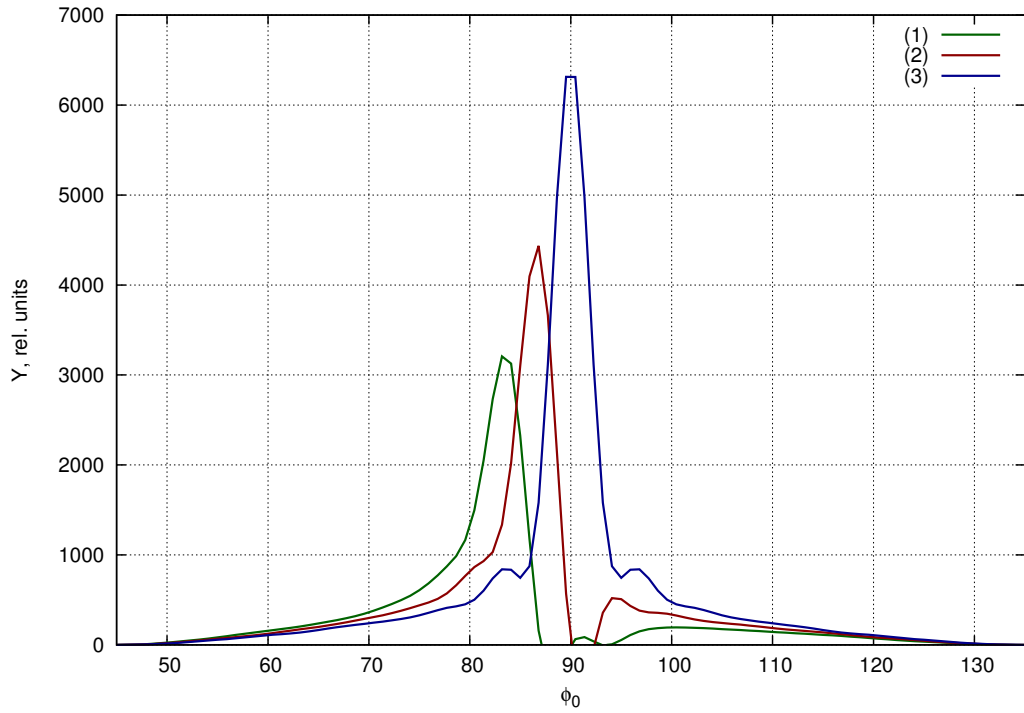


Рис. 2.7. Распределения эмитированных атомов по азимутальному углу φ_0 для всех энергий E и полярных углов вылета θ , наблюдаемых в интервалах углов φ $[88.5^\circ; 91.5^\circ]$ (1), $[85.5^\circ; 88.5^\circ]$ (2), $[82.5^\circ; 85.5^\circ]$ (3). При $\varphi_0 > 90^\circ$ отчетливо наблюдается перефокусировка атомов через центр линзы

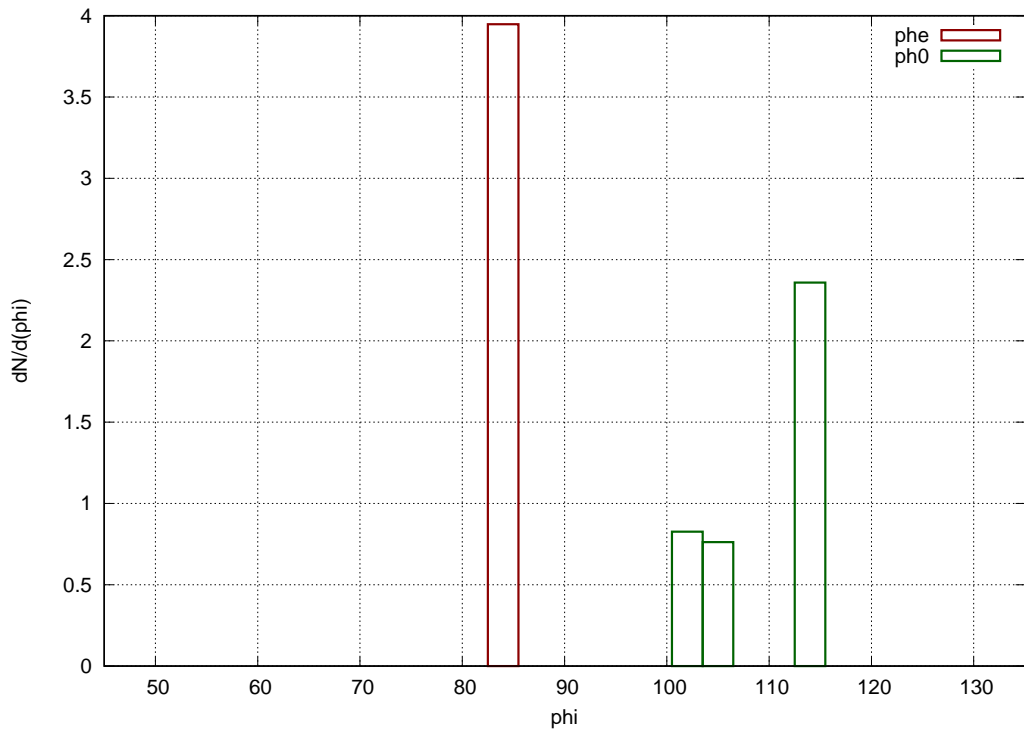


Рис. 2.8. Дифференциальные по начальному азимутальному углу φ_0 (ph0) и азимутальному углу наблюдения φ (phe) распределения эмитированных атомов для энергии E (2.6 ± 0.1) эВ и полярного угла вылета θ $[70.5^\circ; 71.9^\circ]$, наблюдаемых в интервале углов φ $[82.5^\circ; 85.5^\circ]$ (расчеты по малой статистике)

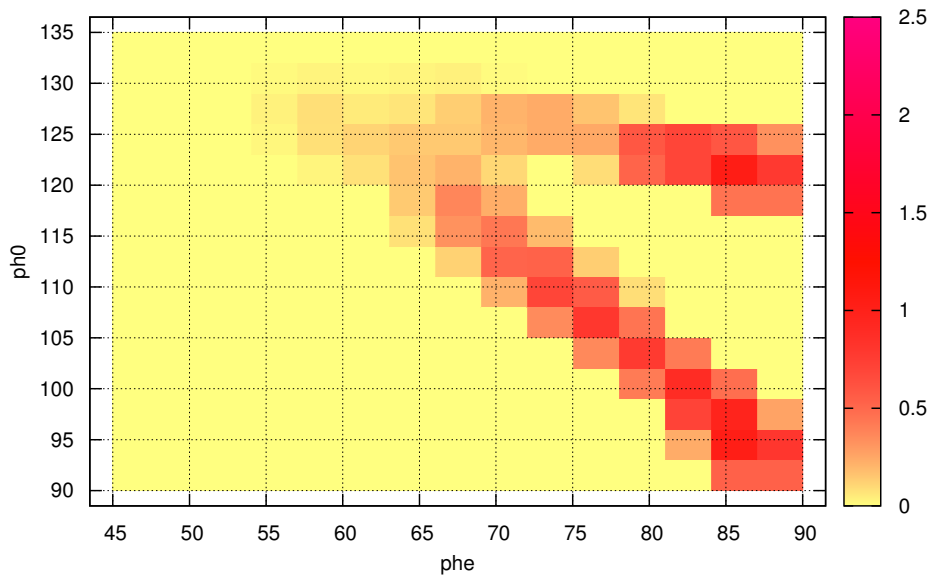


Рис. 2.9. Распределение перефокусированных атомов по начальному азимутальному углу φ_0 и азимутальному углу наблюдения φ для углов θ $[56.3^\circ; 57.8^\circ]$ и энергии E (2.5 ± 0.4) эВ, в модели 20 атомов (расчеты по малой статистике)

рованными. При этом перефокусированные атомы, вылетевшие из интервала угла φ_0 шириной $\pm 1.5^\circ$, целиком наблюдались в другом интервале углов φ такой же ширины.

На рис. 2.8 показано трижды дифференциальное распределение по углам φ и φ_0 для интервалов полярного угла θ $[70.5^\circ; 71.9^\circ]$ и энергии E (2.6 ± 0.1) эВ в модели 20 атомов. Отметим, что в данной области полярного и азимутального углов вылета и энергии сигнал распыленных атомов также на 100% формируется за счет перефокусированных атомов. Область нулевого сигнала шириной 6° разделяет перефокусированные атомы на две группы. Значит, в модели 20 атомов возникает многозначность 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 .

Распределение перефокусированных атомов одновременно по начальному азимутальному углу φ_0 и азимутальному углу наблюдения φ для полярного

угла θ [56.3° ; 57.8°] и энергии E (2.5 ± 0.4) эВ представлено на рис. 2.9. Наблюдается два выраженных максимума числа перефокусированных атомов (“хребты”) в указанном распределении. Оказалось, что имеет место многозначность перефокусированных атомов не только по начальному углу φ_0 , но и по углу наблюдения φ .

Многозначность сигнала перефокусированных атомов при эмиссии с поверхности является важным эффектом, который следует учитывать при обратном преобразовании экспериментальных распределений распыленных атомов по углам и энергии.

На рис. 2.10 представлено распределение распыленных атомов по полярному углу и энергии наблюдения для несимметричного относительно направления $\langle 100 \rangle$ интервала азимутального угла $\varphi = 78^\circ \pm 1.5^\circ$. Характерные особенности распределения — максимумы в виде “хребтов” и область тени, характеризующаяся значениями 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 θ будет сдвигаться в сторону меньших энергий, в соответствии с экспериментальными данными. Хребты образованы отдельно фокусированными (верхний) и перефокусированными (нижний) атомами.

Нижний хребет расположен в области полярных углов и энергии, при которых фокусированные и собственные атомы не вылетают. Таким образом, перефокусированные атомы в данном случае на 100% образуют максимум. Следовательно, в экспериментах по распылению монокристаллов с разрешением по углам и энергии принципиально возможно отделить сигнал перефокусированных атомов от сигнала других групп атомов.

На рис. 2.11 показано энергетическое распределение распыленных атомов для выделенных азимутального и полярного углов. Левый максимум образован фокусированными и собственными атомами, вклад собственных атомов значи-

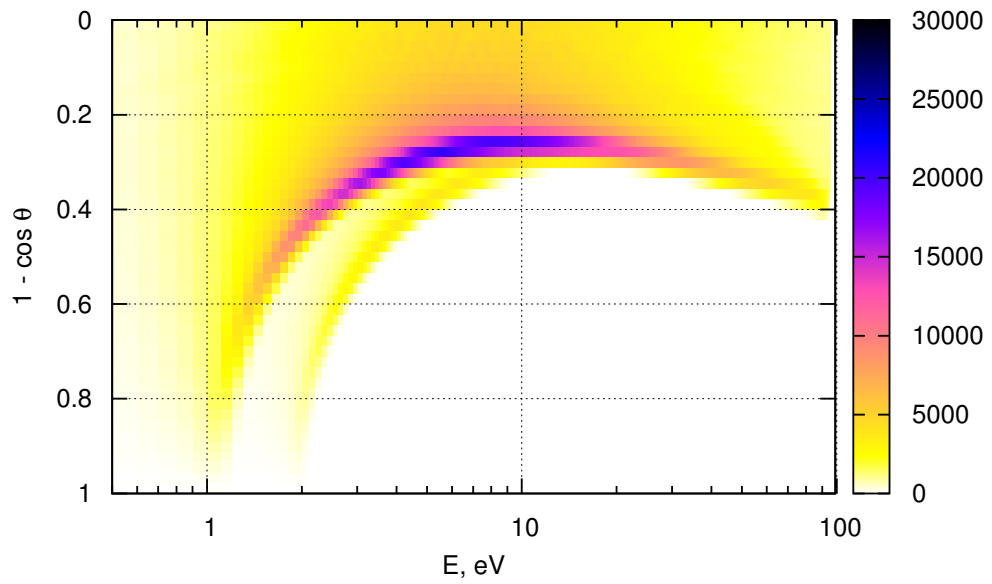


Рис. 2.10. Распределение эмитированных атомов по энергии E и $1 - \cos \theta$, наблюдаемых в интервале азимутальных углов φ $[76.5^\circ; 79.5^\circ]$. Верхний хребет образован в основном фокусированными атомами, нижний только перефокусированными атомами

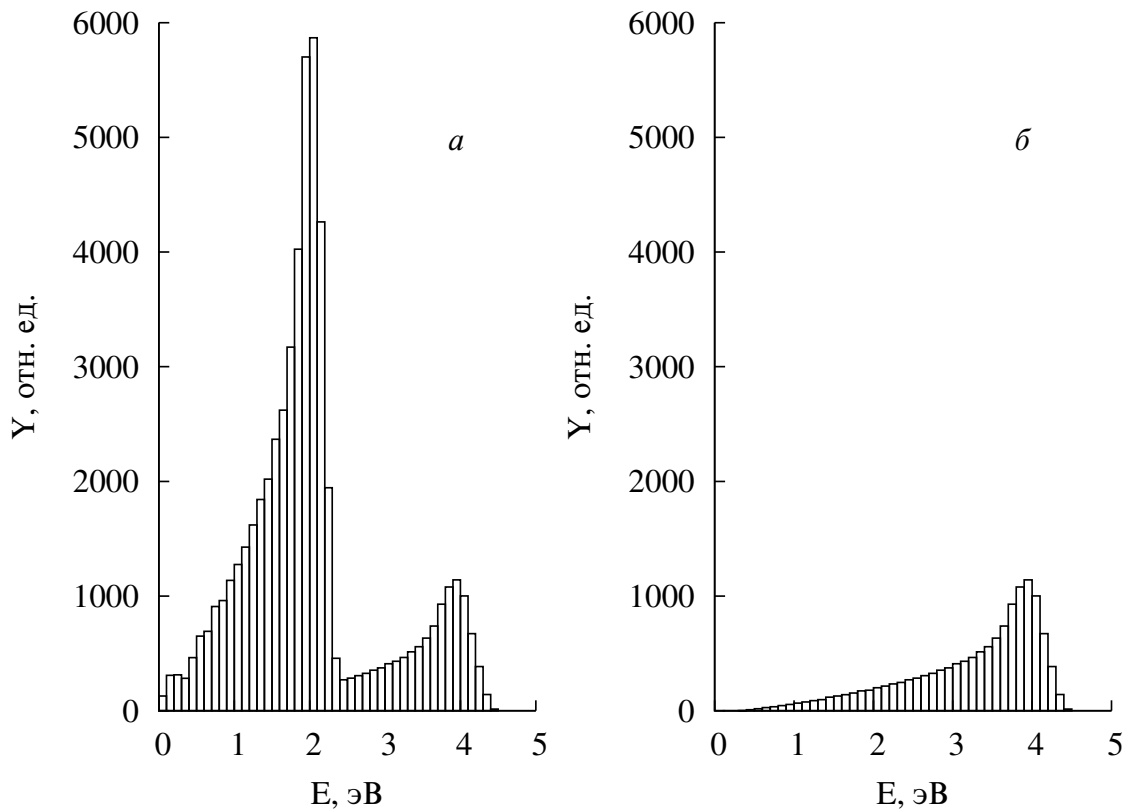


Рис. 2.11. Распределения всех распыленных атомов (а) и только перефокусированных распыленных атомов (б) по энергии E при эмиссии с грани (001) Ni для полярных углов вылета θ $[56.3^\circ; 57.8^\circ]$ и интервала азимутальных углов φ $[76.5^\circ; 79.5^\circ]$

телен только при энергии менее 1.2 эВ, правый максимум на 100% образован перефокусированными атомами. При энергиях выше 20 эВ в распределении присутствует высокоэнергетический максимум, который ранее был также описан в работе [140] и образован фокусированными, а не перефокусированными атомами, из-за чего на рис. 2.11 не показан.

2.4. Механизмы вылета перефокусированных атомов

В распределении эмитированных атомов по энергии интересно выяснить предысторию атомов, которые после вылета из кристаллического узла и преодоления потенциального барьера наблюдаются в конкретном телесном угле с той или иной энергией. Метод молекулярной динамики открывает широкие возможности для сравнения и анализа, поскольку в рамках метода целиком вычисляется траектория каждого атома.

Для разделения атомов на группы по механизмам был построен график распределения по начальной энергии E_0 эмитированных атомов, наблюдаемых в интервале углов φ [76.5°; 79.5°] и θ [49.9°; 51.5°] (рис. 2.12). Из графика отчетливо видно, что энергия фокусированных атомов при вылете из узла составляет от 6 до 9 эВ, начальная энергия перефокусированных атомов — от 13 до 21 эВ. Можно выделить две группы перефокусированных атомов: первая, с начальными энергиями атомов от 13 до 17 эВ, и вторая, с начальными энергиями атомов от 17 до 21 эВ. Теперь, применяя эти два фильтра при построении графика распределения перефокусированных атомов по энергии E , наблюдаемых в указанных интервалах углов θ и φ , можно увидеть вклад этих групп в итоговое распределение (рис. 2.13).

Аналогичным образом можно узнать предысторию перефокусированных атомов по полярному углу θ_0 и азимутальному углу φ_0 , построив соответствующие распределения (рис. 2.14 и 2.15). На рис. 2.14 в распределении для эмитированных атомов с произвольной начальной энергией E_0 наблюдается три

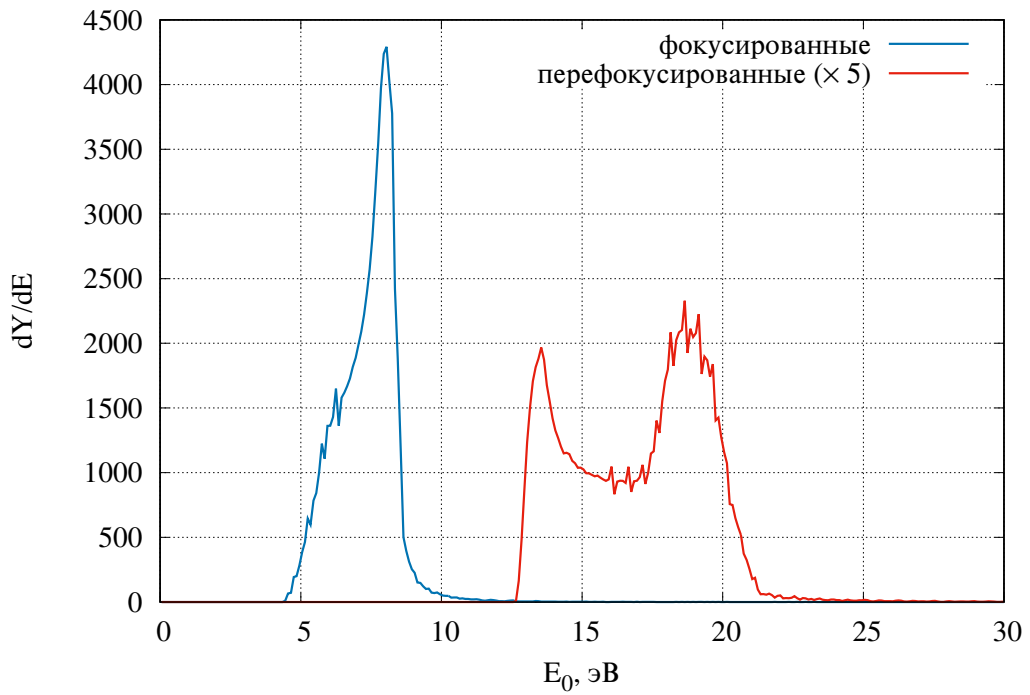


Рис. 2.12. Распределения фокусированных и перефокусированных атомов по энергии E_0 , наблюдаемых в интервале углов φ $[76.5^\circ; 79.5^\circ]$ и θ $[49.9^\circ; 51.5^\circ]$

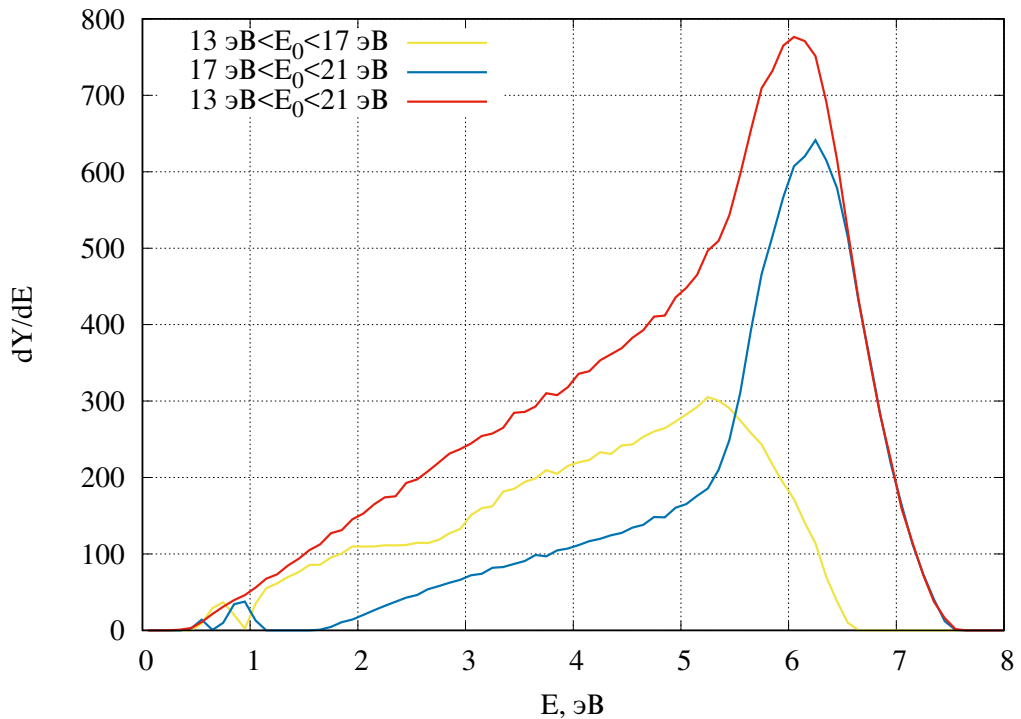


Рис. 2.13. Вклад групп перефокусированных атомов с различной энергией E_0 в распределение эмитированных атомов по энергии E , наблюдаемых в интервале углов φ $[76.5^\circ; 79.5^\circ]$ и θ $[49.9^\circ; 51.5^\circ]$

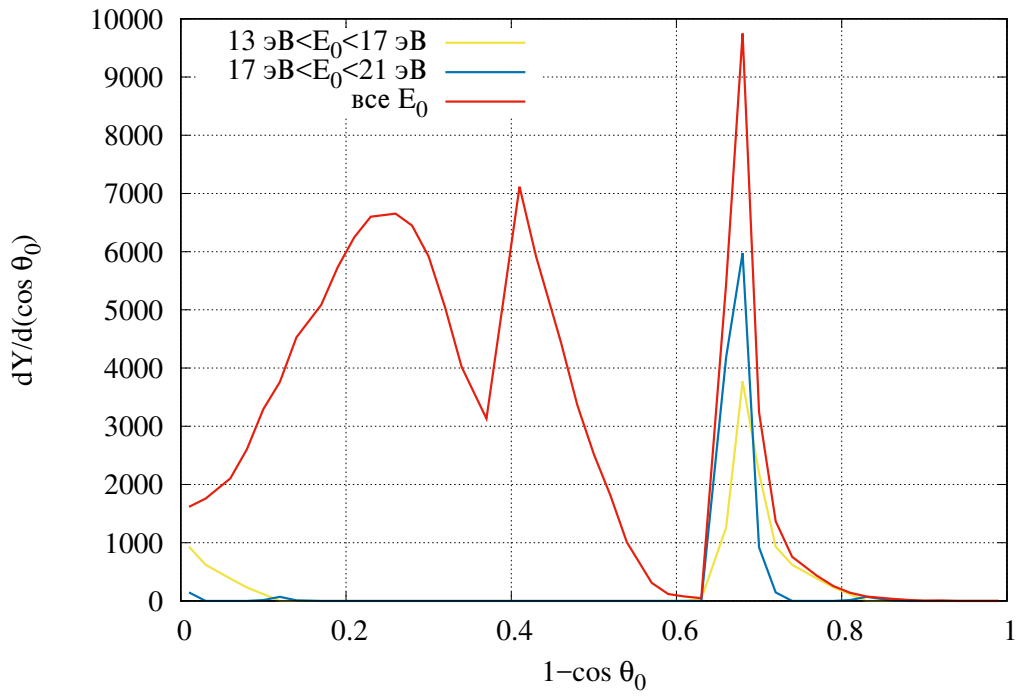


Рис. 2.14. Распределения эмитированных атомов с различной энергией E_0 по $1 - \cos \theta_0$, наблюдаемых в интервале углов φ $[76.5^\circ; 79.5^\circ]$ и θ $[49.9^\circ; 51.5^\circ]$

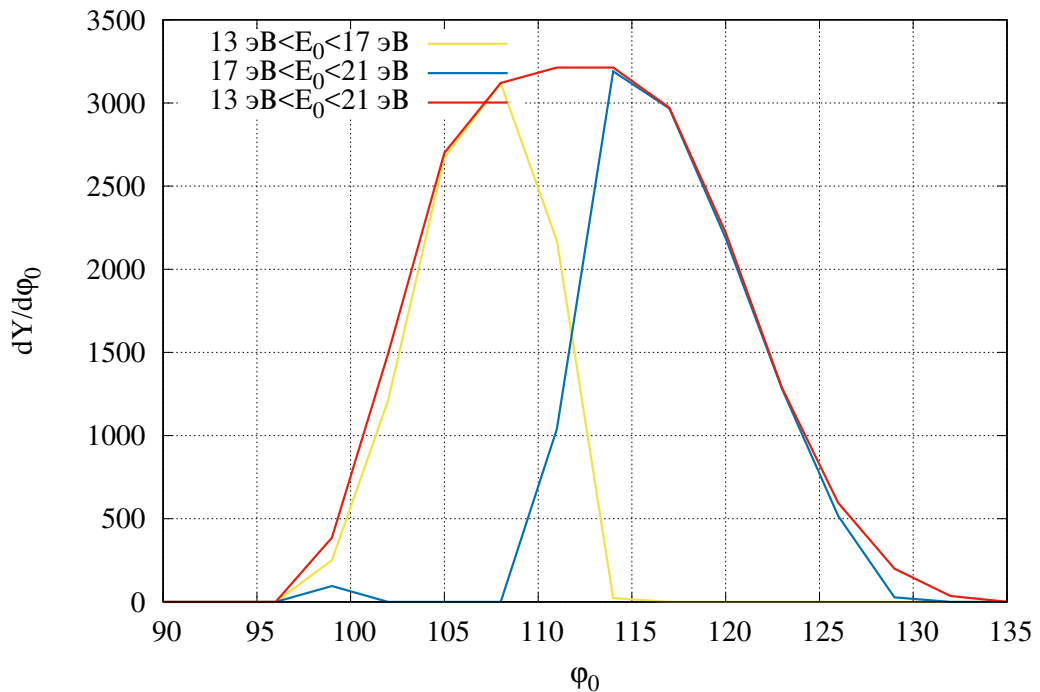


Рис. 2.15. Распределения перефокусированных атомов с различной энергией E_0 по начальному углу φ_0 , наблюдаемых в интервале углов φ $[76.5^\circ; 79.5^\circ]$ и θ $[49.9^\circ; 51.5^\circ]$

максимума, крайний правый максимум формируется за счет сильно заблокированных атомов ($\theta < \theta_0$). Из данного графика можно сделать два вывода:

1. перефокусированные атомы обеих групп летят под практически одинаковыми начальными углами θ_0 ($\cos \theta_0 \approx 0.35$);
2. перефокусированные атомы являются сильно заблокированными.

Между тем, рис. 2.15 показывает, что указанные две группы перефокусированных атомов имеют четкую дифференциацию по углу φ_0 . При этом 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 было показано, что эта дополнительная энергия теряется при рассеянии на атоме, находящимся непосредственно за линзой.

Для изучения влияния атома за линзой на процесс перефокусировки было проведено моделирование эмиссии с поверхности (001) Ni в рамках модели 4 атомов, в которой не учитывается наличие атома непосредственно за линзой. На рис. 2.16 и 2.17 показаны дифференциальные распределения эмитированных атомов одновременно по E и φ_0 , рассчитанные по моделям 4 и 20 атомов соответственно. Оказалось, что перефокусированные атомы очень чувствительны к выбору модели, чего нельзя сказать о фокусированных атомах.

При добавлении атомов поверхности в модель “хвост” распределения перефокусированных атомов при высоких энергиях загибается в сторону низких энергий E , при этом данная группа атомов имеет угол φ_0 , более близкий к направлению на центр линзы. Таким образом, распределение перефокусированных атомов на рис. 2.17 в сравнении с распределением на рис. 2.16 приобретает свойство многозначности по углу φ_0 . Между ветвями распределения перефокусированных атомов появляется область тени, которая имеет больший размер при уменьшении энергии E .

Итак, в детекторе с узкой угловой апертурой при энергии $E \leq 6$ эВ на-

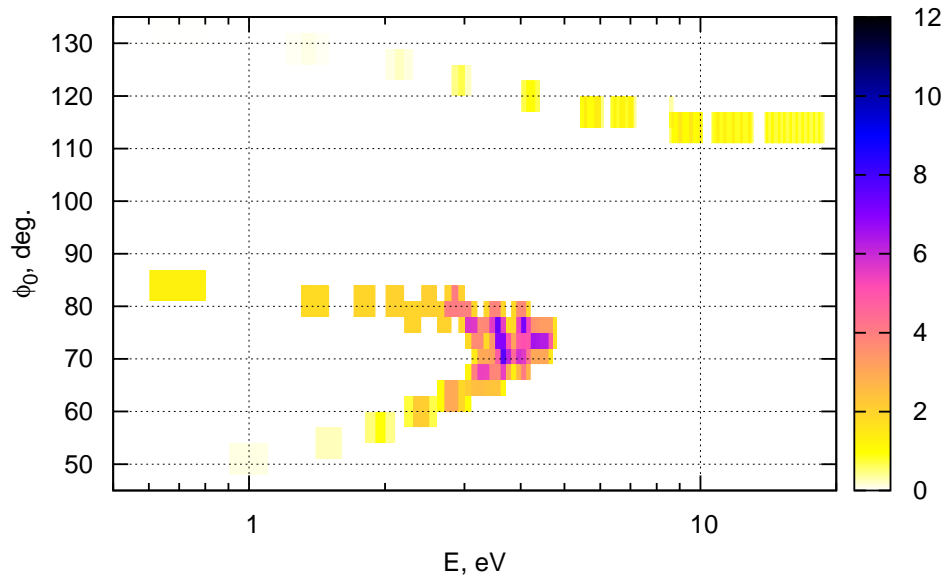


Рис. 2.16. Дифференциальное распределение по начальному азимутальному углу φ_0 и энергии E эмитированных атомов для полярного угла вылета θ [$56.3^\circ; 57.8^\circ$], наблюдаемых в интервале углов φ [$82.5^\circ; 85.5^\circ$], по модели 4 атомов (расчеты по малой статистике). В нижней части рисунка — фокусированные атомы, в верхней — перефокусированные

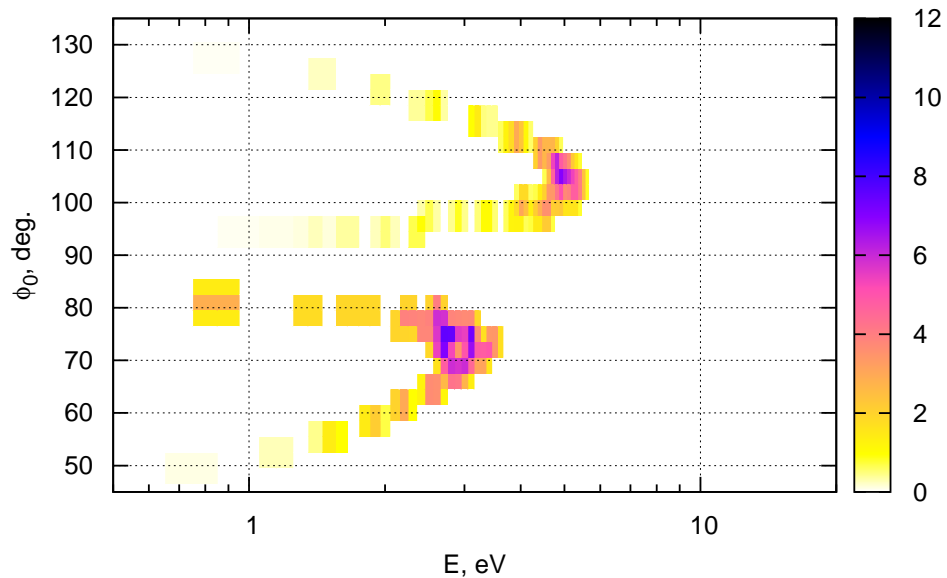


Рис. 2.17. Дифференциальное распределение по начальному азимутальному углу φ_0 и энергии E эмитированных атомов для полярного угла вылета θ [$56.3^\circ; 57.8^\circ$], наблюдаемых в интервале углов φ [$82.5^\circ; 85.5^\circ$], по модели 20 атомов (расчеты по малой статистике). В нижней части рисунка — фокусированные атомы, в верхней — перефокусированные

блюдаются перефокусированные атомы, эмитированные под разными углами φ_0 . Верхняя ветвь распределения образована перефокусированными атомами, которые рассеивались на ближайшем атоме линзы, нижняя — перефокусированными атомами, которые рассеивались на двух атомах: атоме линзы и атоме за линзой. Следовательно, многозначность распределения перефокусированных атомов по начальному азимутальному углу эмиссии возникает из-за эффекта многократного рассеяния вылетающего атома на атомах поверхности.

Выводы к главе 2

Анализ результатов, рассчитанных по предложенной модели 20 атомов, показал, что модель адекватно описывает формирование пятен Венера при эмиссии с поверхности монокристалла (001) Ni, а также экспериментально наблюдаемый сдвиг максимума энергоспектра распыленных атомов при увеличении полярного угла наблюдения. Среди всех эмитированных атомов обнаружены перефокусированные атомы, то есть те, которые по азимутальному углу наблюдаются с противоположной стороны от центра линзы из двух атомов, по сравнению с направлением вылета. При этом атомы могут испытывать перефокусировку даже при вылете в направлении, близком к центру линзы.

Найдены интервалы энергии и полярного угла наблюдения, для которых сигнал на 100% формируется только за счет перефокусированных атомов. Установлено наличие многозначности перефокусированных атомов по начальному азимутальному углу φ_0 . Путем сравнения с моделью 4 атомов, а также анализа отдельных траекторий перефокусированных атомов было показано, что многозначность возникает из-за эффекта многократного рассеяния вылетающего атома на атомах поверхности. Эту многозначность необходимо принимать во внимание при расшифровке (обратном преобразовании) экспериментальных распределений распыленных атомов по углам и энергии.

Были рассчитаны дифференциальные распределения распыленных атомов

по полярному углу и энергии наблюдения для несимметричных относительно направления на центр линзы $\langle 100 \rangle$ интервалов азимутального угла. Обнаружено, что в этих распределениях разрешаются отдельные максимумы для фокусированных и перефокусированных атомов в виде “хребтов”. Таким образом удалось показать, что отдельный сигнал перефокусированных атомов возможно выделить экспериментально при достаточном разрешении детектора по углам и энергии.

Результаты, приведенные в главе, докладывались и обсуждались на Международных конференциях “Взаимодействие ионов с поверхностью” (Москва, 2015 и Ярославль, 2021); на Международных Тулиновских конференциях “Физика взаимодействия заряженных частиц с кристаллами” (Москва, 2014–2018); 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).

Глава 3

Чувствительность распыленных атомов к изменению параметров мишени

3.1. Эволюция распределений распыленных атомов с изменением атомного номера вещества мишени

Парный потенциал Борна-Майера (1.34), который использовался в работе, становится более жестким при увеличении атомного номера Z вещества мишени. Вследствие этого при эмиссии атомы будут больше отклоняться по полярному углу в направлении к нормали с ростом Z .

В работах [16, 17] сравнивались особенности фокусировки атомов при эмиссии с поверхности (001) Ni и (001) Au. В рамках нашей работы мы изучали эволюцию дифференциальных распределений фокусированных и перефокусированных атомов по углам и энергии при изменении атомного номера от $Z = 28$ (Ni) до $Z = 79$ (Au). Из выражений для констант потенциала Борна-Майера [128] видно, что энергетическая константа A пропорциональна $Z^{5/3}$ и при переходе от Ni к Au увеличивается примерно в 5.6 раз.

Параметры кристаллической решетки при увеличении Z не изменялись, также использовалась одна и та же энергия связи 4.435 эВ (для никеля). Это было сделано для того, чтобы исключить различие энергий связи атомов для разных мишеней и выяснить влияние увеличения конкретно атомного номера Z на особенности распределения.

На рис. 3.1 и 3.2 показаны распределения по энергии E всех эмитированных атомов и только фокусированных атомов для несимметричного относительно центра линзы направления при углах наблюдения φ [76.5°; 79.5°] и θ [49.9°; 51.5°]. Для случая $Z = 28$ (никель) фокусированные атомы образуют максимум при энергии 3 эВ, перефокусированные — при энергии 6 эВ.

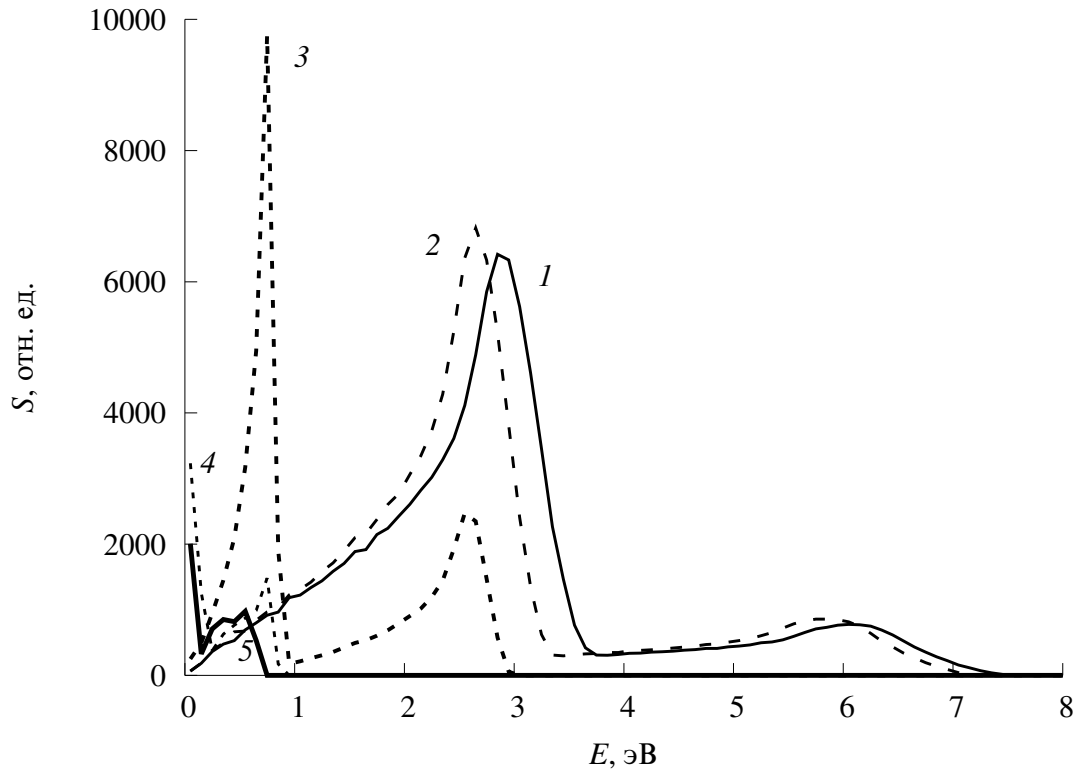


Рис. 3.1. Распределение всех распыленных атомов по энергии E , наблюдаемых в интервале углов φ $[76.5^\circ; 79.5^\circ]$ и θ $[49.9^\circ; 51.5^\circ]$ для атомных номеров Z вещества мишени: 28 (1), 29 (2), 47 (3), 74 (4), 79 (5)

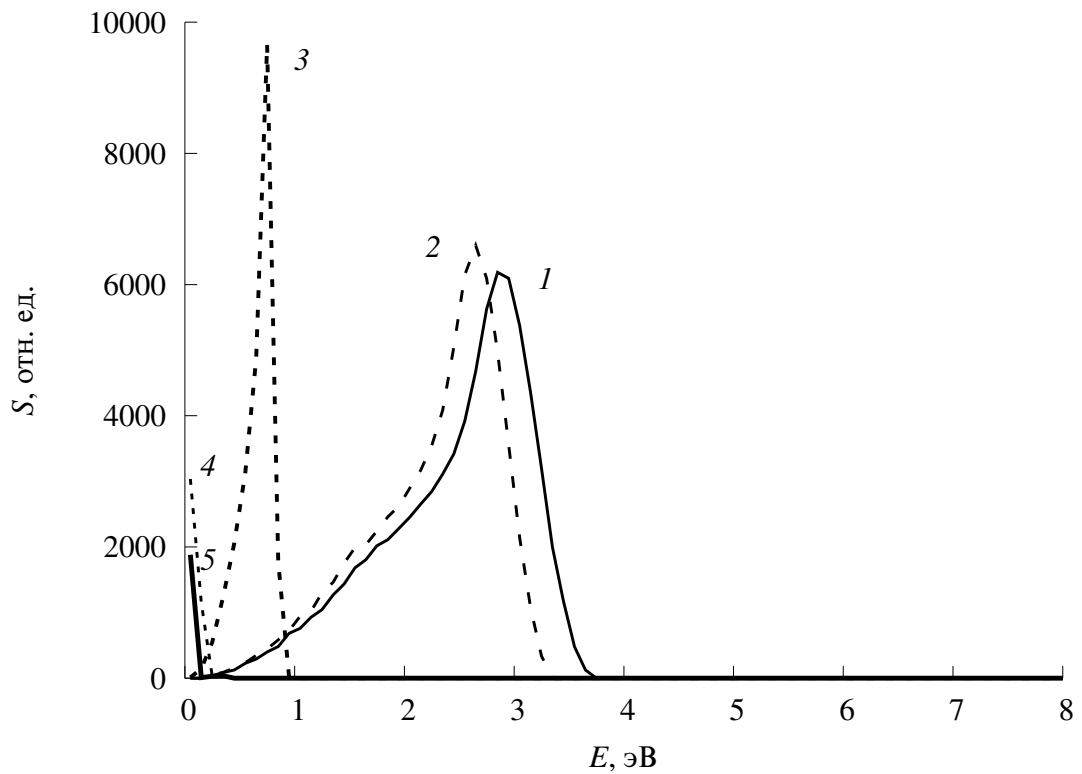


Рис. 3.2. Распределение фокусированных атомов по энергии E , наблюдаемых в интервале углов φ $[76.5^\circ; 79.5^\circ]$ и θ $[49.9^\circ; 51.5^\circ]$ для атомных номеров Z вещества мишени: 28 (1), 29 (2), 47 (3), 74 (4), 79 (5)

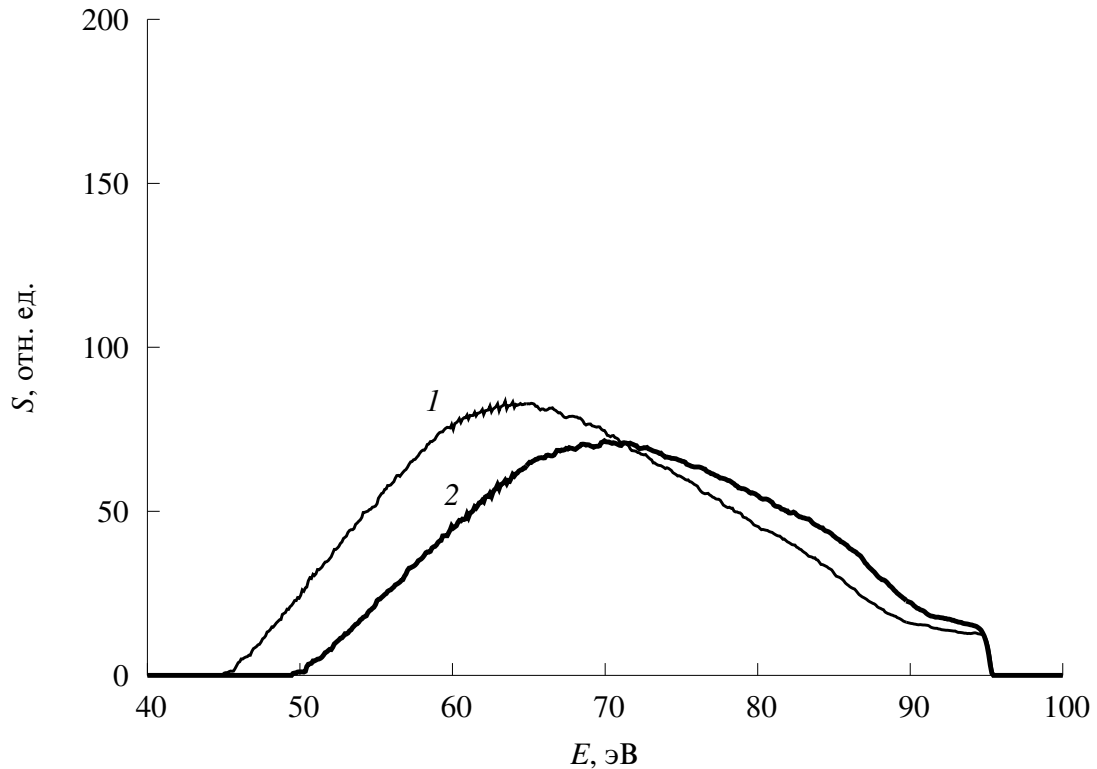


Рис. 3.3. Распределения фокусированных распыленных атомов по энергии E при углах наблюдения φ [76.5°; 79.5°] и θ [49.9°; 51.5°] для атомных номеров Z вещества мишени: 28 (1), 29 (2). Отчетливо виден сильный сдвиг высокоэнергетического максимума распределения даже при небольшом изменении Z

При увеличении атомного номера до 29 (медь) оба сдвигаются чуть меньше, чем на 0.5 эВ в сторону более низких энергий. При увеличении атомного номера до 47 (серебро), а затем и до 79 (золото) фокусированные атомы образуют максимум на 2.5 эВ левее, в то время как перефокусированные атомы образуют максимум на 5 эВ левее. Это означает, что группа перефокусированных атомов обладает большей чувствительностью к изменению атомного номера вещества мишени, чем фокусированные атомы.

При углах наблюдения φ [76.5°; 79.5°] и θ [49.9°; 51.5°] для $Z = 28$ (никель) распыленные атомы образуют максимум при энергии 64 эВ (рис. 3.3). Этот высокоэнергетический максимум в распределении распыленных атомов по энергии образован фокусированными атомами. Данный максимум мал по величине, но является достаточно широким и является характерной особенностью распыления монокристаллов при угловом разрешении. Он был обнаружен

в работе [140] и было исследовано его формирование. Максимум при высоких энергиях на 100% состоит из сильно заблокированных атомов (то есть для них $\theta < \theta_0$). Поэтому формирование высокоэнергетического максимума невозможно объяснить в модели без учета атомной дискретности поверхности мишени, где отсутствуют сильно заблокированные атомы.

В интервале азимутального угла $78^\circ \pm 1.5^\circ$ не наблюдаются распыленные атомы с энергиями между низкоэнергетическим и высокоэнергетическим максимумами, эта особенность также отмечалась в [140]. Для выбранных нами угловых интервалов не распыляются атомы с энергиями между 7.5 и 45 эВ (так называемые “запрещенные” энергии). Атомы в этом диапазоне энергий наблюдаются в распределении всех распыленных атомов, но при меньших полярных углах, поскольку при эмиссии их траектории сильно поворачиваются в сторону нормали к поверхности. “Запрещенные” энергии соответствуют области тени, в которой полностью отсутствуют распыленные атомы вследствие особенностей рассеяния эмитируемых атомов на атомах поверхности.

С увеличением атомного номера до 29 (медь) фокусированные сильно заблокированные атомы образуют высокоэнергетический максимум при 70 эВ, то есть максимум смещается на 6 эВ в сторону больших энергий, что свидетельствует о его чувствительности даже к малым изменениям Z . Смещение происходит в противоположную сторону относительно смещения максимума при низких энергиях, поскольку при увеличении Z увеличиваются угловые размеры тени за рассеивающими атомами поверхности.

При дальнейшем росте атомного номера до 47 (серебро) и далее до 79 (золото) оказалось, что в этих интервалах азимутального и полярного углов наблюдения высокоэнергетического максимума распыленных атомов не наблюдается. Это связано с тем, что сильная блокировка атомов уменьшает количество распыленных атомов при этих углах наблюдения и энергиях до нуля.

Также была изучена серия полярных угловых распределений распыленных атомов с разрешением одновременно по азимутальному углу φ и энергии E для

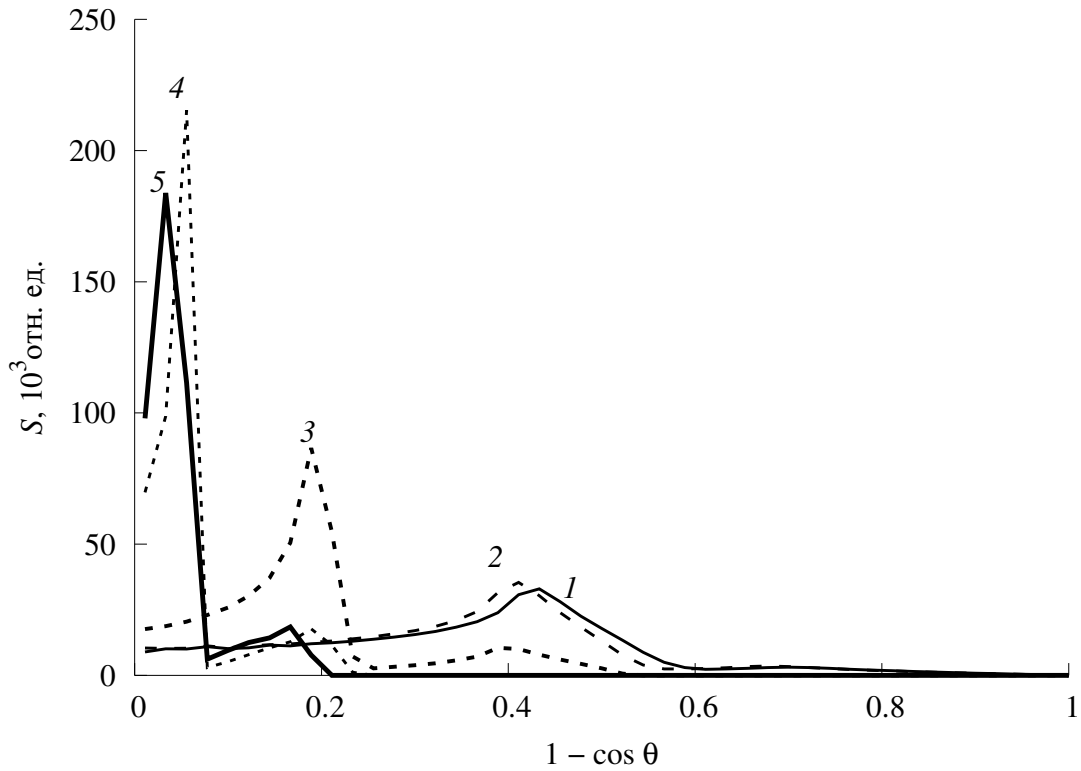


Рис. 3.4. Распределение всех распыленных атомов по $1 - \cos \theta$, при энергии $E (2.0 \pm 0.4)$ эВ и углах $\varphi [76.5^\circ; 79.5^\circ]$ для атомных номеров Z вещества мишени: 28 (1), 29 (2), 47 (3), 74 (4), 79 (5)

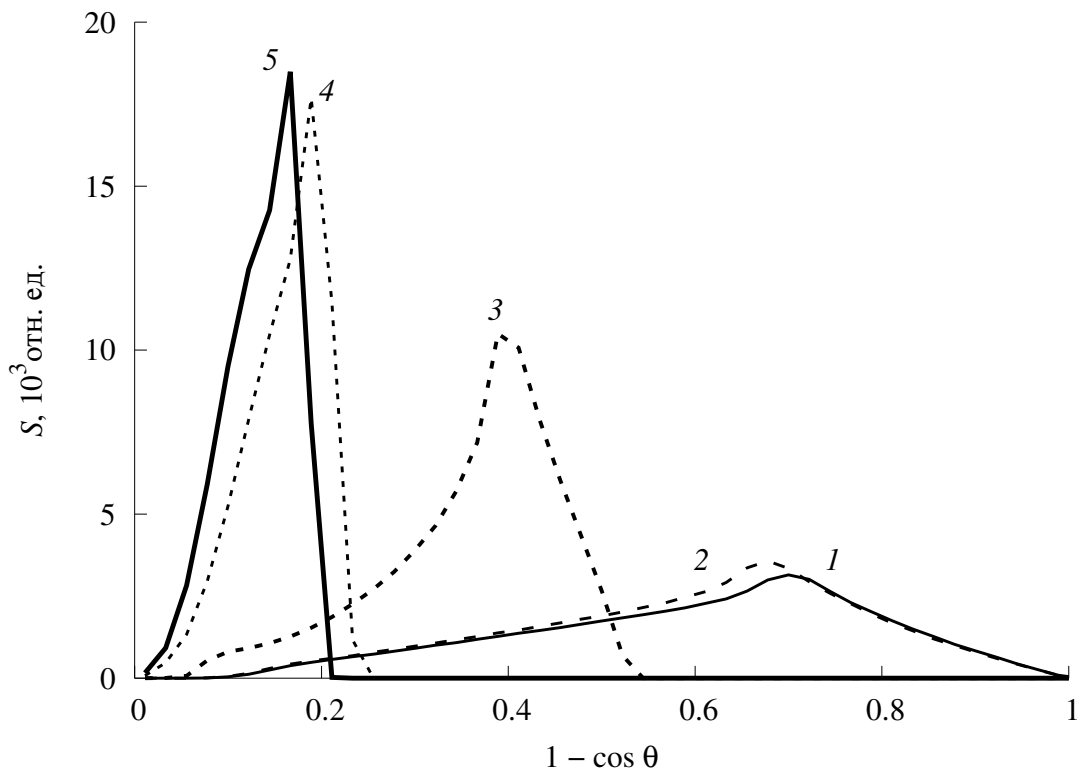


Рис. 3.5. Распределение перефокусированных атомов по $1 - \cos \theta$, при энергии $E (2.0 \pm 0.4)$ эВ и углах $\varphi [76.5^\circ; 79.5^\circ]$ для атомных номеров Z вещества мишени: 28 (1), 29 (2), 47 (3), 74 (4), 79 (5)

различных атомных номеров Z вещества мишени. На рис. 3.4 и 3.5 показаны распределения для всех распыленных и только перефокусированных атомов для азимутального направления $78^\circ \pm 1.5^\circ$, не совпадающего с направлением на центр линзы. Фокусированные атомы образуют максимум при $\theta \approx 55.5^\circ$, а перефокусированные — при $\theta \approx 72.5^\circ$. Собственные атомы дают вклад в распределение только вблизи нормали к поверхности ($\theta \approx 0^\circ$). Обратим внимание, что в распределении распыленных атомов по полярному углу для того же интервала азимутальных углов без разрешения по энергии фокусированные и перефокусированные атомы образуют **один максимум**, который получается в результате уширения и наложения друг на друга двух отдельных максимумов.

При увеличении атомного номера до 29 (медь) оба максимума незначительно смещаются в сторону нормали к поверхности. При увеличении атомного номера до 47 (серебро) и далее до 79 (золото) фокусированные атомы образуют максимум при $\theta \approx 14.8^\circ$, перефокусированные атомы — при $\theta \approx 33.6^\circ$, что говорит о высокой чувствительности этих атомов к изменению Z из-за роста интенсивности блокировки.

Как было показано в разд. 2.3, при эмиссии с поверхности монокристалла (001) Ni в дифференциальном распределении распыленных атомов по энергии и полярному углу для фиксированных интервалов углов φ отчетливо разрешаются отдельные максимумы фокусированных и перефокусированных атомов (см. рис. 2.10 на стр. 59). Особенности этих распределений сохраняются при изменении атомного номера мишени. На рис. 3.6 и 3.7 показаны распределения одновременно по $1 - \cos \theta$ и энергии E для интервала азимутальных углов $\varphi [76.5^\circ; 79.5^\circ]$ при эмиссии с поверхности монокристалла (001) Cu и (001) Ag соответственно. Хребты образованы отдельно фокусированными (верхний) и перефокусированными (нижний) атомами. Нижний хребет расположен в области полярных углов и энергии, при которых фокусированные и собственные атомы не вылетают, и на 100% образован перефокусированными атомами.

Если в распределении распыленных атомов с одновременным разрешени-

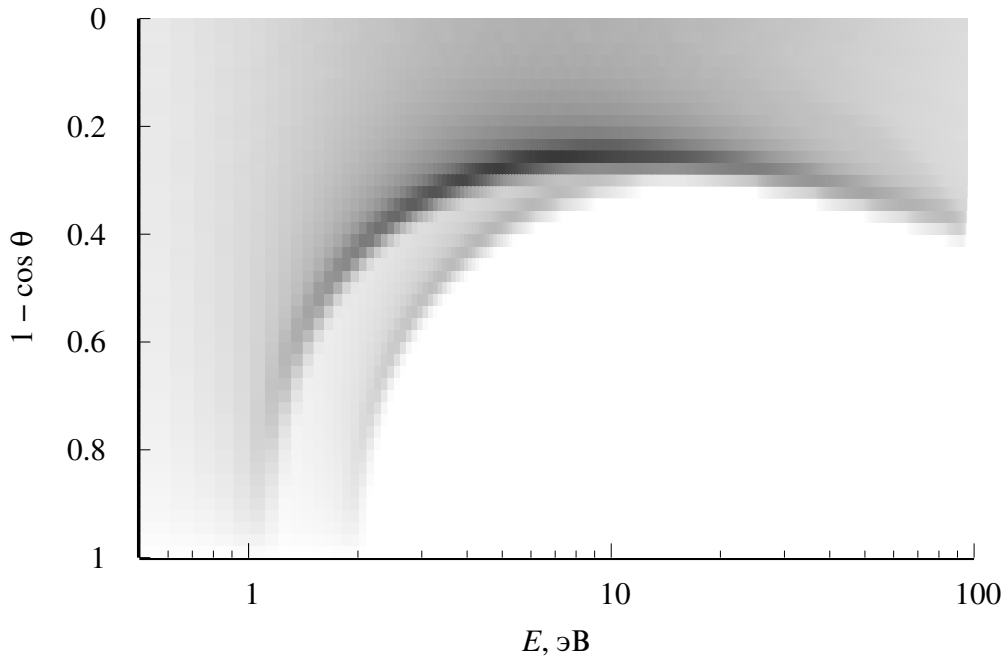


Рис. 3.6. Распределение распыленных атомов при эмиссии с грани (001) Cu ($Z = 29$) одновременно по $1 - \cos \theta$ и энергии E для интервала азимутальных углов φ $[76.5^\circ; 79.5^\circ]$

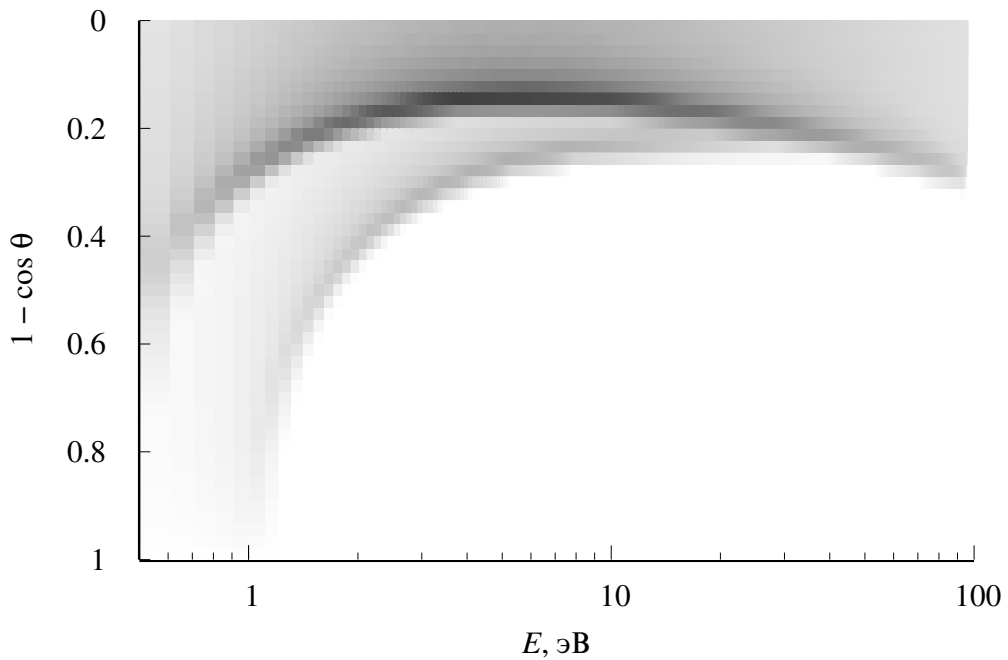


Рис. 3.7. Распределение распыленных атомов при эмиссии с грани (001) Ag ($Z = 47$) одновременно по $1 - \cos \theta$ и энергии E для интервала азимутальных углов φ $[76.5^\circ; 79.5^\circ]$

ем по энергии и полярному углу для $Z = 29$ (Cu), представленном на рис. 3.6, мысленно выделить по горизонтали интервал углов θ $[49.9^\circ; 51.5^\circ]$, то становится понятной структура наблюдаемых максимумов на рис. 3.1 и 3.3. При этом видно, что между низкоэнергетической частью распределения по энергии и высокоэнергетической частью наблюдается область тени, то есть полное отсутствие распыленных атомов при энергии E от 7.3 до 49 эВ.

Увеличение атомного номера с 28 (никель) до 29 (медь) приводит к сдвигу всей структуры распределения, представленного на рис. 3.6, в сторону нормали к поверхности (вверх) из-за роста эффекта блокировки. Становится понятным, почему при этом происходит сдвиг низкоэнергетических максимумов фокусированных и перефокусированных атомов в сторону меньших энергий (рис. 3.1), сдвиг высокоэнергетического максимума в сторону больших энергий (рис. 3.3) и расширение области “запрещенных” энергий между низкоэнергетической частью и высокоэнергетической частью распределения по энергии, то есть увеличение области тени.

Если в распределении распыленных атомов с одновременным разрешением по энергии и полярному углу для $Z = 29$ (Cu), представленном на рис. 3.6, мысленно выделить по вертикали интервал энергии E (1.2 ± 0.4) эВ и дальше увеличивать энергию, то в распределении по $1 - \cos \theta$ для фокусированных распыленных атомов будет наблюдаться немонотонный сдвиг максимума распределения. Сначала с увеличением энергии до (10.0 ± 0.4) эВ максимум распределения смещается в сторону нормали к поверхности, а при дальнейшем увеличении энергии — в сторону от нормали к поверхности. Этот эффект имел место и в расчетах по полной модели молекулярной динамики (с падением ионов) [13].

Эффект немонотонного сдвига максимума полярного углового распределения распыленных атомов возникает из-за конкуренции двух факторов: блокировка атомов (при которой полярный угол уменьшается) и преломления на плоском потенциальном барьере (при котором полярный угол увеличивается). При высоких энергиях эффективный радиус атома, а следовательно, и сечение

взаимодействия атом-атом уменьшается, что приводит к уменьшению эффекта блокировки и сокращению угловых размеров тени от линзы из двух рассеивающих центров [11, 12]. С другой стороны, с ростом энергии плоскому барьеру все труднее поворачивать траектории атомов в сторону от нормали к поверхности. В настоящем случае при сравнительно малых (менее 10 эВ) энергиях E (и, соответственно, малых энергиях E_0) энергия атомов E_i перед плоским потенциальным барьером оказывается соизмеримой с величиной энергии связи, что приводит к сильному влиянию плоского барьера. В результате в этом диапазоне энергий E уменьшение энергии приводит к более сильному преломлению атомов на потенциальном барьере и, следовательно, к сдвигу максимума полярного углового распределения в сторону от нормали к поверхности.

При энергиях более 10 эВ с ростом энергии происходит сдвиг максимума полярного углового распределения в сторону от нормали к поверхности. Этот сдвиг более слабый и связан с сокращением угловых размеров тени от линзы из двух рассеивающих атомов в плоскости поверхности [11, 12].

При переходе от атомного номера 29 (медь) к 47 (серебро) происходит довольно резкий сдвиг всей структуры распределения, представленного на рис. 3.6, в сторону нормали к поверхности (вверх) и низкоэнергетической части распределения в сторону меньших энергий распыленных атомов (влево) — рис. 3.7. Такое смещение и приводит к резким сдвигам низкоэнергетических максимумов фокусированных и перефокусированных атомов в сторону меньших энергий (рис. 3.1). Высокоэнергетический максимум у серебра отсутствует из-за расширения области тени. Это связано с возрастанием сечения взаимодействия атомов с увеличением атомного номера Z вещества мишени.

3.2. Зависимость коэффициента распыления от энергии связи

Другим, не менее важным, параметром, влияющим на эмиссию атомов с поверхности, является поверхностная энергия связи E_b . Напомним, что E_b численно равна работе, которую необходимо совершить для удаления атома с поверхности мишени на бесконечность. Притяжение, которое описывается энергией связи, играет большую роль на второй стадии вылета, когда эмитируемый с поверхности атом уже испытал рассеяние на своих соседях, однако еще не удалился от поверхности на достаточное расстояние. Преодоление плоского потенциального барьера происходит согласно формулам (1.21)–(1.23).

В разд. 1.6 была приведена зависимость коэффициента распыления от энергии связи, полученная для аморфных, поликристаллических и двухкомпонентных мишеней:

$$Y(E_b) = \frac{C}{E_b^{1-2m}}, \quad (3.1)$$

где C — константа, m — параметр начальной функции распределения атомов при пересечении поверхности (1.12). Логарифмируя, получаем линейную зависимость

$$\ln Y = \ln C - (1 - 2m) \ln E_b \quad (3.2)$$

с угловым коэффициентом

$$1 - 2m = -\frac{\Delta(\ln Y)}{\Delta(\ln E_b)} = \frac{\ln(Y_1/Y_2)}{\ln(E_{b2}/E_{b1})}. \quad (3.3)$$

Параметр m , рассчитанный по зависимости коэффициента распыления от энергии связи, должен был бы совпадать с параметром m , используемым в начальной функции распределения. Однако, в нашей модели учет каждого распыленного атома с весом $w = \cos \theta_0 / E_0^{2-2m}$ согласно (1.12) приводит к другому значению m_{eff} в зависимости $Y(E_b)$, сродни результатам [126].

На рис. 3.8 показана зависимость коэффициента распыления от энергии связи в модели 20 атомов при использовании начальной функции распределе-

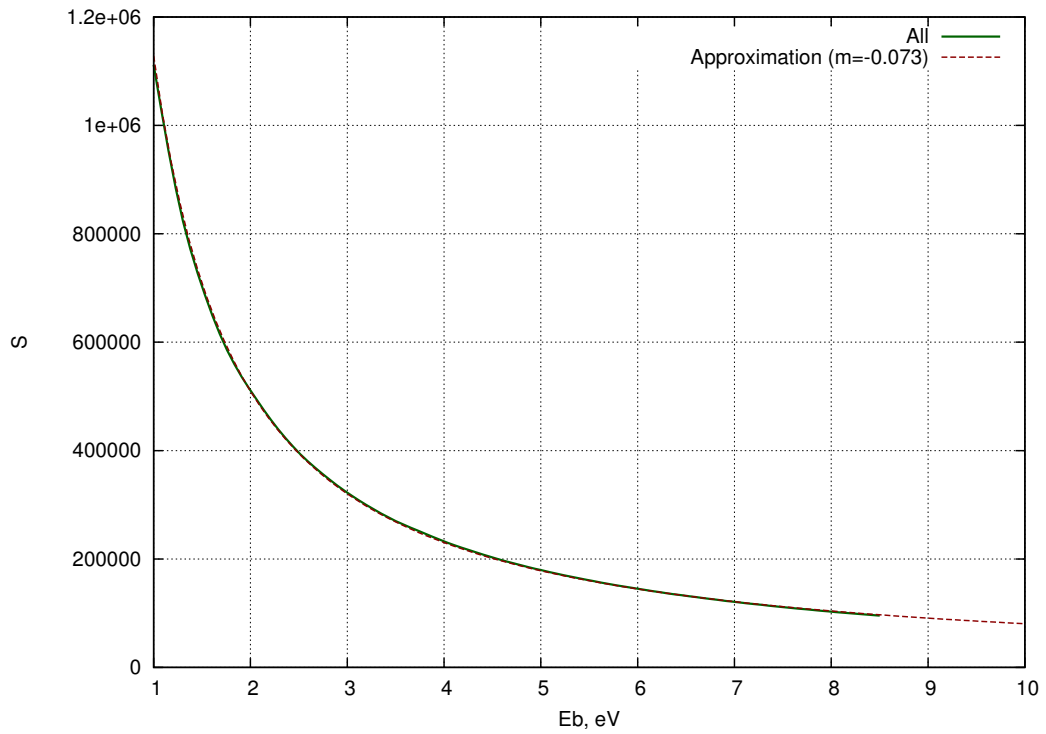


Рис. 3.8. Зависимость коэффициента распыления Y от энергии связи E_b в модели 20 атомов

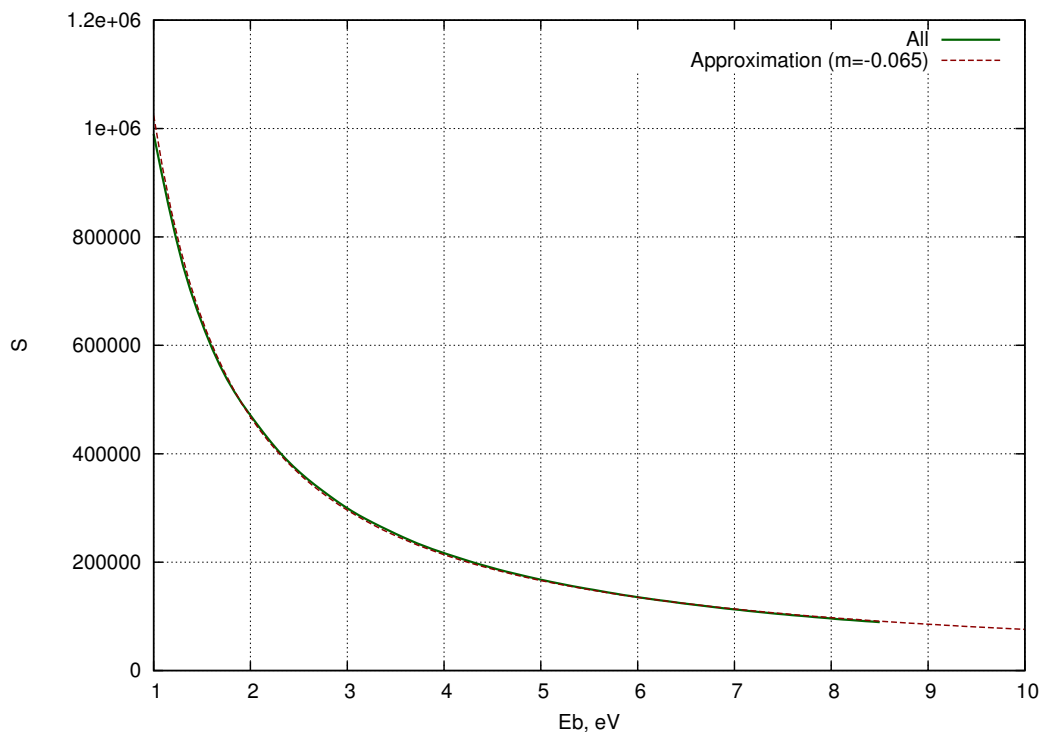


Рис. 3.9. Зависимость коэффициента распыления Y от энергии связи E_b в модели 4 атомов

Модель	20 атомов		4 атомов	
	первый метод	второй метод	первый метод	второй метод
Все атомы	-0.086	-0.073	-0.073	-0.065
Собственные	0.055	0.076	0.073	0.067
Фокусированные	-0.155	-0.148	-0.167	-0.147
Перефокусированные	-0.452	-0.389	-0.631	-0.507

Таблица 3.1. Значения параметра m_{eff} при $m = 0$ для разных групп атомов в моделях 20 и 4 атомов, вычисленные по первому (слева) и по второму (справа) методу.

ния (1.12) с $m = 0$. Для сравнения та же зависимость была рассчитана в модели 4 атомов, которая ранее использовалась в [17] (рис. 3.9).

Для определения m_{eff} использовалось два метода. В первом методе, который также использовал В.И. Шульга в [126], вблизи значения энергии связи для никеля $E_b = 4.435$ эВ величина m_{eff} вычислялась по значениям коэффициента распыления Y_1 и Y_2 при энергиях $E_{b1} = 0.95E_b$ и $E_{b2} = 1.05E_b$ по формуле

$$1 - 2m_{\text{eff}} = \frac{\ln(Y_1/Y_2)}{\ln(E_{b2}/E_{b1})}. \quad (3.4)$$

Во втором методе m_{eff} вычислялось по N точкам с использованием метода наименьших квадратов для линейной зависимости вида (3.2) по формуле

$$-(1 - 2m_{\text{eff}}) = \frac{N \sum_{i=1}^N x_i y_i - \sum_{i=1}^N x_i \sum_{i=1}^N y_i}{N \sum_{i=1}^N x_i^2 - \left(\sum_{i=1}^N x_i \right)^2}, \quad (3.5)$$

где $x = \ln E_b$, $y = \ln Y$.

Параметр m_{eff} был рассчитан при $m = 0$ не только для всех распыленных атомов, но и отдельно для каждой группы: собственных, фокусированных и перефокусированных атомов. Результаты расчетов приведены в табл. 3.1.

Интересно отметить, что сдвиг значения m_{eff} относительно нуля в случае собственных атомов происходит в сторону положительных значений, а во всех

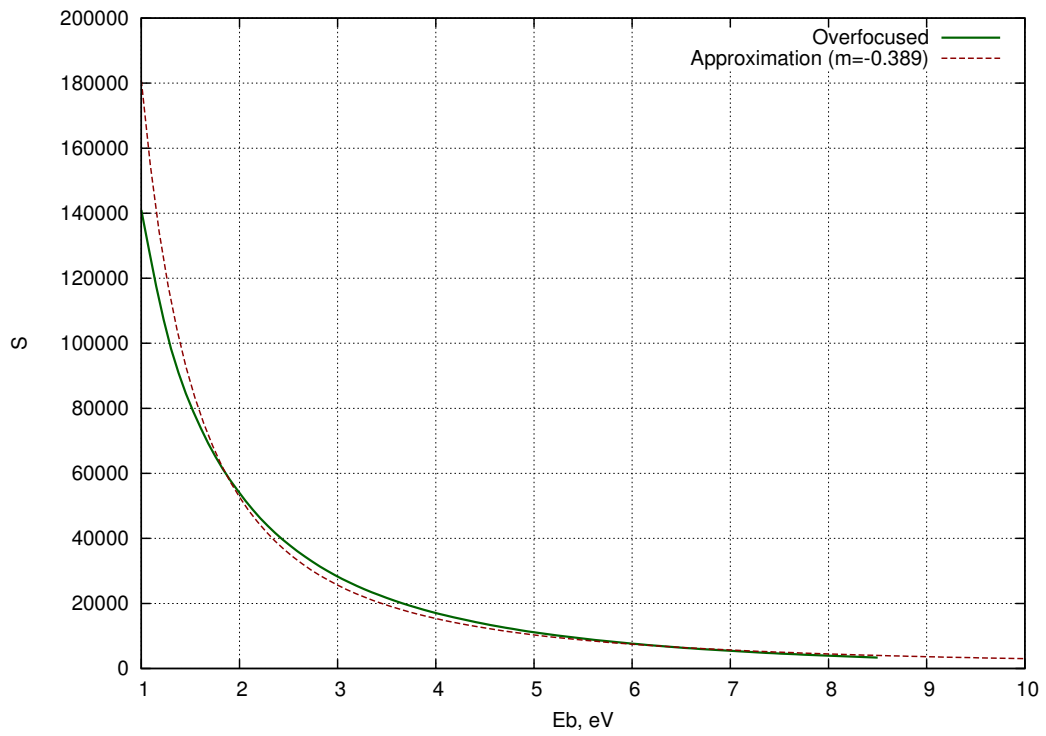


Рис. 3.10. Зависимость коэффициента распыления Y перефокусированных атомов от энергии связи E_b в модели 20 атомов

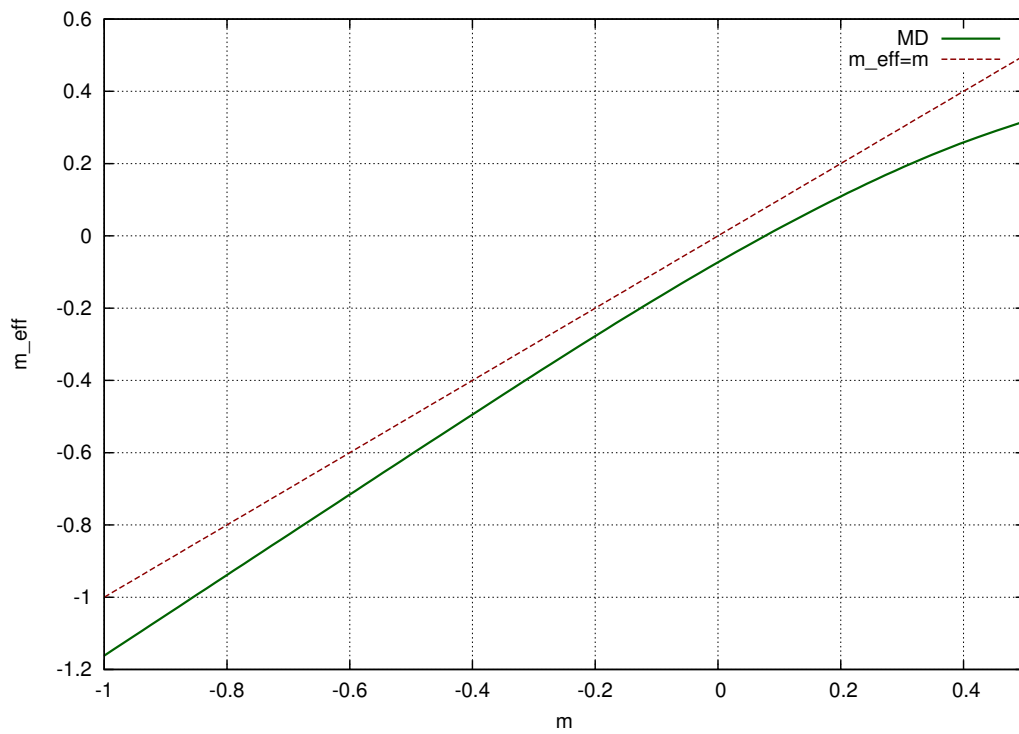


Рис. 3.11. Зависимость m_{eff} от m для всех атомов, в модели 20 атомов

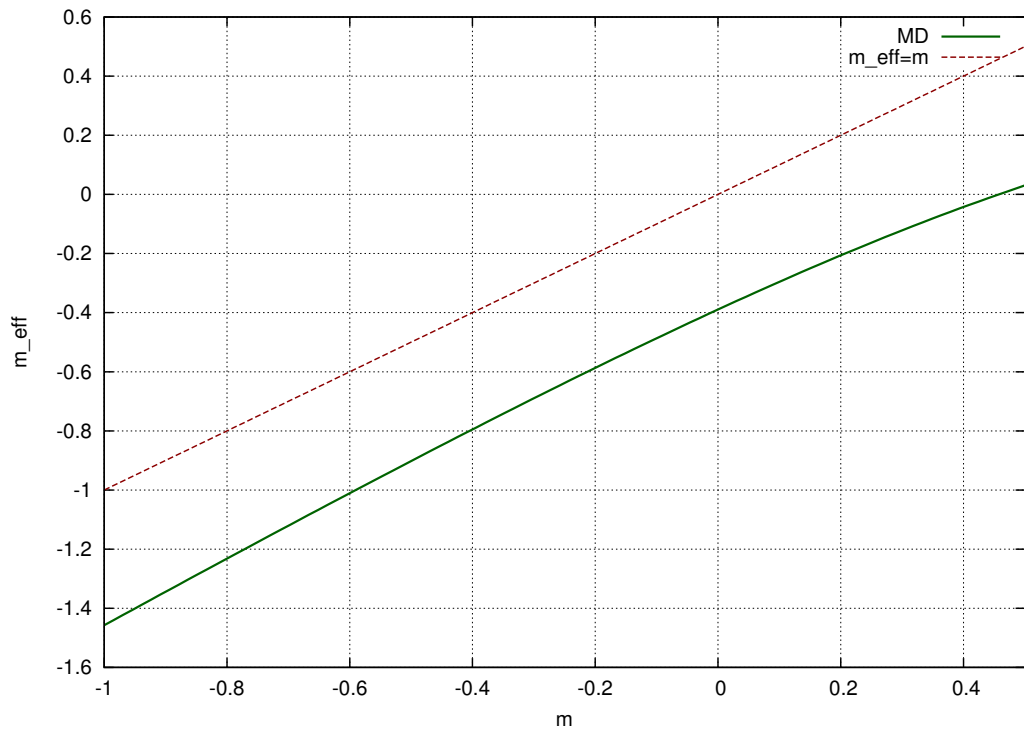


Рис. 3.12. Зависимость m_{eff} от m для перефокусированных атомов, в модели 20 атомов

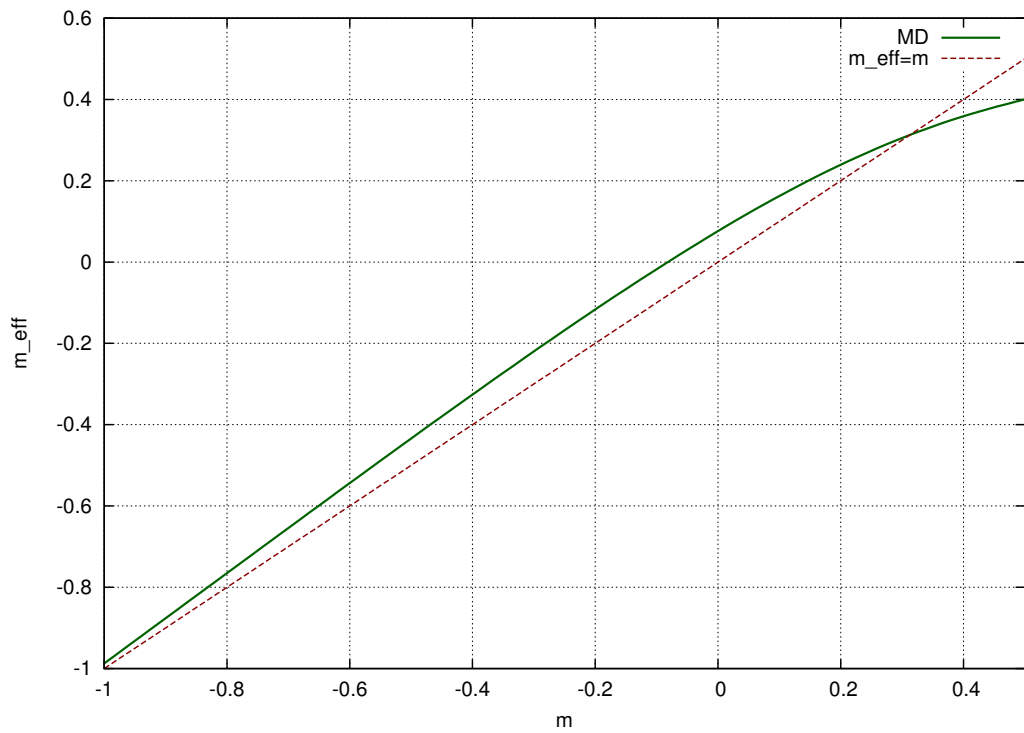


Рис. 3.13. Зависимость m_{eff} от m для собственных атомов, в модели 20 атомов

остальных случаях — в сторону отрицательных значений. При этом противоположные величины сдвигов m_{eff} собственных и всех атомов практически компенсируют друг друга.

Значения, рассчитанные с помощью первого и второго метода, различны. Это может говорить о том, что применение второго метода более оправдано, по крайней мере, в случае всех атомов и фокусированных атомов, так как аппроксимирующая кривая идеально ложится на точки. Однако, для перефокусированных атомов использование второго метода является превышением точности, и возникает вопрос о корректном определении параметра m_{eff} для перефокусированных атомов, так как соответствующая ему кривая аппроксимирует зависимость не настолько хорошо (рис. 3.10). Объяснением может служить то, что самое большое по модулю значение m_{eff} для перефокусированных атомов не может являться приемлемым способом описания зависимости коэффициента распыления от энергии связи.

Тем не менее, второй метод был использован для расчета m_{eff} при значениях m от -1 до 0.5 . Результаты для всех, перефокусированных и собственных атомов представлены на рис. 3.11, 3.12 и 3.13. Хорошо видно, что из-за сильного рассеяния перефокусированных атомов при эмиссии происходит более сильное по сравнению со всеми атомами отклонение от теоретического равенства $m_{\text{eff}} = m$. Для собственных атомов существует “равновесное” значение $m \approx 0.3$, для которого $m_{\text{eff}} = m$.

3.3. Перефокусировка при различных энергиях связи и магнитном фазовом переходе

На рис. 3.14 показаны графики распределений эмитированных атомов по энергии E , наблюдаемых в интервале углов φ [76.5° ; 79.5°] и θ [49.9° ; 51.5°], при значениях энергии связи от 4 до 5 эВ. Из графика видно, что при увеличении энергии связи максимумы фокусированных и перефокусированных по азиму-

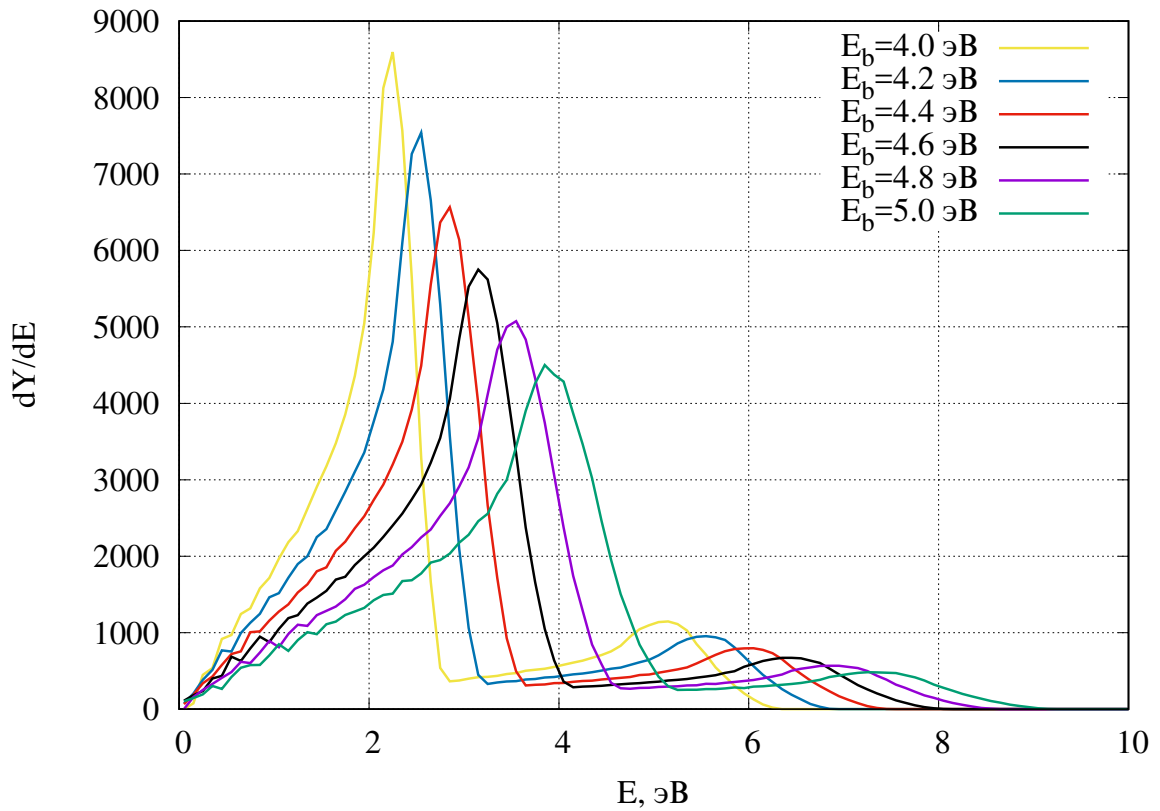


Рис. 3.14. Распределение эмитированных атомов по энергии E , наблюдаемых в интервале углов φ $[76.5^\circ; 79.5^\circ]$ и θ $[49.9^\circ; 51.5^\circ]$, при значениях энергии связи от 4 до 5 эВ

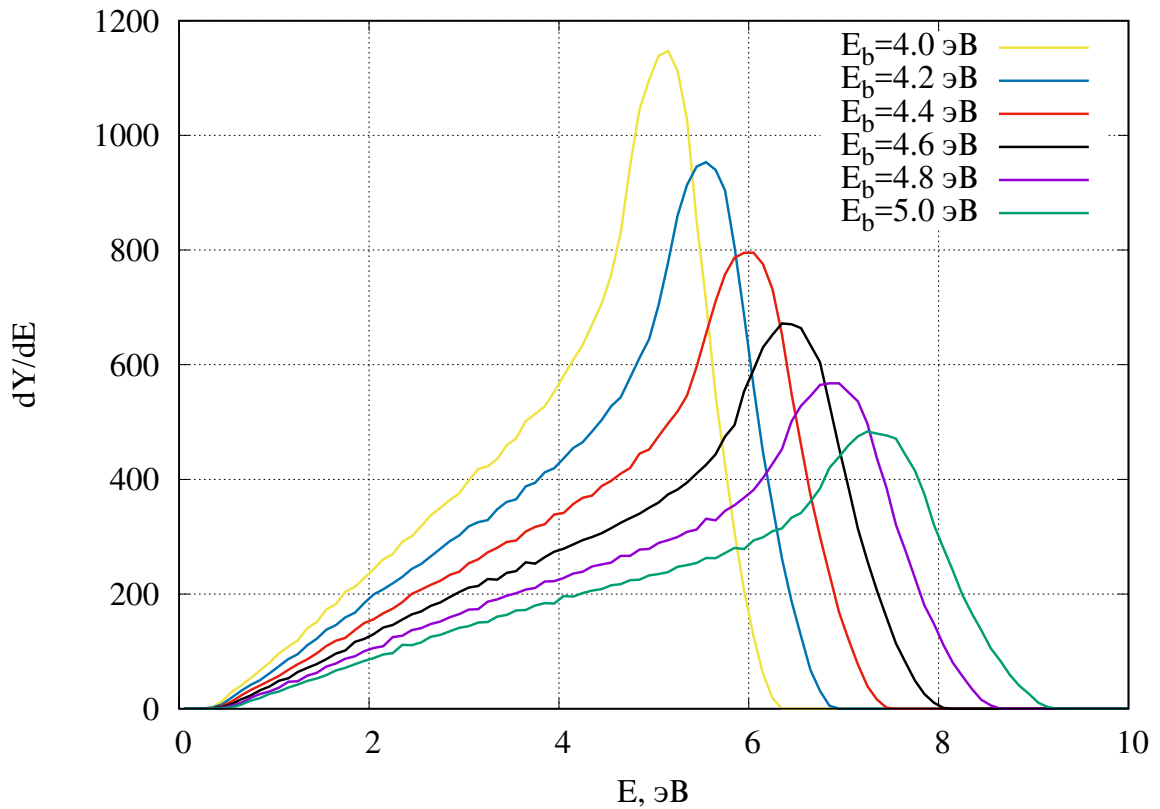


Рис. 3.15. Распределение перефокусированных атомов по энергии E , наблюдаемых в интервале углов φ $[76.5^\circ; 79.5^\circ]$ и θ $[49.9^\circ; 51.5^\circ]$, при значениях энергии связи от 4 до 5 эВ

тальному углу атомов смещаются в сторону более высоких энергий, а полное число атомов, наблюдаемых в указанных интервалах углов

$$N \propto \int_0^{\infty} \frac{dY}{dE} dE \quad (3.6)$$

уменьшается — поскольку уменьшается количество атомов, которые преодолевают плоский потенциальный барьер.

На рис. 3.15 показаны графики распределений перефокусированных атомов по энергии E , наблюдаемых в тех же интервалах углов θ и φ . Обратим внимание, что при изменении энергии связи от 4 до 4.4 эВ ($\Delta E_b = 0.4$ эВ) максимум распределения сдвигается на $\Delta E_{\max} \approx 1$ эВ. То же самое наблюдается для других вариантов изменения энергии связи как для фокусированных, так и для перефокусированных атомов (рис. 3.16). Таким образом приблизительный сдвиг максимума энергетического распределения при изменении энергии связи можно оценить по формуле $\Delta E_{\max} \approx 2\Delta E_b$.

В работе мы изучили изменение распределения эмитированных атомов при фазовом переходе Ni из парамагнитного состояния (p) в ферромагнитное (f). Напомним, что при данном переходе, во-первых, возникает добавка $\Delta V_f(r)$ к потенциалу взаимодействия атомов из-за наличия спинового обменного взаимодействия (рассчитана в [120]), во-вторых, на 5% увеличивается энергия связи (см. [121]).

На основе модели 20 атомов (далее в этом разделе — **p-p модель**) с потенциалом взаимодействия $V(r)$ и энергией связи $E_b^{(p)} = 4.435$ эВ мы создали три модифицированных модели:

1. **p-f**: потенциал взаимодействия $V(r)$, энергия связи $E_b^{(f)} = 1.05E_b^{(p)}$;
2. **f-p**: потенциал взаимодействия $V(r) + \Delta V_f(r)$, энергия связи $E_b^{(p)}$;
3. **f-f**: потенциал взаимодействия $V(r) + \Delta V_f(r)$, энергия связи $E_b^{(f)}$.

Добавка $\Delta V_f(r)$ рассчитывалась по формуле (1.37).

Модели “промежуточных” состояний p-f и f-p были введены для того, что-

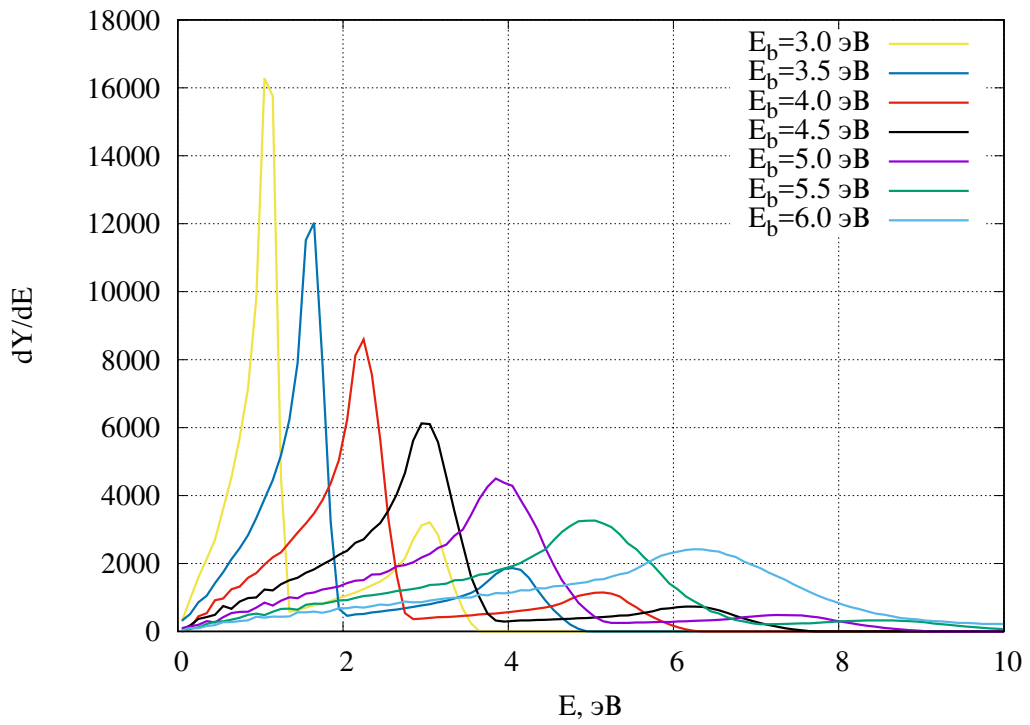


Рис. 3.16. Распределение эмитированных атомов по энергии E , наблюдаемых в интервале углов φ $[76.5^\circ; 79.5^\circ]$ и θ $[49.9^\circ; 51.5^\circ]$, при значениях энергии связи от 3 до 6 эВ

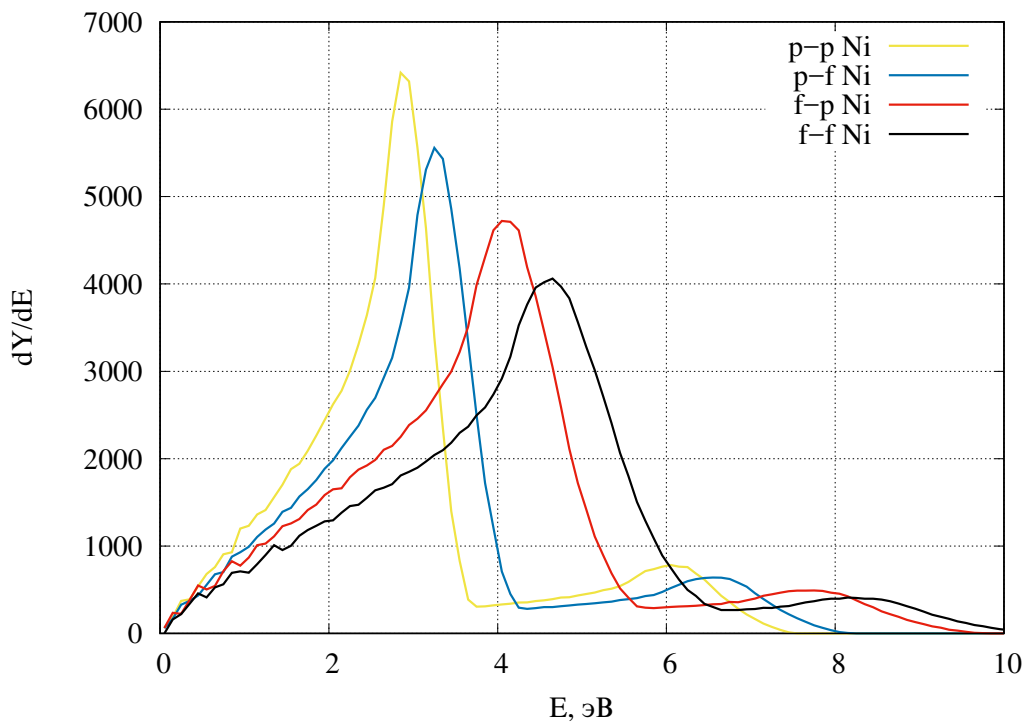


Рис. 3.17. Распределение эмитированных атомов по энергии E , наблюдаемых в интервале углов φ $[76.5^\circ; 79.5^\circ]$ и θ $[49.9^\circ; 51.5^\circ]$, для различных параметров потенциала взаимодействия и энергии связи, соответствующие ферромагнитному и парамагнитному никелю

бы определить вклад каждого из двух факторов в сдвиг максимума распределения эмитированных атомов по энергии E :

$$\Delta E_{\max} = \Delta E_{\max}^{(\text{pot})} + \Delta E_{\max}^{(\text{eb})} \quad (3.7)$$

На рис. 3.17 изображены графики распределений эмитированных атомов по энергии E , наблюдаемых в интервале углов φ $[76.5^\circ; 79.5^\circ]$ и θ $[49.9^\circ; 51.5^\circ]$, рассчитанных в рамках моделей p-p, p-f, f-p и f-f. Оба эффекта (изменение потенциала взаимодействия и увеличение энергии связи) дают вклад в одну сторону. Для фокусированных атомов $\Delta E_{\max}^{(\text{eb})} \approx 0.4$ эВ, $\Delta E_{\max}^{(\text{pot})} \approx 1.6$ эВ. Таким образом, при переходе из парамагнитного состояния в ферромагнитное суммарный сдвиг максимума фокусированных атомов составляет порядка 2 эВ. Аналогичный сдвиг имеет место для перефокусированных атомов.

Факт сдвига максимума на 2 эВ при увеличении энергии связи никеля в f-состоянии приблизительно на 0.2 эВ свидетельствует о высокой чувствительности фокусированных и перефокусированных атомов к магнитному состоянию материала.

При p→f переходе количество распыленных атомов уменьшается. Были рассчитаны уменьшения для всех атомов и отдельно для фокусированных и перефокусированных атомов, значения представлены в табл. 3.2. Из расчетов следует, что группы фокусированных и перефокусированных атомов более чувствительны, чем все распыленные атомы в целом, при изменении магнитного состояния мишени.

По сравнению с p-p моделью в модели f-p с измененным потенциалом фокусированные и перефокусированные атомы дают вклад в распыление на 2.62% и 0.28% меньше соответственно. В модели p-f, где только увеличивается энергия связи, фокусированные и перефокусированные атомы также уменьшают свой вклад в распыление на 0.35% и 0.25% соответственно. Следовательно, оба фактора изменения дают вклад в одну сторону (в сторону уменьшения). Это можно объяснить тем, что при переходе потенциал взаимодействия атом-атом стано-

Фактор изменения	Все	Фокусированные	Перефокусированные
<i>Добавка ΔV_f к потенциалу</i>	4.49%	9.04%	8.44%
<i>Увеличение энергии связи</i>	5.46%	6.07%	8.91%

Таблица 3.2. Уменьшение количества распыленных атомов при $p \rightarrow f$ переходе

вится менее жестким, а энергия связи увеличивается, что затрудняет вылет этих групп атомов. Напротив, вклад “собственных” атомов по азимутальному углу увеличивается на 2.90% (0.60%) в модели $f-p$ ($p-f$).

Выводы к главе 3

Изменение параметров бомбардируемой ионами мишени, таких как атомный номер Z и энергия связи, приводит к изменению угловых и энергетических распределений атомов, распыленных с поверхности грани (001) монокристалла. При увеличении Z в дифференциальном распределении по энергии для фиксированных интервалов полярного и азимутального углов при низких энергиях (до 10 эВ) отдельные максимумы для фокусированных и перефокусированных атомов сдвигаются в сторону более низких энергий, при энергиях от 40 до 100 эВ высокоэнергетический максимум фокусированных атомов сдвигается в сторону более высоких энергий. Между двумя низкоэнергетическими максимумами и одним высокоэнергетическим находится зона “запрещенных” энергий, которая расширяется с увеличением Z . При увеличении атомного номера вещества мишени также сдвигаются максимумы 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.

В зависимости коэффициента распыления от энергии связи был рассчитан

параметр m_{eff} , 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. Его уменьшение в результате эмиссии показывает определяющую роль надповерхностного рассеяния при распылении атома с поверхности. Наиболее сильно параметр m уменьшается для группы перефокусированных атомов, сдвиг в сторону отрицательных значений (при $m = 0$) в 2.5–3 раза больше, чем сдвиг для фокусированных атомов.

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, приведенные в главе, докладывались и обсуждались на Международной конференции “Взаимодействие ионов с поверхностью” (Москва, 2017); на Международных Тулиновских конференциях “Физика взаимодействия заряженных частиц с кристаллами” (Москва, 2015–2017, 2019); на Международной школе-конференции студентов, аспирантов и молодых ученых “Биомедицина, материалы и технологии XXI века” (Казань, 2015).

Глава 4

Распределения распыленных атомов в МД-модели с падением ионов при 0 К и 300 К

4.1. Пятна Венера и полярное угловое распределение

Предложенная нами модель 20 атомов, как и модель 4 атомов, сравнительно проста в использовании, при этом описывает особенности распределений распыленных атомов, получаемых в эксперименте, например, эффект немонотонного сдвига максимума углового распределения распыленных атомов с увеличением энергии наблюдения. Однако в модели отсутствует падение ионов на поверхность и формирование каскада столкновений. Поэтому представляется важным сопоставить результаты, полученные в модели 20 атомов, с результатами полномасштабного МД-моделирования с падением ионов.

Мы использовали модифицированную модель Г. В. Корнича, описанную в разд. 1.7, в рамках которой проводилась бомбардировка монокристаллического блока (001) Ni из 4032 атомов около 10^6 ионов Ag с энергией 200 эВ при двух температурах: 0 К и 300 К. Бомбардировка поверхности производилась по точкам прицеливания в элементарной треугольной области (рис. 4.1). Внутри области точки выбирались случайным образом с использованием равномерного распределения. При обработке результатов массив данных симметризуется, то есть углы φ и φ_0 преобразуются 7 раз согласно симметрии поверхности, таким образом получается 8 распыленных атомов вместо одного. Каждый из этих атомов учитывался с весом $w = 1/8$.

“Начальные” энергия и углы $(E_0; \theta_0; \varphi_0)$ считывались на высоте $z_1 = 0.3 \text{ \AA}$ над усредненной поверхностью кристалла, конечные $(E; \theta; \varphi)$ — при удалении на $z_2 = 10 \text{ \AA}$ от поверхности. Атом считался перефокусированным, если он на большом удалении от поверхности наблюдается в направлении φ , которое на-

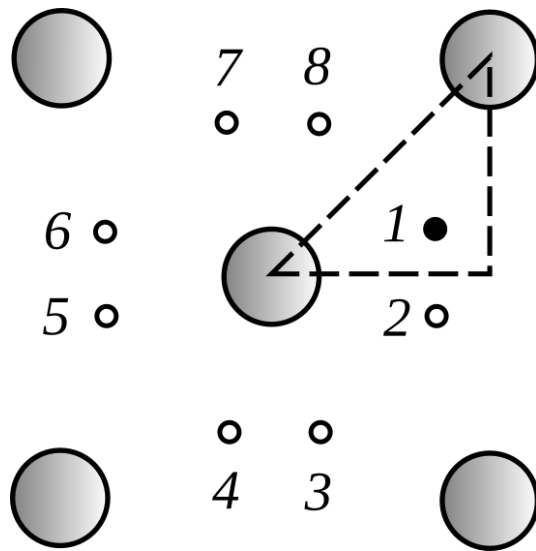


Рис. 4.1. Фрагмент поверхности грани (001) монокристаллического блока.

Пунктиром показана область падения ионов, 1 — одна из точек прицеливания, симметричные ей точки обозначены цифрами 2–8

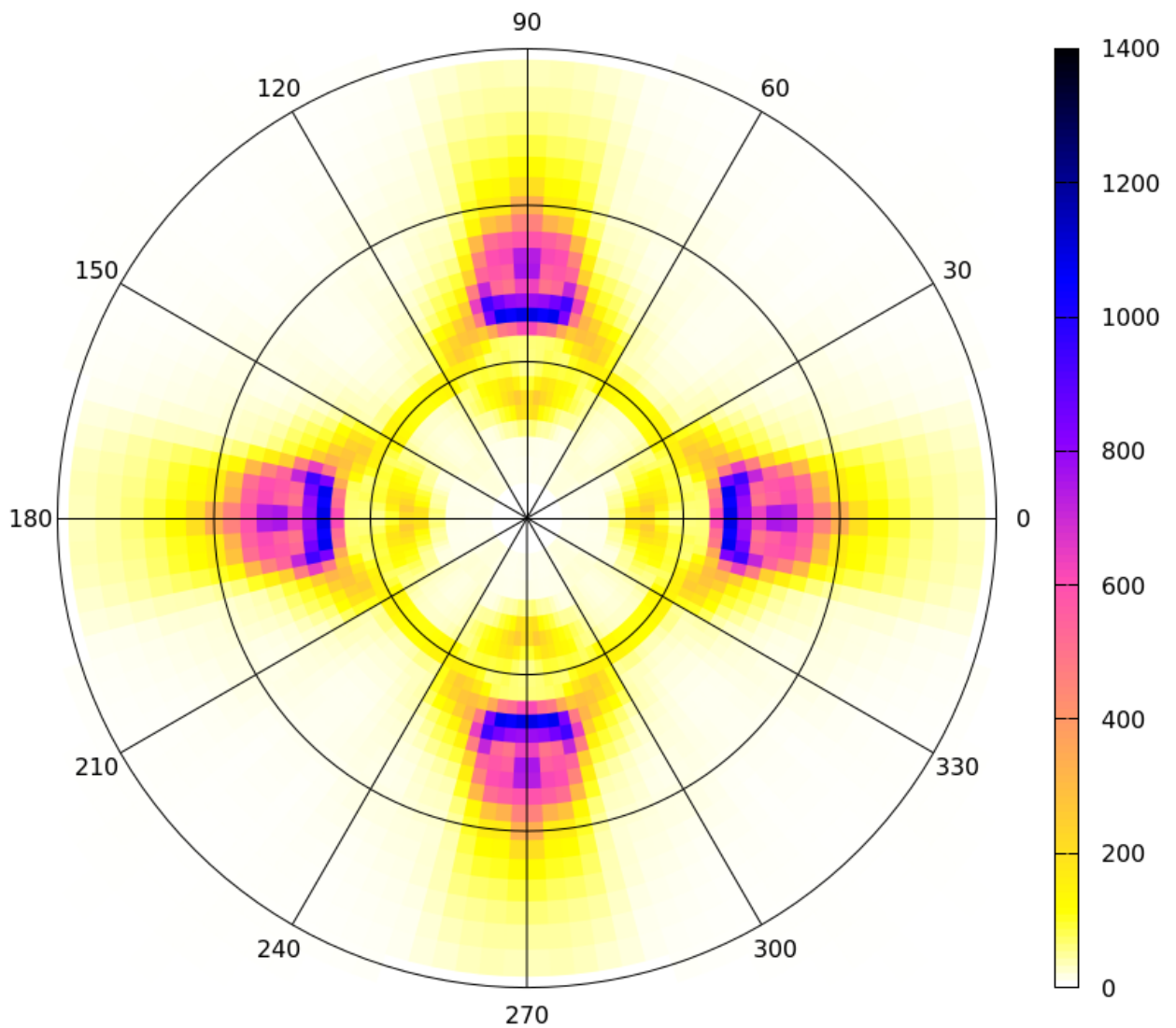


Рис. 4.2. Пятна Венеры, полученные при распылении поверхности грани (001) Ni ионами Ag с энергией 200 эВ при 0 К. Количество падающих ионов $\sim 10^6$

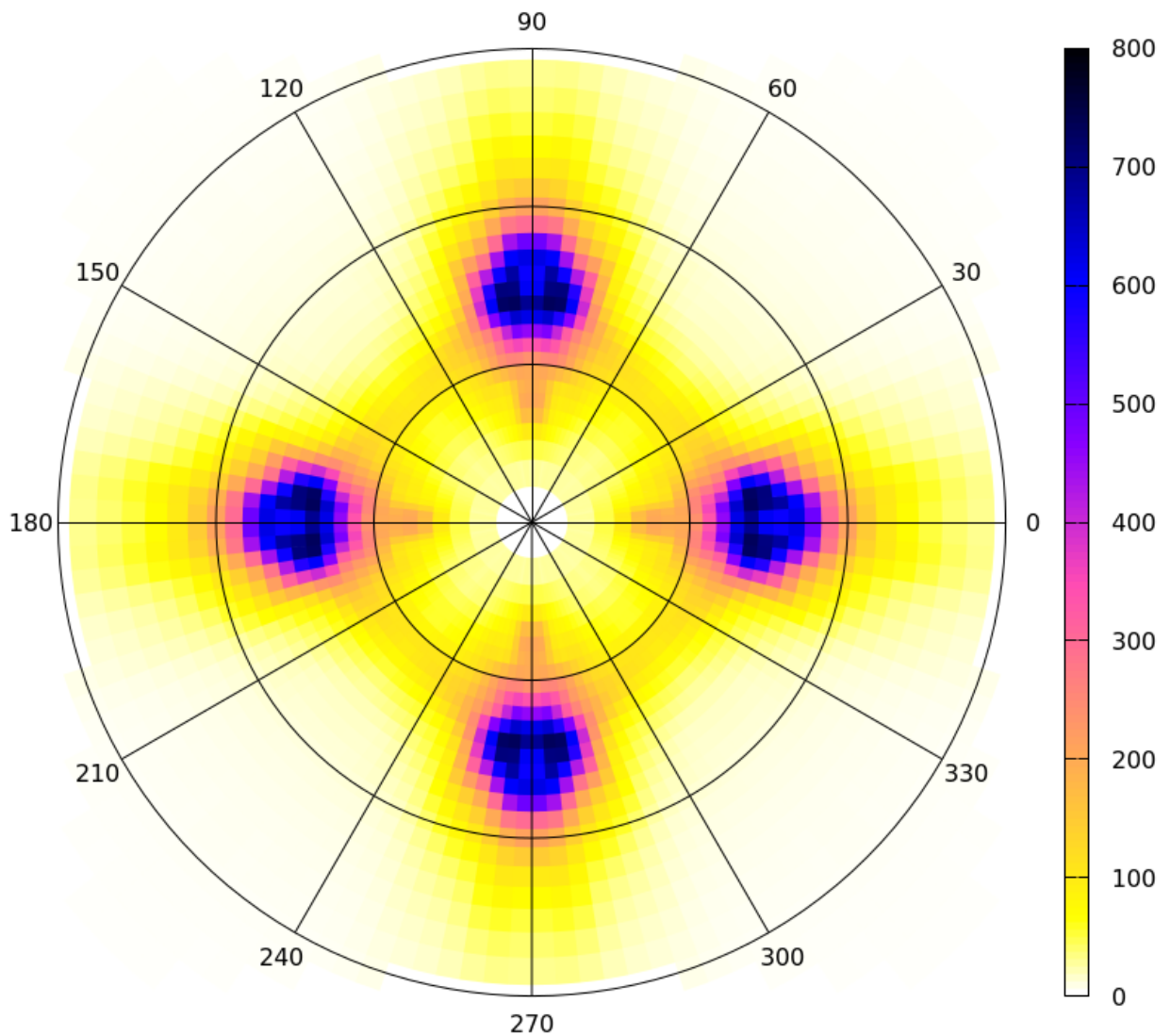


Рис. 4.3. Пятна Венеры, полученные при распылении поверхности грани (001) Ni ионами Ar с энергией 200 эВ при 300 К. Количество падающих ионов $\sim 10^6$

ходится с другой стороны от центра линзы, чем направление движения вблизи поверхности, задаваемое углом φ_0 .

В данной модели коэффициент распыления атомов Ni при 0 К составил 0.930 ат/ион, при 300 К 0.911 ат/ион.

На рис. 4.2 и 4.3 показаны пятна Венеры в угловых распределениях распыленных атомов в полярных координатах $(\rho; \varphi)$, где $\rho \propto \tan \theta$ для абсолютного нуля (0 К) и для комнатной температуры (300 К). Пятна Венеры при эмиссии с грани (001) наблюдаются в направлении полярного угла $\sim 45^\circ$, соответствующего направлению плотной упаковки $\langle 011 \rangle$ в кристаллической решетке. Необходи-

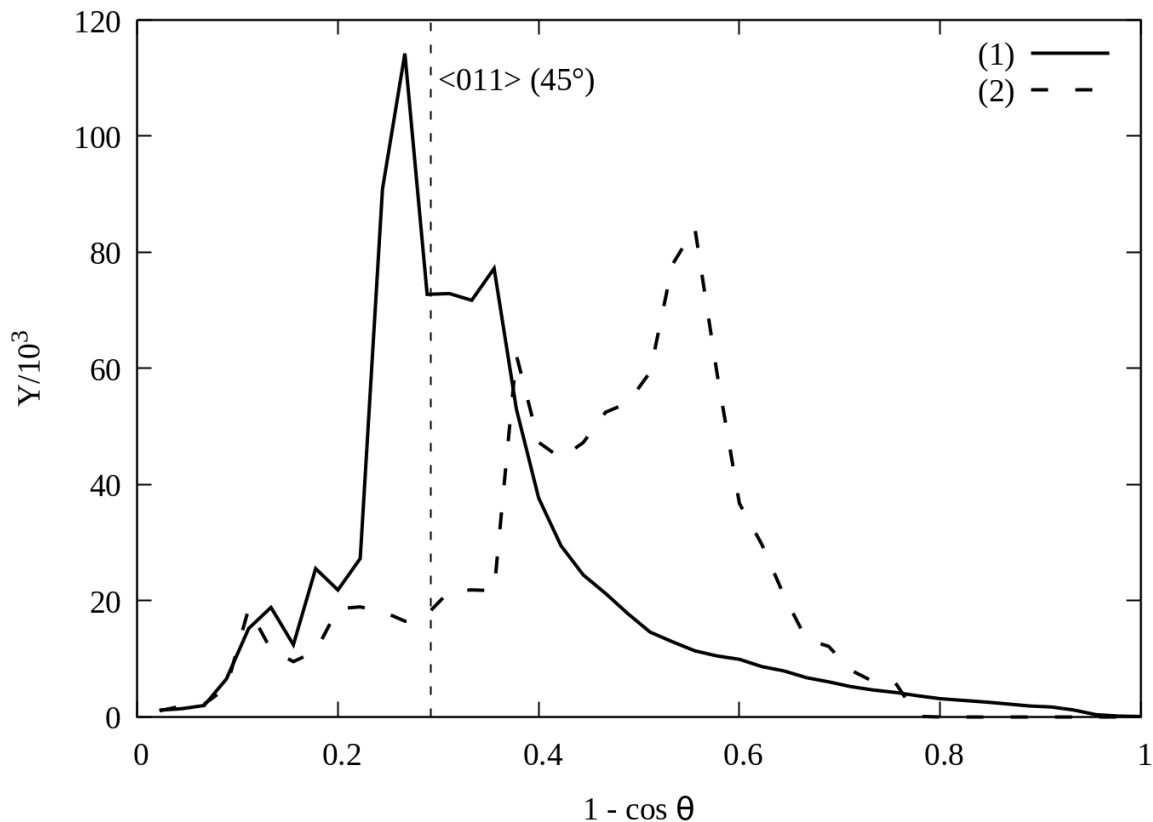


Рис. 4.4. Распределения атомов, распыленных с поверхности (001) Ni в рамках полномасштабной МД-модели, по $1 - \cos \theta$ (1) и $1 - \cos \theta_0$ (2). Температура мишени 0 К

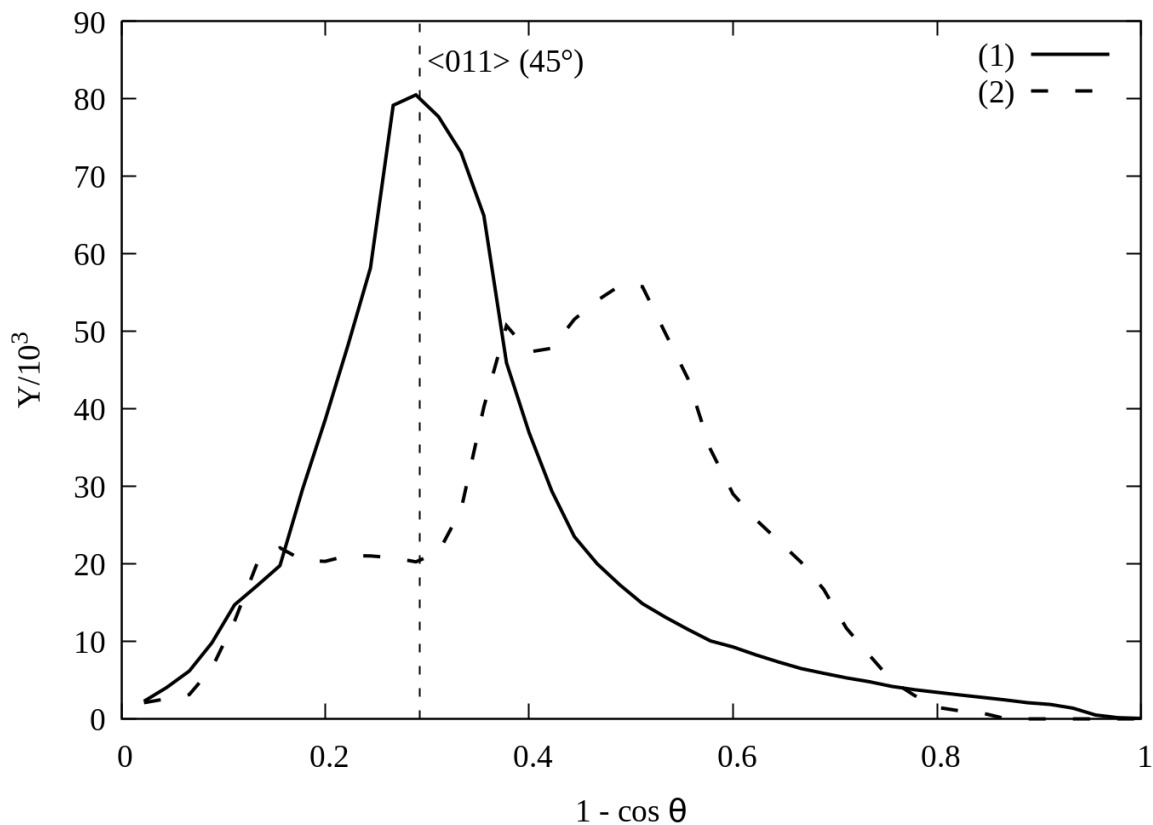


Рис. 4.5. Распределения атомов, распыленных с поверхности (001) Ni в рамках полномасштабной МД-модели, по $1 - \cos \theta$ (1) и $1 - \cos \theta_0$ (2). Температура мишени 300 К

димом отметить, что при комнатной температуре хотя и наблюдается меньший интегральный коэффициент распыления, однако пятна Венера более ярко выражены.

На рис. 4.4 и 4.5 показаны распределения распыленных атомов по $1 - \cos \theta$ (θ — полярный угол наблюдения) и по $1 - \cos \theta_0$ (θ_0 — полярный угол при вылете с поверхности). Хотя в конечном распределении (по $1 - \cos \theta$) наблюдается максимум около $\langle 011 \rangle$ в соответствии с экспериментальными данными [40], в начальном распределении (по $1 - \cos \theta_0$) этот максимум отсутствует.

Таким образом, можно заключить, что формирование пятен Венера происходит не из-за процессов в каскаде столкновений (фокусонного механизма или механизма Лемана-Зигмунда), а из-за сильного перераспределения атомов по углам в процессе вылета с поверхности. При этом начальное распределение сдвигается ближе к нормали к поверхности так, что в наблюдаемом распределении появляется максимум в направлении $\langle 011 \rangle$. То, что поверхностные механизмы ответственны за формирование наблюдаемого распределения атомов по полярному углу, еще раз убеждает в адекватности модели 20 атомов, которая использовалась в работе.

На рис. 4.6 показаны угловые распределения распыленных атомов в рамках модели 20 атомов, использовалась начальная функция распределения Томпсона-Зигмунда $\cos \theta_0 / E_0^2$ при эмиссии с поверхности.

Начальное распределение распыленных атомов (по $1 - \cos \theta_0$) отличается по форме от распределения Томпсона-Зигмунда, в нем преобладают атомы, которые вылетали преимущественно в направлении нормали, а вклад атомов с большими начальными углами θ_0 снижен. Это связано с тем, что при эмиссии не все атомы распыляются, а только те, которые преодолевают плоский потенциальный барьер. Атомы, вылетающие близко к поверхности, подлетают к барьеру под углом θ_i , который больше критического угла, определяемого по формуле (2.1), и отражаются вниз, даже если их энергия была достаточна для преодоления барьера.

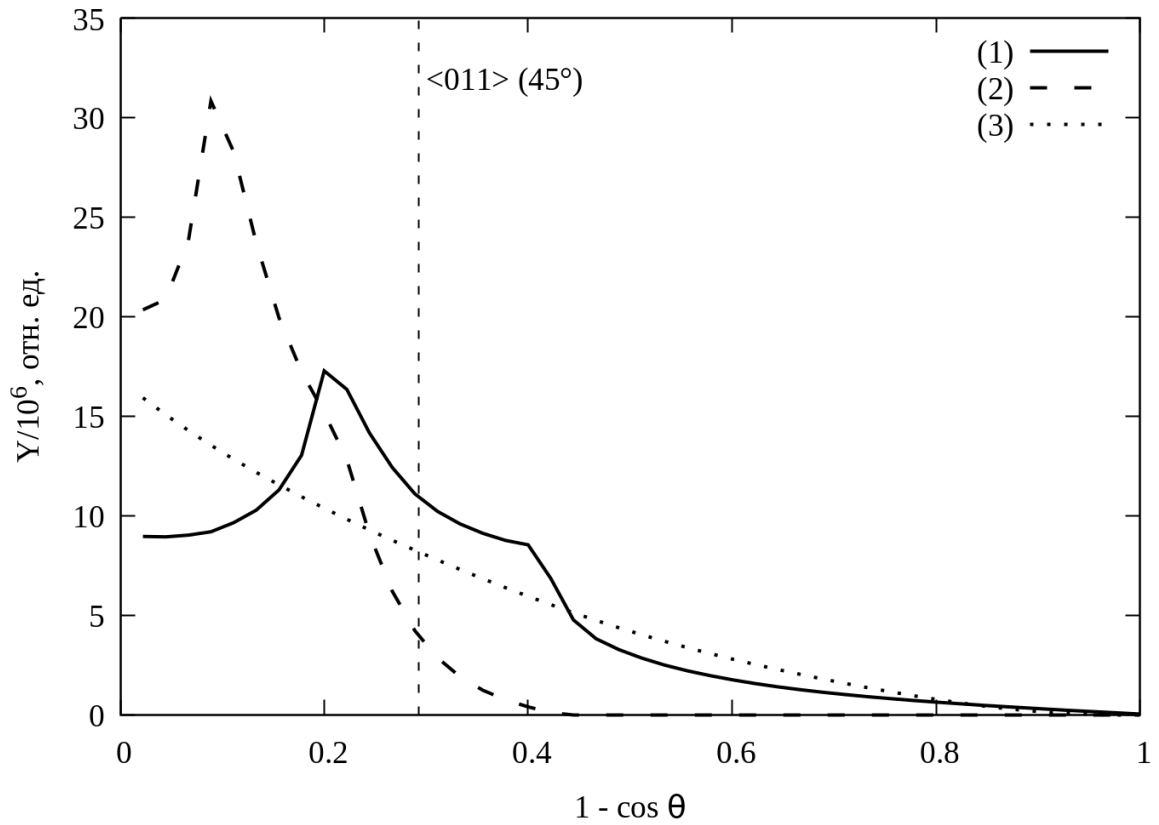


Рис. 4.6. Распределения атомов, распыленных с поверхности (001) Ni в рамках модели 20 атомов, по $1 - \cos \theta$ (1), $1 - \cos \theta_i$ (2) и $1 - \cos \theta_0$ (3). Начальная функция распределения $\cos \theta_0 / E_0^2$

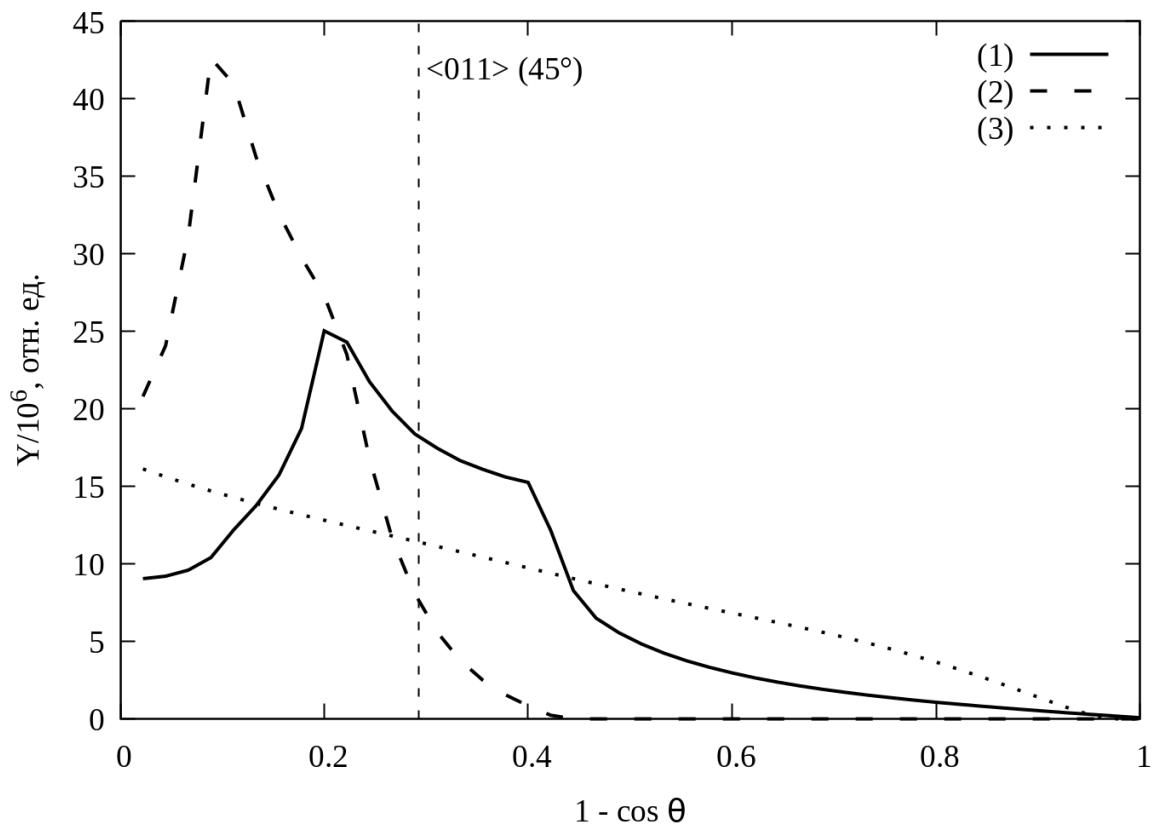


Рис. 4.7. Распределения атомов, распыленных с поверхности (001) Ni в рамках модели 20 атомов, по $1 - \cos \theta$ (1), $1 - \cos \theta_i$ (2) и $1 - \cos \theta_0$ (3). Начальная функция распределения $1/E_0^2$

За счет эффекта блокировки начальное распределение трансформируется в распределение атомов под барьером (по $1 - \cos \theta_i$), которое сильно сдвинуто в направлении к нормали. Хотя значительное количество атомов вылетало в направлении, задаваемом полярным углом $\theta_0 = 45^\circ$, однако в этом направлении максимум отсутствует. Из-за преломления на плоском потенциальном барьере это распределение впоследствии трансформируется в наблюдаемое распределение (по $1 - \cos \theta$). Аналогичная ситуация имеет место и при использовании изотропной начальной функции распределения $1/E_0^2$ (рис. 4.7).

На рис. 4.8 показаны полярные угловые распределения распыленных атомов с разрешением по энергии наблюдения E в полномасштабной МД-модели (температура мишени 300 К). При энергии E (2.5 ± 0.5) эВ максимум полярного углового распределения наблюдается на угле 53° . С ростом энергии наблюдения максимум смещается в направлении к нормали до положения порядка 43° (при энергии E (9.0 ± 1.0) эВ). При дальнейшем увеличении энергии максимум смещается в противоположную сторону от нормали, при энергии E (25 ± 5) эВ он наблюдается при угле 46° . Следовательно, в нашей полномасштабной модели, как и в модели 20 атомов, наблюдается эффект немонотонного сдвига максимума полярного углового распределения распыленных атомов с увеличением энергии наблюдения, обнаруженный экспериментально [40].

Данный эффект наглядно можно продемонстрировать при использовании распределения распыленных атомов одновременно по E и $1 - \cos \theta$ (рис. 4.9). Отметим, что представленное распределение схоже с аналогичным распределением, рассчитанным в модели 20 атомов (рис. 2.4 на стр. 53) по структуре: так же наблюдается хребет и область тени.

Действительно, фиксация интервала энергий наблюдения означает выбор соответствующего “окна” по оси энергий, которое перемещается вправо с увеличением энергии. В такой ситуации максимум полярного углового распределения будет наблюдаться вблизи хребта распределения, изображенного на рис. 4.9. Отчетливо видно, что вначале хребет располагается в области больших полярных

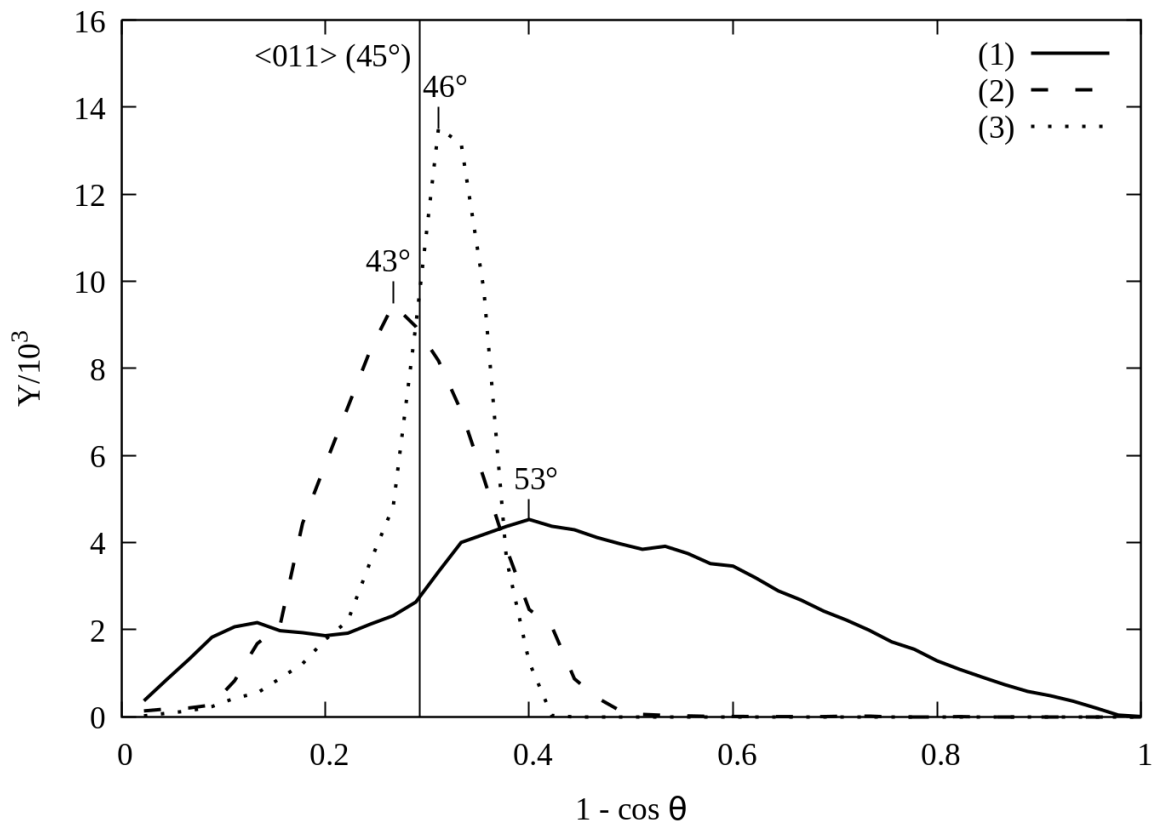


Рис. 4.8. Распределения распыленных с грани (001) Ni атомов по $1 - \cos \theta$, в полномасштабной МД-модели, для энергии наблюдения E (2.5 ± 0.5) эВ (1), (9.0 ± 1.0) эВ (2) и (25 ± 5) эВ (3). Температура мишени 300 К

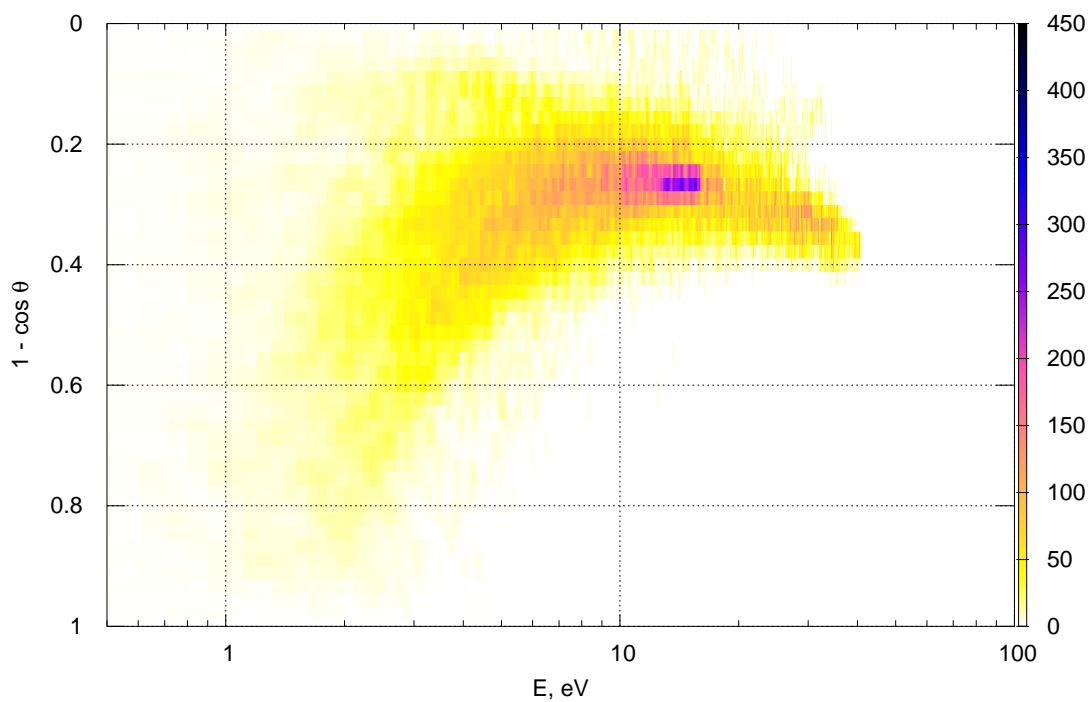


Рис. 4.9. Распределение атомов, распыленных с поверхности (001) Ni, в полномасштабной МД-модели, по E и $1 - \cos \theta$ для всех углов φ . Температура мишени 300 К

углов, затем, при росте энергий, смещается сначала к нормали, потом от нее. Таким образом, немонотонный сдвиг максимума полярного углового распределения распыленных атомов при увеличении энергии наблюдения получает четкое и понятное объяснение при использовании двумерного распределения атомов по E и $1 - \cos \theta$.

4.2. Фокусировка по азимутальному углу при 0 К и 300 К

На рис. 4.11 и 4.10 показаны распределения распыленных атомов по азимутальному углу, полученные в рамках полномасштабной МД-модели для двух температур: 0 К и 300 К соответственно. В отличие от модели 20 атомов (см. рис. 2.3 на стр. 52), распределение по начальному азимутальному углу φ_0 не является изотропным, поскольку уже сформировался максимум на угле 90° . В дальнейшем, в процессе вылета этот максимум сужается и наблюдается в распределении по азимутальному углу наблюдения φ , также в направлении на центр линзы ($\varphi = 90^\circ$).

Анизотропию распределения по φ_0 можно объяснить тем, что начальные параметры $(E_0; \theta_0; \varphi_0)$ в полномасштабной МД-модели считываются при пересечении плоскости на высоте $z_1 = 0.3 \text{ \AA}$ над усредненной поверхностью кристалла, то есть тогда, когда атом уже получил начальный импульс от атомов каскада и начался процесс вылета. Из-за этого мы наблюдаем процесс фокусировки не с самого начала, однако даже в таком случае возможно разделить атомы на группы фокусированных и перефокусированных атомов, поскольку z_1 на порядок меньше постоянной решетки.

На рис. 4.12 показаны распределения распыленных атомов по начальному азимутальному углу φ_0 для нескольких интервалов азимутального угла наблюдения φ (ширина интервала использовалась та же, что и в расчетах по модели 20 атомов, то есть 3°). Отчетливо видно, что для несимметричных относительно центра линзы интервалов всегда существуют атомы,

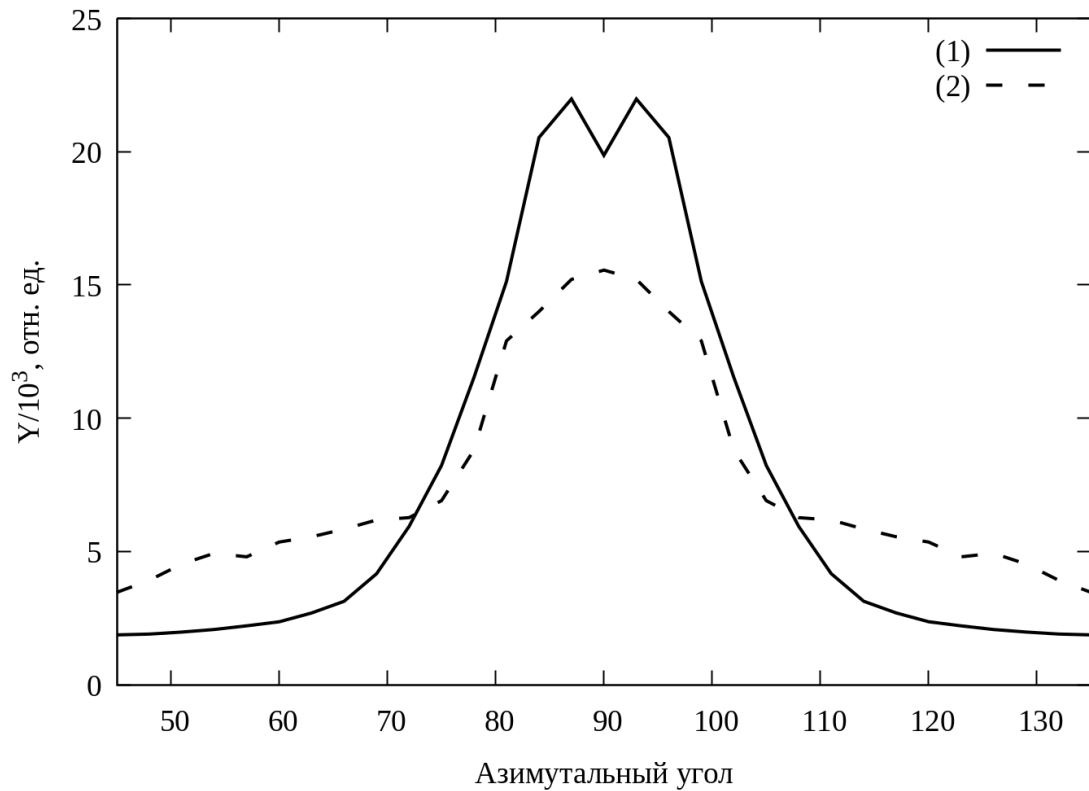


Рис. 4.10. Распределение атомов, распыленных с поверхности монокристалла (001) Ni, по азимутальному углу наблюдения φ (1) и начальному азимутальному углу φ_0 (2).

Полномасштабная МД-модель, температура мишени 300 К

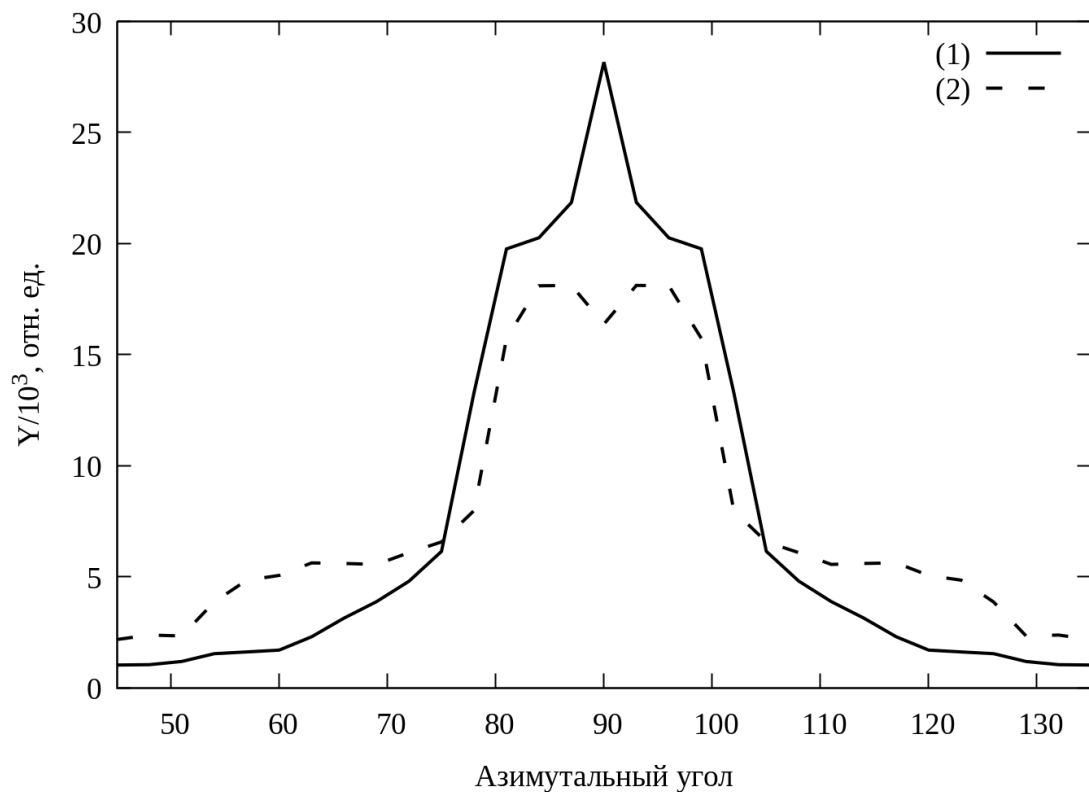


Рис. 4.11. Распределение атомов, распыленных с поверхности монокристалла (001) Ni, по азимутальному углу наблюдения φ (1) и начальному азимутальному углу φ_0 (2).

Полномасштабная МД-модель, температура мишени 0 К

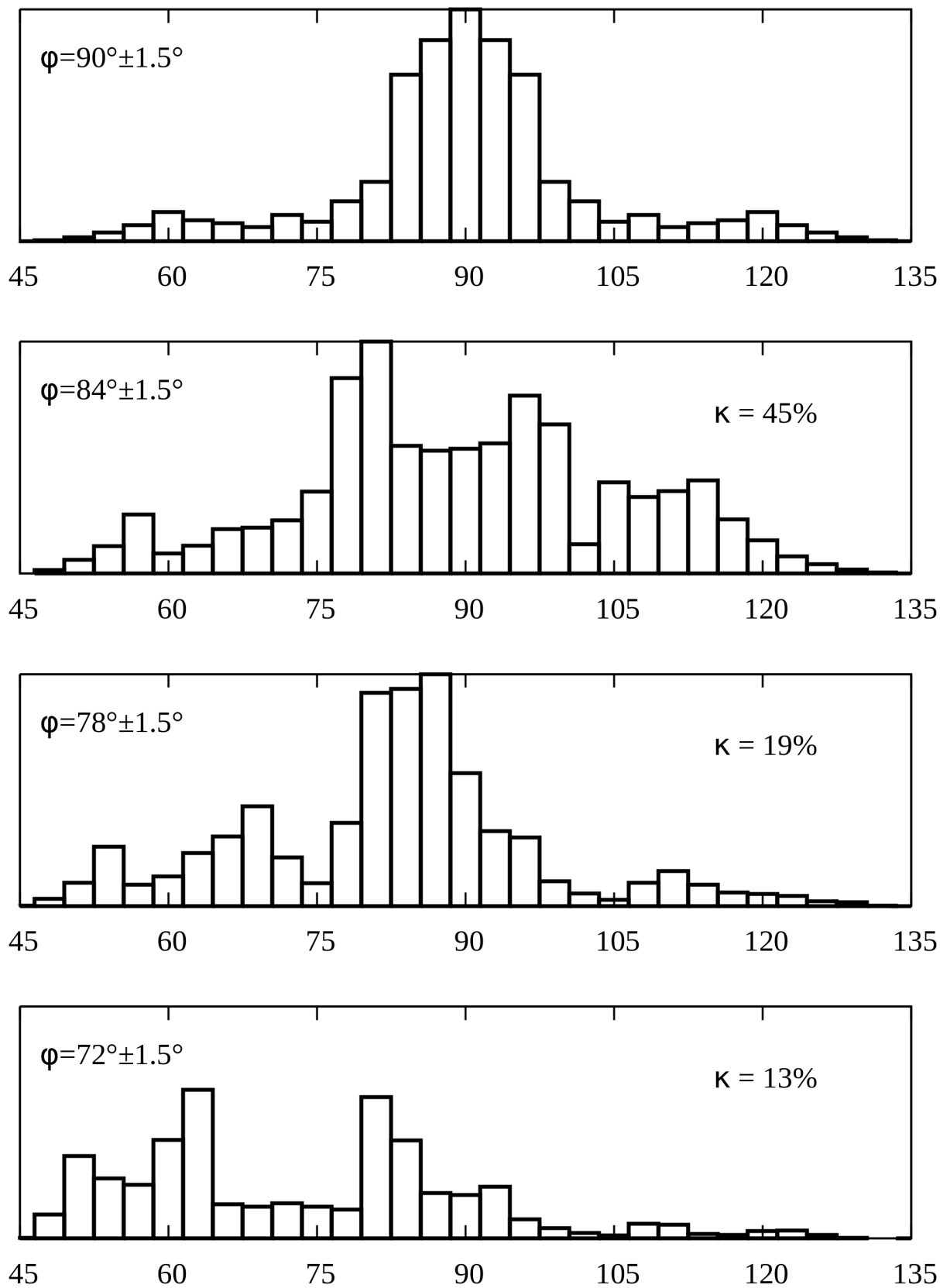


Рис. 4.12. Распределения распыленных атомов, рассчитанные в рамках полномасштабной МД-модели при 0 К, по начальному азимутальному углу φ_0 , для различных интервалов азимутального угла наблюдения φ . Буквой κ обозначена доля перефокусированных атомов в распределении

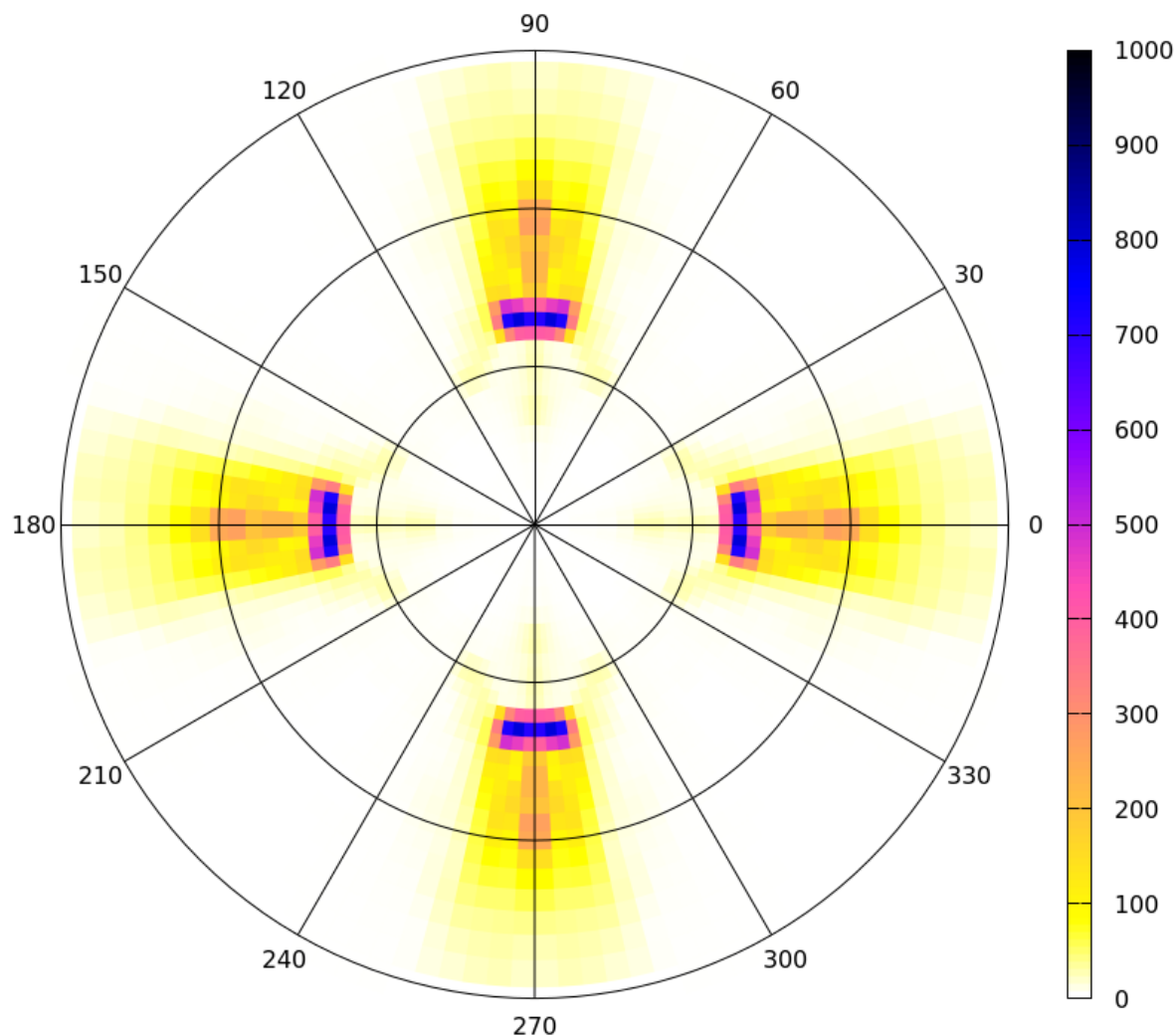


Рис. 4.13. Пятна Венеры, полученные при распылении поверхности грани (001) Ni ионами Ag с энергией 200 эВ при 0 К, только для перефокусированных атомов

которые изначально вылетали в противоположном направлении от центра линзы (в данном случае в направлениях, задаваемых углами $\varphi_0 > 90^\circ$). Это и есть атомы, перефокусированные через центр линзы. Для каждого из интервалов 84° , 78° и 72° ($\pm 1.5^\circ$) была рассчитана доля перефокусированных атомов по отношению к общему числу атомов, входящих в распределение, которая оказалась равной 45%, 19% и 13% соответственно.

Таким образом, значительная часть распыленных атомов являются перефокусированными, то есть наблюдаются не с той стороны от центра линзы по сравнению с направлением первоначального вылета. В алгоритме обработки данных мы поместили все перефокусированные атомы, благодаря этому их легко

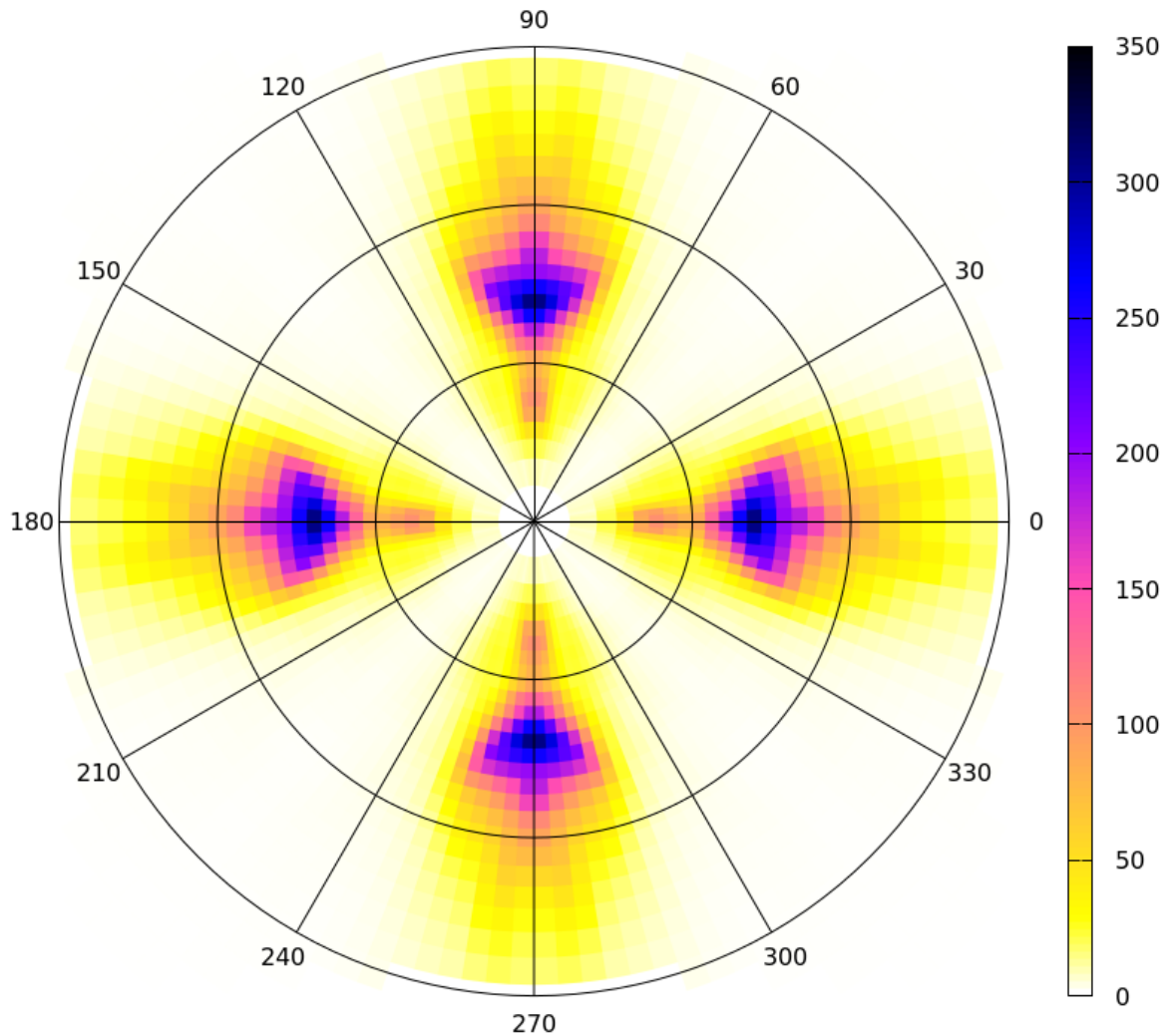


Рис. 4.14. Пятна Венеры, полученные при распылении поверхности грани (001) Ni ионами Ag с энергией 200 эВ при 300 К, только для перефокусированных атомов

можно идентифицировать и в других распределениях. Если ввести коэффициент распыления отдельно для перефокусированных атомов как отношение количества распыленных перефокусированных атомов к количеству упавших ионов, то его значение получается равным 0.336 ат/ион и 0.298 ат/ион, а перефокусированные атомы в целом составляют 36% и 33% от общего числа распыленных атомов, для 0 К и 300 К соответственно.

На рис. 4.13 и 4.14 показаны двумерные угловые распределения в полярных координатах $(\rho; \varphi)$ отдельно для перефокусированных распыленных атомов. При 300 К перефокусированные атомы наблюдаются в более широких интервалах полярного и азимутального угла. Из-за колебаний кристаллической

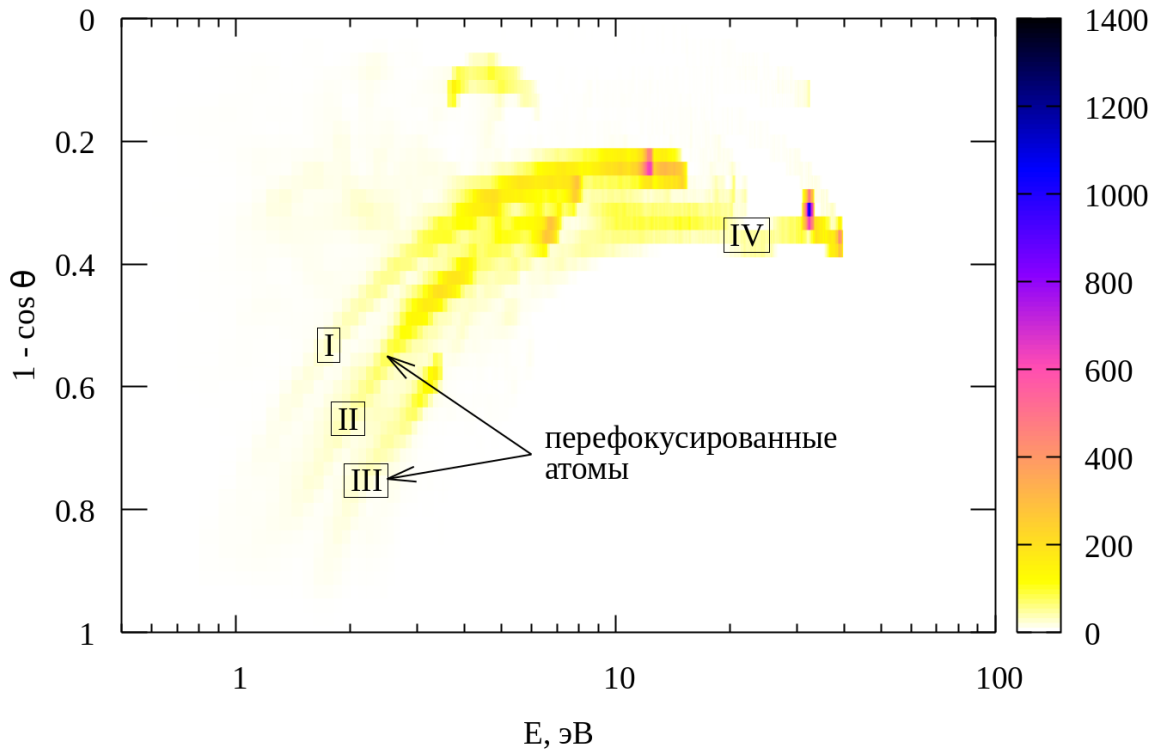


Рис. 4.15. Распределение распыленных атомов по энергии E и $1 - \cos \theta$, наблюдаемых в интервале азимутальных углов φ $[85.5^\circ; 88.5^\circ]$. Два нижних хребта образованы в основном перифокусированными атомами

решетки при 300 К более широкими становятся и распределения по полярному углу и энергии наблюдения, из-за чего идентификация хребтов в них затруднена. Поэтому ниже мы будем рассматривать распределения только для температуры 0 К.

4.3. Распределения распыленных атомов для несимметричных интервалов азимутального угла

На рис. 4.15 показано двумерное распределение распыленных атомов для несимметричного относительно центра линзы интервала азимутального угла наблюдения $87^\circ \pm 1.5^\circ$. Как и в случае с моделью 20 атомов (см. рис. 2.10 на стр. 59), в распределении видны отдельные хребты, которые, как сразу можно предположить, возникают из-за различных механизмов фокусировки в процессе вылета с поверхности. При энергиях наблюдения от 1 до 3 эВ наблюдается три

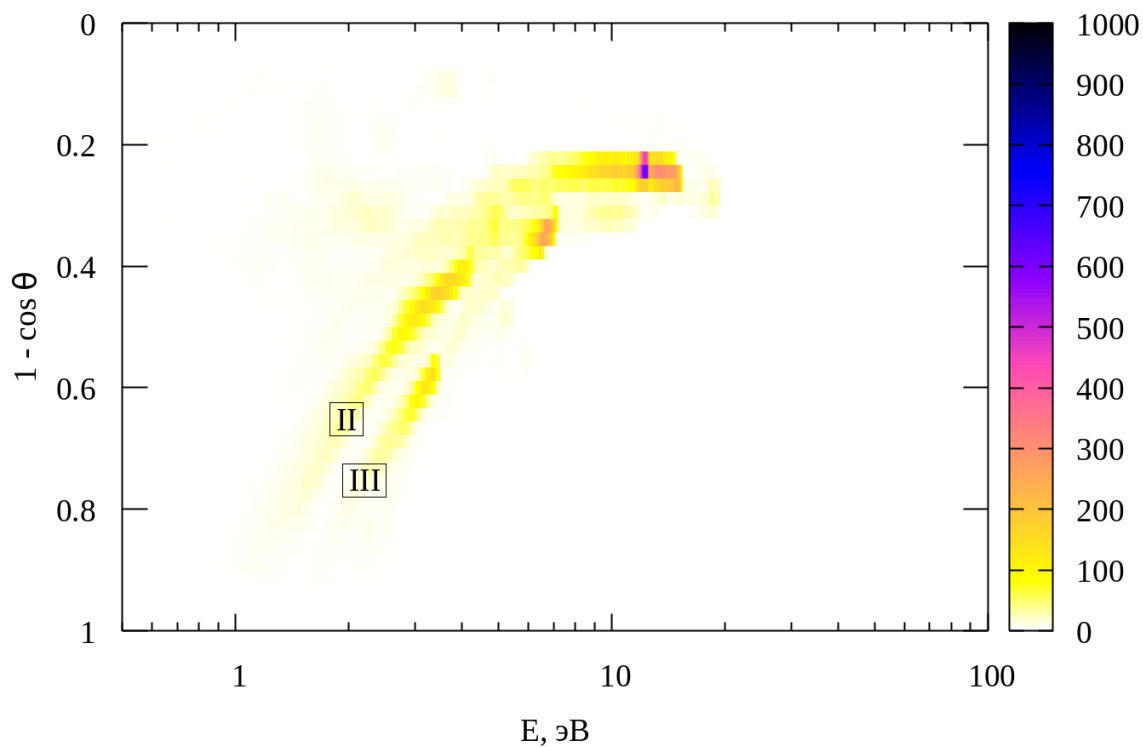


Рис. 4.16. Распределение перефокусированных распыленных атомов по энергии E и $1 - \cos \theta$, наблюдаемых в интервале азимутальных углов φ $[85.5^\circ; 88.5^\circ]$

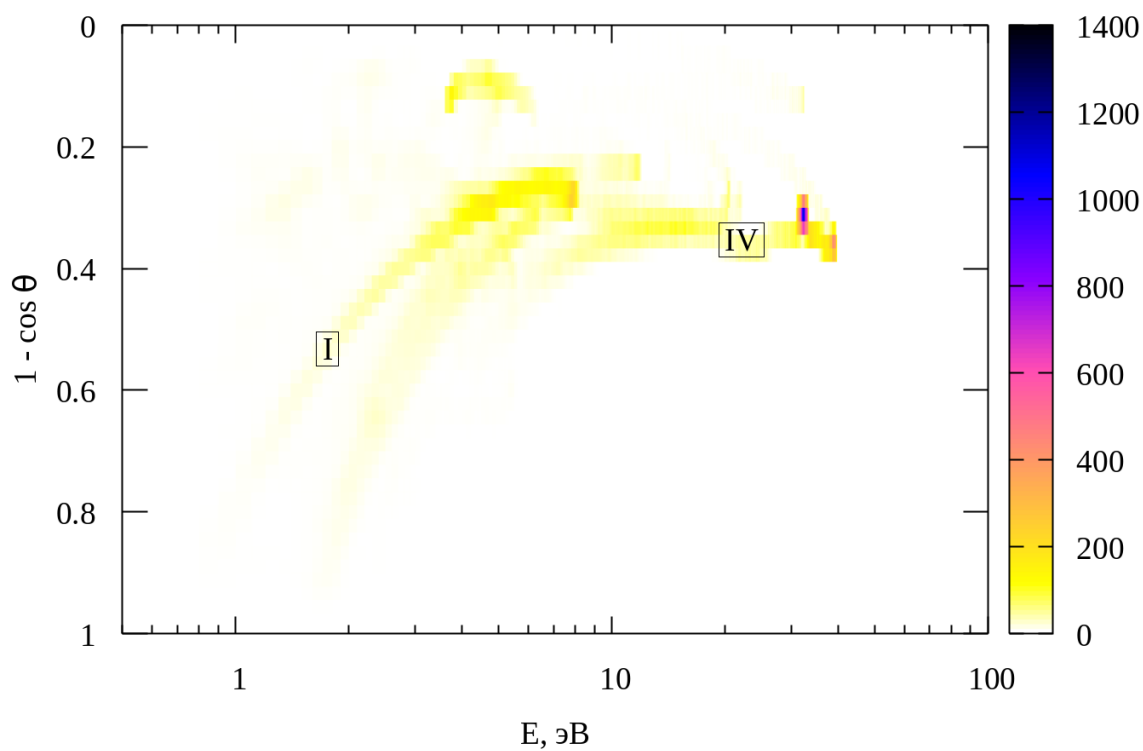


Рис. 4.17. Распределение фокусированных и собственных распыленных атомов по энергии E и $1 - \cos \theta$, наблюдаемых в интервале азимутальных углов φ $[85.5^\circ; 88.5^\circ]$

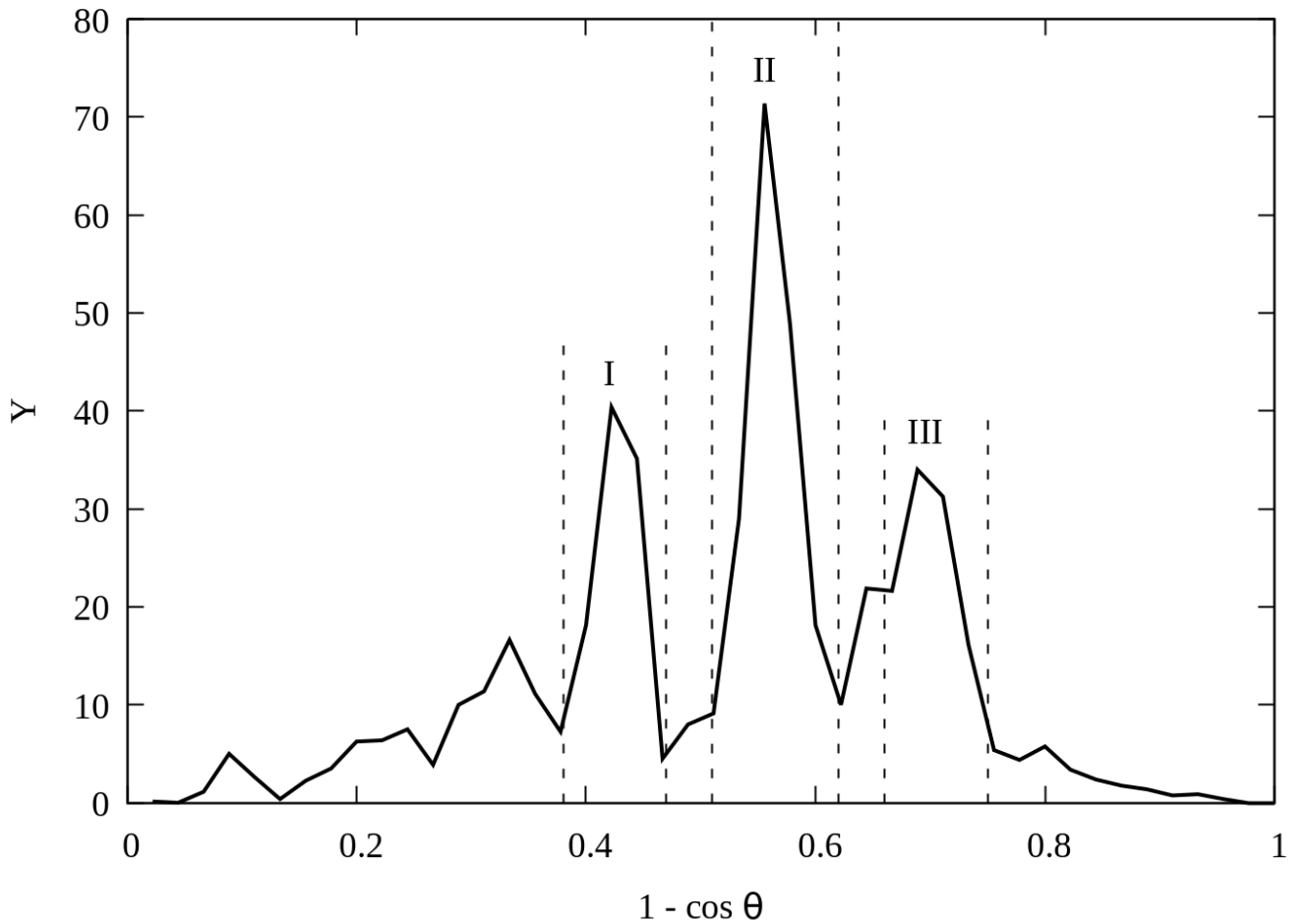


Рис. 4.18. Распределение распыленных атомов по $1 - \cos \theta$, наблюдаемых в интервале азимутальных углов φ $[85.5^\circ; 88.5^\circ]$ с энергией E (2.5 ± 0.1) эВ

хребта (обозначим их I, II и III в порядке сверху вниз), нижний хребет (III) примерно при 3 эВ обрывается, остальные два сходятся в центральной области распределения. При энергиях от 10 до 40 эВ также наблюдается отдельный хребет (IV).

Из сопоставления распределений на рис. 4.16 и 4.17, построенных отдельно для перефокусированных и для фокусированных и собственных атомов, становится ясно, что хотя хребты разных групп атомов смешиваются друг с другом, тем не менее, можно сказать, что хребты II и III образованы 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.

На рис. 4.18 показано распределение распыленных атомов, наблюдаемых в том же интервале азимутальных углов $87^\circ \pm 1.5^\circ$, по $1 - \cos \theta$ для энергий наблюдения E (2.5 ± 0.1) эВ. Здесь хребтам I, II и III соответствуют одноименные максимумы, окрестности которых для удобства обозначены пунктирными линиями. Окрестности максимумов задаются интервалами полярного угла θ : I — $[51.7^\circ; 58.0^\circ]$, II — $[60.7^\circ; 67.7^\circ]$, III — $[70.1^\circ; 75.5^\circ]$.

Чтобы проанализировать механизмы вылета атомов, образующих данные максимумы, были построены графики распределений этих групп атомов по φ_0 (рис. 4.19), по $1 - \cos \theta_0$ (рис. 4.20) и по E_0 (рис. 4.21).

Атомы, образующие максимум I, в основном летят вблизи поверхности в направлениях, задаваемых азимутальными углами φ_0 из интервала $87^\circ \pm 1.5^\circ$, то есть являются собственными по азимутальному углу. По полярному углу эти атомы можно классифицировать как сильно заблокированные, потому что для подавляющего их числа выполняется условие $\theta < \theta_0$. Описать движение атомов из данной группы можно следующим образом. Атомы вылетают под сравнительно небольшим углом $20^\circ - 30^\circ$ к поверхности (или $60^\circ - 70^\circ$ к нормали) с начальной энергией порядка 7–9 эВ, и рассеиваются на линзе из двух атомов, при этом их траектория подгибается к нормали (сильная блокировка) из-за взаимодействия с линзой и, возможно, атомом за линзой.

Атомы данной группы в распределении по E_0 образуют два сравнимых по высоте максимума, при 7.3 эВ и 8.9 эВ. Похожая ситуация встречается довольно часто и означает, что атомы с большей начальной энергией отдают ее не только при взаимодействии с линзой, но и при взаимодействии с атомом за линзой, при этом теряется около 6.4 эВ энергии. Тогда при сильной блокировке только на линзе теряется около 4.8 эВ энергии.

Для атомов, образующих максимум II, в основном, полярный угол θ не сильно отличается от начального угла θ_0 . Это означает, что блокировка атома

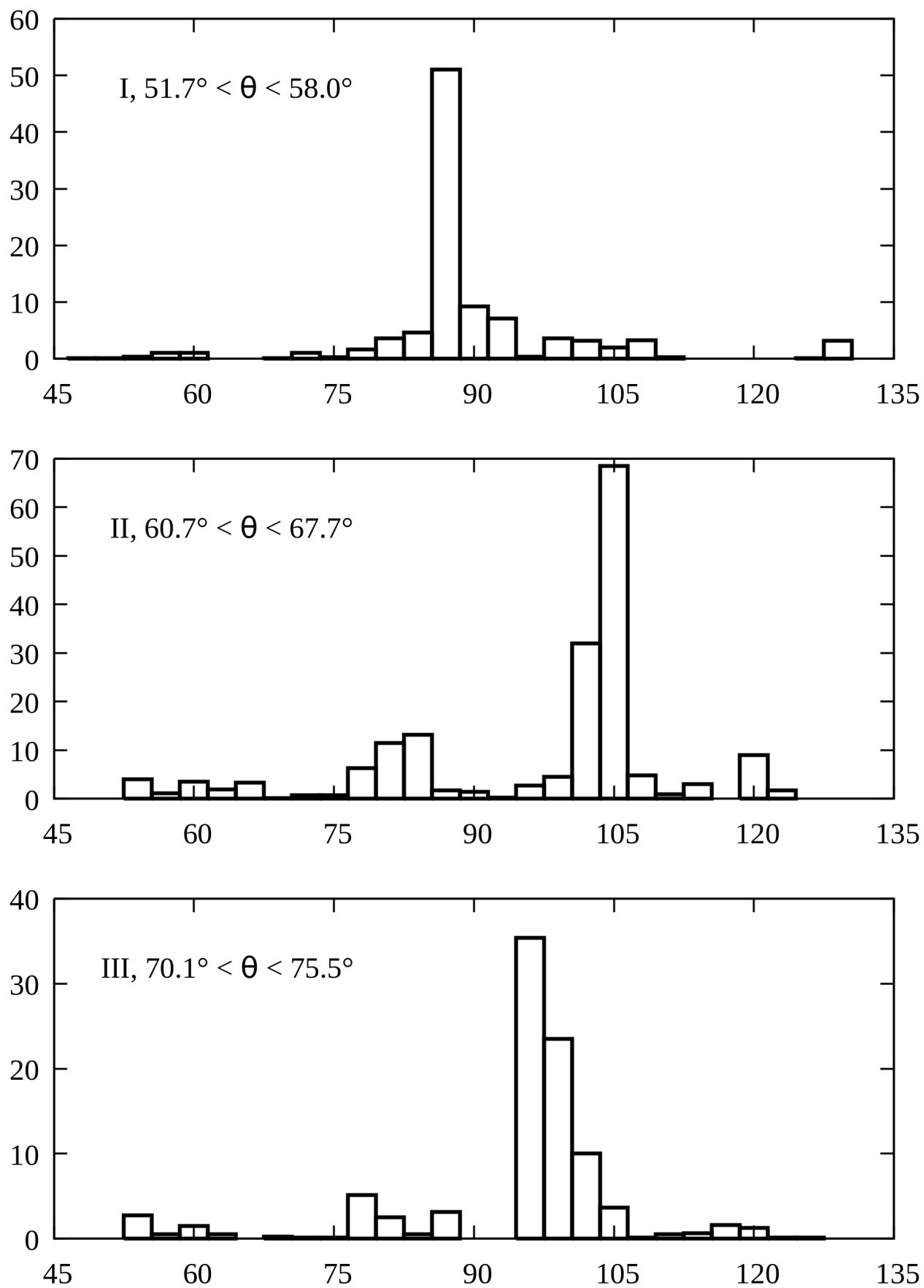


Рис. 4.19. Распределения распыленных атомов по начальному азимутальному углу φ_0 , наблюдаемых в окрестностях максимумов I, II и III распределения на рис. 4.18

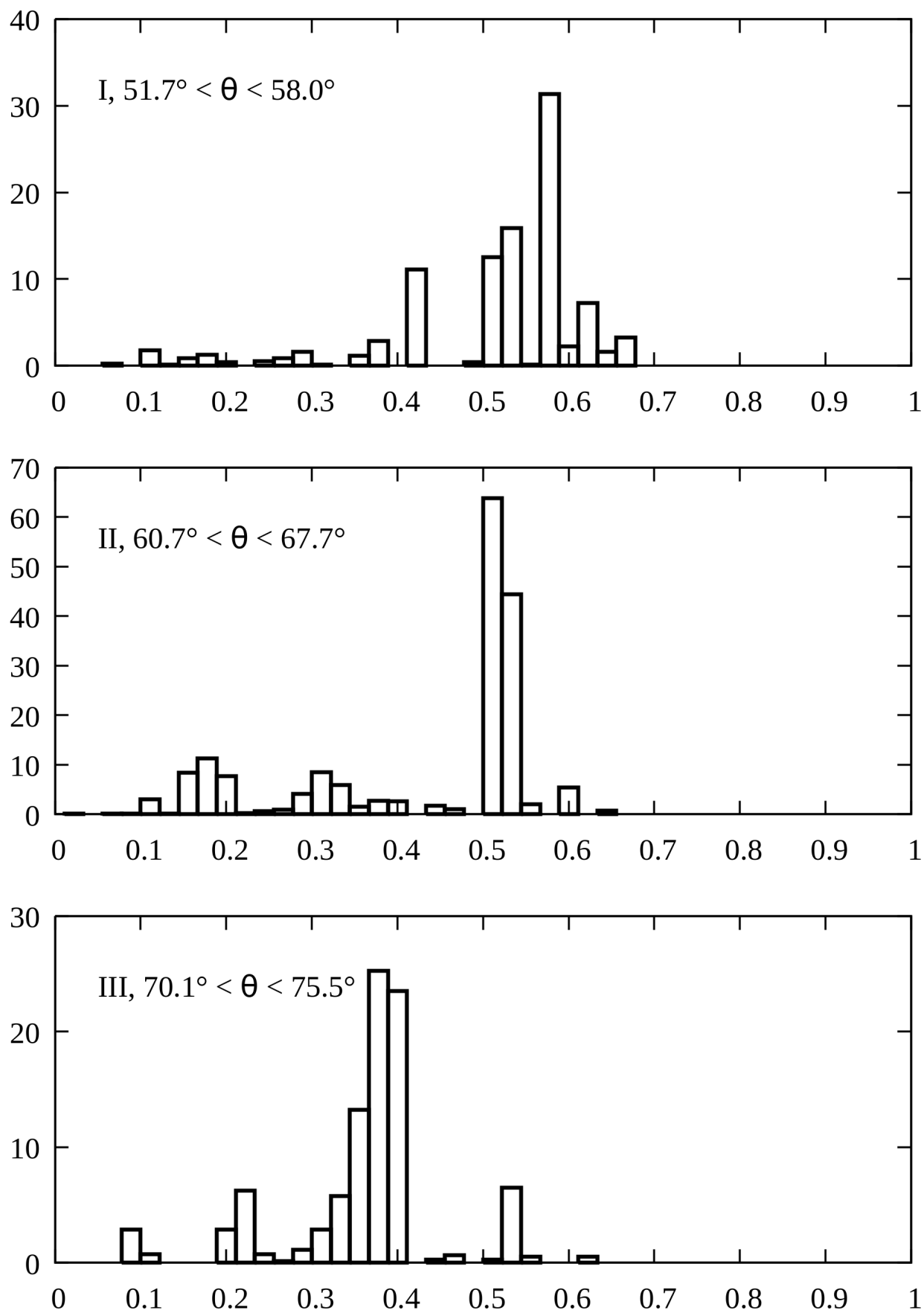


Рис. 4.20. Распределения распыленных атомов по $1 - \cos \theta_0$, наблюдаемых в окрестностях максимумов I, II и III распределения на рис. 4.18

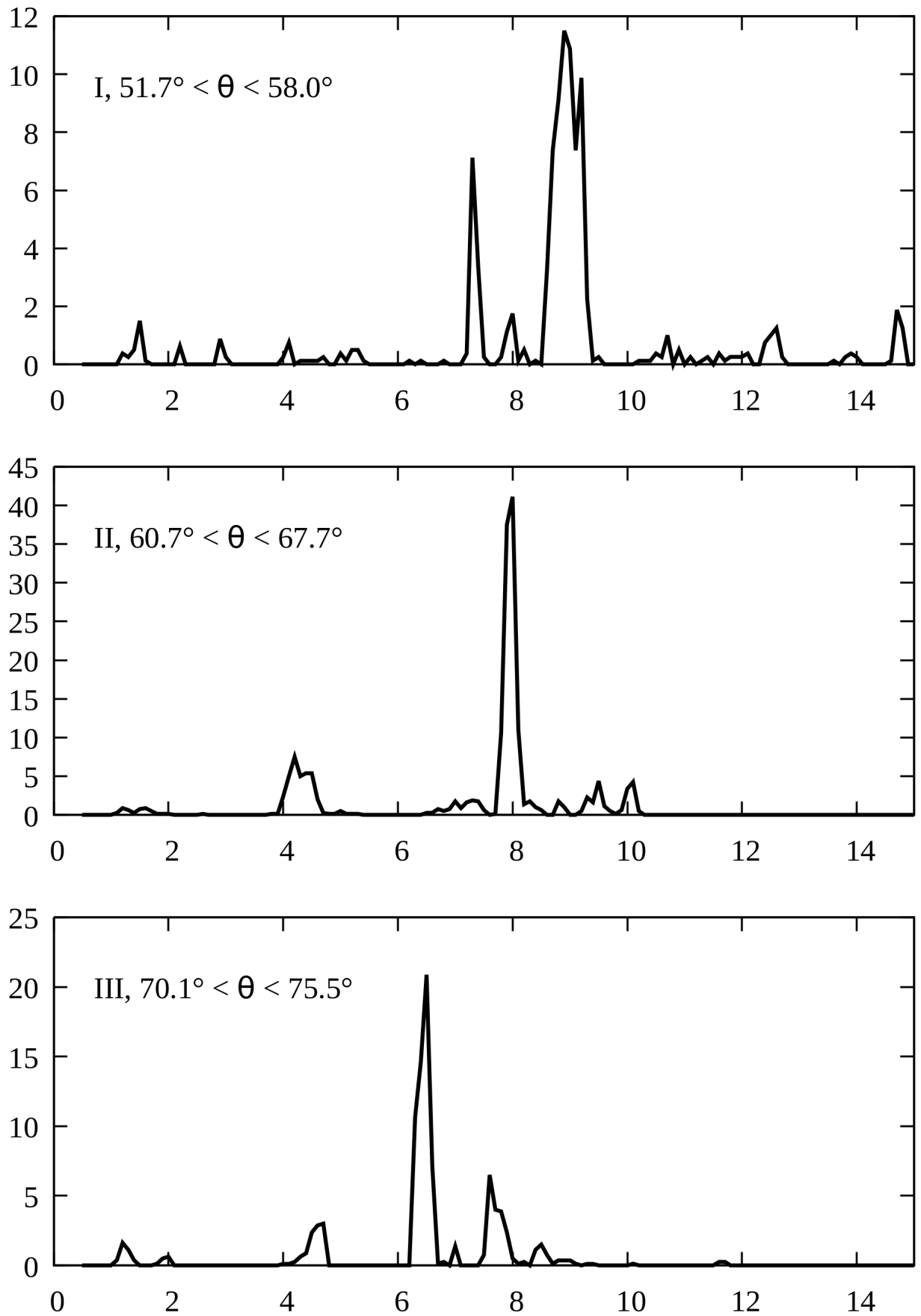


Рис. 4.21. Распределение расплывших атомов по начальной энергии E_0 , наблюдаемых в окрестностях максимумов I, II и III распределения на рис. 4.18

компенсируется за счет влияния притяжения потенциального поля поверхности кристалла. Атомы данной группы в основном перефокусированные (начальный азимутальный угол $100^\circ - 106^\circ$) и их траектория разворачивается примерно на $13^\circ - 19^\circ$ по азимутальному углу. В распределении по E_0 — характерный узкий пик при 8 эВ, потери энергии составляют около 5.5 эВ.

Атомы, образующих максимум III, в основном являются перефокусированными с начальными азимутальными углами $95^\circ - 100^\circ$. Эти атомы вылетают под углами θ_0 ближе к нормали, чем атомы предыдущих групп, поэтому взаимодействие с соседними атомами не такое сильное, из-за чего разворот траектории по азимутальному углу составляет только $8^\circ - 13^\circ$. За счет притяжения к поверхности полярный угол увеличивается ($\theta > \theta_0$). Поскольку сильная блокировка отсутствует, потери энергии здесь меньше из-за более слабого взаимодействия с атомами линзы.

Выводы к главе 4

В модели 20 атомов, которая использовалась в работе, рассматривается только финальная стадия распыления — эмиссия атомов с поверхности грани (001) Ni. Поэтому данную модель необходимо было сопоставить с приближенной к реальному эксперименту полномасштабной МД-моделью, в которой монокристаллический блок (001) Ni бомбардировался ионами Ag 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 \AA), но и на высоте 0.3 \AA от усредненной поверхности кристалла — так называемые *начальные* энергия

и углы.

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° , в распределении по начальному полярному углу такой максимум отсутствует, что говорит о слабом влиянии каскадных механизмов на формирование пятен Венера.

Действительно, только за счет поверхностных механизмов удалось объяснить формирование указанного максимума, что показало сравнение с моделью 20 атомов, в которой каскадные механизмы фокусировки отсутствуют.

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 наблюдается на угле 53° , затем при увеличении энергии максимум смещается в сторону меньших углов до положения 43° (при энергии 8–10 эВ), с дальнейшим ростом энергии максимум смещается в противоположную сторону (уже не так быстро), достигая положения 46° 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 направлении $\langle 010 \rangle$ на центр линзы (90°) 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.

Для интервала азимутальных углов $[85.5^\circ; 88.5^\circ]$ в распределении распы-

ленных атомов одновременно по полярному углу и энергии наблюдения наблюдаются отдельные хребты, которые формируются преимущественно либо за счет перефокусированных атомов, либо фокусированных и собственных по азимутальному углу атомов. Показано, что для данного интервала в полярном угловом распределении для энергии наблюдения (2.5 ± 0.1) эВ наблюдается три отдельных максимума, один из которых соответствует фокусированным и собственным атомам, два — перефокусированным атомам. 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, приведенные в главе, докладывались и обсуждались на Международной конференции “Взаимодействие ионов с поверхностью” (Москва, 2019) и на Международных Тулиновских конференциях “Физика взаимодействия заряженных частиц с кристаллами” (Москва, 2019, 2021, 2022).

Основные результаты и выводы

В диссертации с помощью методов молекулярной динамики были рассмотрены механизмы распыления монокристаллов на примере грани (001) Ni. Для этого была разработана молекулярно-динамическая модель 20 атомов поверхности, в рамках которой рассматривается только финальная стадия распыления — эмиссия атомов с поверхности монокристалла. Также проводились расчеты в рамках полномасштабной МД-модели с падением ионов, наиболее приближенной к эксперименту. В итоге получены следующие РЕЗУЛЬТАТЫ И ВЫВОДЫ:

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-соседах.
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 блокированными 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 \AA от поверхности) отсутствует максимум на угле 45° , 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. Стендовый доклад.
- 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. Стендовый доклад.
- 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. Устный доклад.
- 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. Стендовый доклад.
- 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. Стендовый доклад.

Тезисы докладов конференций:

- A9. *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. Москва: Университетская книга, 2014. С. 73. Устный доклад.
- A10. *Самойлов В. Н., Мусин А. И.* О вкладе в распыление перефокусированных атомов при эмиссии с поверхности граней (001) Ni и (001) Au // Там же. С. 88. Стендовый доклад.
- A11. *Мусин А. И., Самойлов В. Н.* О многозначности сигнала перефокусированных атомов, эмитированных с поверхности грани (001) Ni // Сборник тезисов Всероссийской школы-конференции студентов, аспирантов и молодых ученых “Материалы и технологии XXI века”, Казань, Россия, 11-12 декабря 2014. Казань: Изд-во КФУ, 2014. С. 276. Стендовый доклад.
- A12. *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. Москва: Университетская книга, 2015. С. 85. Устный доклад.
- A13. *Самойлов В. Н., Мусин А. И.* О наблюдаемости перефокусированных распыленных атомов при эмиссии с поверхности грани (001) Ni // Там же. С. 86. Стендовый доклад.
- A14. *Мусин А. И., Самойлов В. Н.* Об изменении показателя степени в зависимости коэффициента распыления от энергии связи при магнитном фазовом переходе // Сборник тезисов 1-й Международной школы-конфе-

- ренции студентов, аспирантов и молодых ученых “Биомедицина, материалы и технологии XXI века”, Казань, Россия, 25-28 ноября 2015. Казань: Изд-во КФУ, 2015. С. 490. Стендовый доклад.
- A15. *Самойлов В. Н., Мусин А. И.* Перефокусированные атомы при распылении поверхности монокристалла: загадки и реальность // Там же. С. 539. Стендовый доклад.
- A16. *Мусин А. И., Самойлов В. Н.* Об изменении фокусировки атомов, эмитированных с грани (001) Ni, при магнитном фазовом переходе // Тезисы докладов 46-й Международной Тулиновской конференции “Физика взаимодействия заряженных частиц с кристаллами”, Москва, 31 мая – 2 июня 2016. Москва: КДУ, Университетская книга, 2016. С. 86. Устный доклад.
- A17. *Самойлов В. Н., Мусин А. И.* Об эволюции распределений распыленных атомов с изменением угла наблюдения при эмиссии с поверхности грани (001) Ni // Там же. С. 112. Стендовый доклад.
- A18. *Мусин А. И., Самойлов В. Н.* Механизмы фокусировки атомов, распыленных с поверхности монокристалла // Тезисы докладов 47-й Международной Тулиновской конференции “Физика взаимодействия заряженных частиц с кристаллами”, Москва, 30 мая – 1 июня 2017. Москва: КДУ, Университетская книга, 2017. С. 76. Стендовый доклад.
- A19. *Самойлов В. Н., Мусин А. И.* Эволюция распределений распыленных атомов с изменением энергии связи при эмиссии с поверхности грани (001) Ni // Там же. С. 75. Стендовый доклад.
- A20. *Самойлов В. Н., Мусин А. И.* О некоторых особенностях фокусировки распыленных атомов при эмиссии с поверхности грани (001) Ni // Тезисы докладов 48-й Международной Тулиновской конференции “Физика взаимодействия заряженных частиц с кристаллами”, Москва, 29-31 мая 2018. Москва: КДУ, Университетская книга, 2018. С. 19. Стендовый доклад.

- A21. *Мусин А. И., Корнич Г. В., Самойлов В. Н.* Молекулярно-динамическое моделирование взаимодействия ионов Ag низкой энергии с поверхностью грани (001) Ni // Тезисы докладов 49-й Международной Тулиновской конференции “Физика взаимодействия заряженных частиц с кристаллами”, Москва, 28-30 мая 2019. Москва: КДУ, Университетская книга, 2019. С. 25. Стендовый доклад.
- A22. *Мусин А. И., Самойлов В. Н.* Об изменении фокусировки распыленных атомов с увеличением атомного номера вещества мишени // Там же. С. 26. Стендовый доклад.
- A23. *Самойлов В. Н., Мусин А. И.* Эволюция энергоспектров эмитированных атомов с изменением атомного номера вещества мишени // Там же. С. 27. Стендовый доклад.
- A24. *Мусин А. И., Корнич Г. В., Самойлов В. Н.* Исследование механизмов фокусировки атомов, распыленных с поверхности грани (001) Ni ионами Ag низкой энергии // Тезисы докладов 50-й Международной Тулиновской конференции “Физика взаимодействия заряженных частиц с кристаллами”, Москва, 25-27 мая 2021. Москва: КДУ, Университетская книга, 2021. С. 37. Стендовый доклад.
- A25. *Мусин А. И., Самойлов В. Н.* Эффект многозначности перефокусированных атомов, распыленных с поверхности грани (001) Ni ионами Ag низкой энергии // Тезисы докладов 51-й Международной Тулиновской конференции “Физика взаимодействия заряженных частиц с кристаллами”, Москва, 24-26 мая 2022. Москва: КДУ, Университетская книга, 2022. С. 45. Стендовый доклад.

Список литературы

1. Габович М. Д., Плешивцев Н. В., Семашко Н. Н. Пучки ионов и атомов для управляемого термоядерного синтеза и технологических целей. Москва : Энергоатомиздат, 1986. С. 248.
2. Narayan K., Subramaniam S. Focused ion beams in biology // *Nature Meth.* 2015. Vol. 12, no. 11. P. 1021–1031.
3. Распыление твердых тел ионной бомбардировкой: Физическое распыление одноэлементных твердых тел / Под ред. Р. Бериша. Москва : Мир, 1984. С. 336.
4. 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.
5. Benninghoven A. Surface analysis by secondary ion mass spectrometry (SIMS) // *Surf. Sci.* 1994. Vol. 299. P. 246–260.
6. Silsbee R. H. Focusing in collision problems in solids // *J. Appl. Phys.* 1957. Vol. 28, no. 11. P. 1246–1250.
7. Lehmann C., Sigmund P. On the mechanism of sputtering // *Physica status solidi (b).* 1966. Vol. 16, no. 2. P. 507–511.
8. 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.
9. Harrison D. E. et al. Computer simulation of sputtering // *J. Appl. Phys.* 1968. Vol. 39, no. 8. P. 3742–3761.
10. 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.
11. *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.
 12. *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.
 13. *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.
 14. *Корсакова О. С.* Механизмы формирования угловых и энергетических распределений атомов, распыленных с поверхности кристаллов при ионной бомбардировке : дисс. канд. физ.-мат. наук / О. С. Корсакова ; МГУ им. М. В. Ломоносова. Физ. фак. Москва. 1997.
 15. *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.
 16. *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.
 17. *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.
 18. *Samoilov V. N. et al.* [Mechanisms of focusing in sputtering: Molecular dynamics computer simulation study](#) // In: Ion Beam Modification of Materials. Proc. of 9th Int. Conf. of Ion Beam Modification of Materials (IBMM 95), Canberra, Australia, February 05-10, 1995 / Ed. by J. S. Williams et al. Amsterdam : Elsevier Science B.V., 1996. P. 710–714.
 19. *Grove W. R.* On some anomalous cases of electrical decomposition // *Phil.*

- Mag.* 1853. Vol. 5, no. 203. P. 203–209.
20. *Wehner G. K.* Sputtering of metal single crystals by ion bombardment // *J. Appl. Phys.* 1955. Vol. 26, no. 8. P. 1056–1057.
 21. *Юрасова В. Е.* Современные теории катодного распыления и микрорельеф разрушаемой поверхности металла // *ЖТФ.* 1958. Т. 28, № 9. С. 1966–1970.
 22. *Юрасова В. Е., Плешивцев Н. В., Орфанов И. В.* О направленном выходе частиц при распылении монокристалла меди пучками ионов с энергией до 50 кэВ // *ЖЭТФ.* 1959. Т. 37, № 4 (10). С. 966–972.
 23. *Chapman G. E. et al.* The energy distribution of sputtered atoms from gold // *Radiat. Eff.* 1972. Vol. 13, no. 1–2. P. 121–129.
 24. *Oen O. S., Robinson M. T.* The effect of channeling on displacement cascade theory // *Appl. Phys. Lett.* 1963. Vol. 2, no. 4. P. 83–85.
 25. *Nelson R. S., Thompson M. W.* The penetration of energetic ions through the open channels in a crystal lattice // *Phil. Mag.* 1963. Vol. 8, no. 94. P. 1677–1690.
 26. *Фогель Я. М.* Вторичная ионная эмиссия // *Успехи физических наук.* 1967. Т. 91. С. 75–112.
 27. *Arifov U. A.* **Angular Relationships of Secondary Ion Emission.** In: Interaction of Atomic Particles with a Solid Surface. Boston, MA : Springer, 1969. P. 105–139.
 28. *Машкова Е. С., Молчанов В. А., Одинцов Д. Д.* Анизотропия коэффициента ионно-электронной эмиссии монокристаллов // *Докл. АН СССР.* 1963. Т. 151, № 5. С. 1074–1075.
 29. *Yurasova V. E. et al.* Spatial and energy distributions of secondary ions produced by ion bombardment of single crystals // *Radiat. Eff.* 1973. Vol. 20, no. 1–2. P. 89–93.
 30. Sputtering by Particle Bombardment: Experiments and Computer Calculations from Threshold to MeV Energies / Ed. by R. Behrisch, W. Eckstein. Berlin Heidelberg New York : Springer, 2007. Vol. 110 of *Topics in Applied*

- Physics*. P. 470. ISBN: 987-3-540-44500-5.
31. *Sigmund P.* Theory of sputtering. I. Sputtering yield of amorphous and polycrystalline targets // *Phys. Rev.* 1969. Vol. 184, no. 2. P. 383–416.
 32. *Sigmund P., Claussen C.* Sputtering from elastic-collision spikes in heavy-ion-bombarded metals // *J. Appl. Phys.* 1981. Vol. 52, no. 2. P. 990–993.
 33. *Фальконе Д.* Теория распыления // *Успехи физических наук*. 1992. Т. 162, № 1. С. 71–117.
 34. *Bradley R. M., Hofsäss H.* A modification to the Sigmund model of ion sputtering // *J. Appl. Phys.* 2014. Vol. 116, no. 23. P. 234304.
 35. *Hofsäss H., Bradley R. M.* Tests of the modified Sigmund model of ion sputtering using Monte Carlo simulations // *J. Appl. Phys.* 2015. Vol. 117, no. 17. P. 174310.
 36. *Weijnsfeld C. H.* Yield, energy and angular distribution of sputtering atoms : Thesis / C. H. Weijnsfeld ; Utrecht. 1966.
 37. *Шульга В. И.* Угловые зависимости и механизмы распыления (машинное моделирование) // *Поверхность*. 1982. № 3. С. 38–41.
 38. *Hautala M., Likonen J.* Computer simulations on collision-cascade anisotropies: Bombardment of single-crystalline Cu (100) by Ar ions // *Phys. Rev. B*. 1990. Vol. 41, no. 4. P. 1759–1769.
 39. *Likonen J.* Computer simulations on sputtering mechanisms: Bombardment of single-crystalline Cu (100) by Ar ions // *Phys. Rev. B*. 1990. Vol. 42, no. 7. P. 3853–3865.
 40. *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 3, 2023).
 41. *Henschke E. B.* Deposit spot patterns from low-index planes of metal single crystals in a new theory of cathode sputtering // *J. Appl. Phys.* 1957. Vol. 28, no. 4. P. 411–420.

42. *Henschke E. B.* New collision theory of cathode sputtering of metals at low ion energies // *Phys. Rev.* 1957. Vol. 106, no. 4. P. 737–753.
43. *Vicanek M., Rodriguez J. J., Sigmund P.* Depth of origin and angular spectrum of sputtered atoms // *Nucl. Instr. Meth. B.* 1989. Vol. 36, no. 2. P. 124–136.
44. *Sigmund P. et al.* Round Robin computer simulation of ejection probability in sputtering // *Nucl. Instr. Meth. B.* 1989. Vol. 36, no. 2. P. 110–123.
45. *Falcone G., Kelly R., Oliva A.* Corrections to the collisional sputtering yield // *Nucl. Instr. Meth. B.* 1986. Vol. 18, no. 1–6. P. 399–401.
46. *Oliva A., Kelly R., Falcone G.* Comments on collisional sputtering theory // *Nucl. Instr. Meth. B.* 1987. Vol. 19. P. 101–108.
47. *Dawson P. H.* The oxidation of aluminum studied by sims at low energies // *Surf. Sci.* 1976. Vol. 57, no. 1. P. 229–240.
48. *Scott H. G.* Sputtering of gold by low energy inert gas ions // *J. Appl. Phys.* 1962. Vol. 33, no. 6. P. 2011–2015.
49. *Guseva M. I. et al.* Sputtering of beryllium, tungsten, tungsten oxide and mixed W–C layers by deuterium ions in the near-threshold energy range // *J. Nucl. Mater.* 1999. Vol. 266. P. 222–227.
50. *Honig R. E.* Sputtering of surfaces by positive ion beams of low energy // *J. Appl. Phys.* 1958. Vol. 29, no. 3. P. 549–555.
51. *Oechsner H., Gerhard W.* A method for surface analysis by sputtered neutrals // *Phys. Lett. A.* 1972. Vol. 40, no. 3. P. 211–212.
52. *Winograd N., Baxter J. P., Kimock F. M.* Multiphoton resonance ionization of sputtered neutrals: a novel approach to materials characterization // *Chem. Phys. Lett.* 1982. Vol. 88, no. 6. P. 581–584.
53. *Becker C. H., Gillen K. T.* Surface analysis by nonresonant multiphoton ionization of desorbed or sputtered species // *Analytical Chemistry.* 1984. Vol. 56, no. 9. P. 1671–1674.
54. *Doerner R. P., Whyte D. G., Goebel D. M.* Sputtering yield measurements

- during low energy xenon plasma bombardment // *J. Appl. Phys.* 2003. Vol. 93, no. 9. P. 5816–5823.
55. *Bieck W., Gnaser H., Oechsner H.* Secondary-neutral microprobe with electron-gas post-ionization // *Appl. Phys. Lett.* 1993. Vol. 63, no. 6. P. 845–847.
56. *Wehner G. K.* Velocities of sputtered atoms // *Phys. Rev.* 1959. Vol. 114, no. 5. P. 1270–1273.
57. *Wehner G. K.* Forces on ion-bombarded electrodes in a low-pressure plasma // *J. Appl. Phys.* 1960. Vol. 31, no. 8. P. 1392–1397.
58. *Kopitzki K., Stier H.-E.* Mittlere kinetische energie der bei der kathodenz-erstäubung von metallen ausgesandten partikel // *Z. Naturforsch. A.* 1962. Vol. 17, no. 4. P. 348–354.
59. *Almen O., Bruce G.* Collection and sputtering experiments with noble gas ions // *Nucl. Instr. Meth.* 1961. Vol. 11. P. 257–278.
60. *Wucher A., Oechsner H.* Energy distributions of metal atoms and monoxide molecules sputtered from oxidized Ta and Nb // *Nucl. Instr. Meth. B.* 1986. Vol. 18, no. 1–6. P. 458–463.
61. *Wright R., Gruen D.* Discussion of the origin of secondary photon and secondary ion emission during energetic particle irradiation of solids. I. The collision cascade // *J. Chem. Phys.* 1980. Vol. 72, no. 1. P. 147–171.
62. *Husinsky W.* The application of Doppler shift laser fluorescence spectroscopy for the detection and energy analysis of particles evolving from surfaces // *J. Vac. Sci. Technol. B.* 1985. Vol. 3, no. 5. P. 1546–1559.
63. *Thompson M. W., Nelson R. S.* Evidence for heated spikes in bombarded gold from the energy spectrum of atoms ejected by 43 keV A^+ and Xe^+ ions // *Phil. Mag.* 1962. Vol. 7, no. 84. P. 2015–2026.
64. *Overeijnder H. et al.* Energy distributions of atoms sputtered from alkali halides by 540 eV electrons // *Radiat. Eff.* 1978. Vol. 36, no. 1–2. P. 63–71.
65. *Feder R. et al.* Ion beam sputtering of Ag – Angular and energetic distri-

- butions of sputtered and scattered particles // *Nucl. Instr. Meth. B.* 2013. Vol. 316. P. 198–204.
66. *Sigmund P.* Mechanisms and theory of physical sputtering by particle impact // *Nucl. Instr. Meth. B.* 1987. Vol. 27, no. 1. P. 1–20.
67. *Thompson M. W. II.* The energy spectrum of ejected atoms during the high energy sputtering of gold // *Phil. Mag.* 1968. Vol. 18, no. 152. P. 377–414.
68. *Lindhard J. et al.* Integral equations governing radiation effects // *Mat. Fys. Medd. Dan. Vid. Selsk.* 1963. Vol. 33, no. 10. P. 1–42.
69. *Lindhard J., Nielsen V., Scharff M.* Approximation method in classical scattering by screened coulomb fields // *Mat. Fys. Medd. Dan. Vid. Selsk.* 1968. Vol. 36, no. 10. P. 1–32.
70. *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.
71. *Garrison B. J.* Energy distributions of atoms sputtered from polycrystalline surfaces // *Nucl. Instr. Meth. B.* 1986. Vol. 17, no. 4. P. 305–308.
72. *Буханов В. М. и др.* Угловые и энергетические распределения вторичных ионов при распылении поликристаллов // *Вестник Моск. ун-та. Сер. 3. Физика. Астрономия.* 1990. Т. 31, № 1. С. 28–33.
73. *Roosendaal H. E., Sanders J. B.* On the energy distribution and angular distribution of sputtered particles // *Radiat. Eff.* 1980. Vol. 52, no. 3–4. P. 137–143.
74. *Vicanek M., Urbassek H. M.* Secondary-recoil contribution to low-energy light-ion sputtering // *Nucl. Instr. Meth. B.* 1990. Vol. 48, no. 1–4. P. 549–552.
75. *Толмачев А. И.* Развитие каскадной теории распыления на случай произвольных энергий распыленных частиц // *Известия АН СССР, сер. физич.* 1991. Т. 55, № 12. С. 2409–2413.
76. *Толмачев А. И.* Угловое распределение распыленных ионов при нормаль-

- ном падении ионов на мишень // *Поверхность*. 1994. № 12. С. 22–26.
77. *Tolmachev A. I.* On the energy distribution of sputtered atoms at normal ion incidence // *Nucl. Instr. Meth. B*. 1994. Vol. 93, no. 4. P. 415–420.
78. *Кувакин М. В. и др.* Форма поверхностного барьера и спектры распыленных атомов // *ЖТФ, Письма*. 1979. Т. 5, № 6. С. 1200–1203.
79. *Воробьев П. А., Кувакин М. В., Мотавех Х. А.* Расчет на ЭВМ параметров поверхностного барьера для распыляемых частиц // *Поверхность*. 1982. № 3. С. 50–53.
80. *Oechsner H.* Energieverteilungen bei der Festkörperzerstäubung durch Ionenbeschuß // *Zeitschrift für Physik*. 1970. Vol. 238, no. 5. P. 433–451.
81. *Jackson D. P.* Surface ejection in single crystal sputtering // *Canadian J. Phys.* 1975. Vol. 53, no. 16. P. 1513–1523.
82. *Самойлов В. Н.* Исследования затрат энергии на распыление атома с поверхности кристалла // *Вестник Моск. ун-та. Сер. 3. Физика. Астрономия*. 1991. Т. 32, № 1. С. 75–81.
83. *Garrison B. J. et al.* Energy cost to sputter an atom from a surface in keV ion bombardment processes // *Surf. Sci.* 1987. Vol. 180, no. 2–3. P. L129–L133.
84. *Самойлов В. Н.* О высокой эффективности фокусировки распыленных атомов по поверхностному механизму // *Известия РАН. Серия физическая*. 1992. Т. 56, № 6. С. 38–45.
85. *Hou M., Robinson M. T.* Computer simulation of low-energy sputtering in the binary collision approximation // *Appl. Phys.* 1979. Vol. 18, no. 4. P. 381–389.
86. SRIM (The Stopping and Range of Ions in Matter) code. Access mode: <http://www.srim.org/> (online; accessed: April 3, 2023).
87. *Cassidy T. A., Johnson R. E.* Monte Carlo model of sputtering and other ejection processes within a regolith // *Icarus*. 2005. Vol. 176, no. 2. P. 499–507.

88. *Mahady K. et al.* Monte Carlo simulations of nanoscale Ne⁺ ion beam sputtering: investigating the influence of surface effects, interstitial formation, and the nanostructural evolution // *Nanotechnology*. 2016. Vol. 28, no. 4. P. 045305.
89. *Hobler G., Bradley R. M., Urbassek H. M.* Probing the limitations of Sigmund's model of spatially resolved sputtering using Monte Carlo simulations // *Phys. Rev. B*. 2016. Vol. 93, no. 20. P. 205443.
90. *Marx D., Hutter J.* Ab initio molecular dynamics: Theory and implementation // In: Modern methods and algorithms of quantum chemistry / Ed. by J. Grotendorst. Vol. 3 of *NIC Series*. Jülich, Germany : NIC-Directors, 2000. P. 301–449.
91. *Nordlund K., Runeberg N., Sundholm D.* Repulsive interatomic potentials calculated using Hartree-Fock and density-functional theory methods // *Nucl. Instr. Meth. B*. 1997. Vol. 132, no. 1. P. 45–54.
92. *Biersack J. P., Ziegler J. F.* Refined universal potentials in atomic collisions // *Nucl. Instr.* 1982. Vol. 194, no. 1–3. P. 93–100.
93. *Ziegler J. F., Biersack J. P., Littmark U.* Empirical stopping powers for ions in solids // *Charg. States Dyn. Sreen. Swift Ions Solids*. 1983. P. 88–100.
94. *Daw M. S., Baskes M. I.* Embedded-atom method: Derivation and application to impurities, surfaces, and other defects in metals // *Phys. Rev. B*. 1984. Vol. 29, no. 12. P. 6443–6453.
95. *Ackland G. J. et al.* Simple N-body potentials for the noble metals and nickel // *Phil. Mag. A*. 1987. Vol. 56, no. 6. P. 735–756.
96. *Ackland G. J., Vitek V.* Many-body potentials and atomic-scale relaxations in noble-metal alloys // *Phys. Rev. B*. 1990. Vol. 41, no. 15. P. 10324–10333.
97. *Berendsen H. J. C. et al.* Molecular dynamics with coupling to an external bath // *J. Chem. Phys.* 1984. Vol. 81, no. 8. P. 3684–3690.
98. *Lemak A. S., Balabaev N. K.* On the Berendsen thermostat // *Molecular Simulation*. 1994. Vol. 13, no. 3. P. 177–187.

99. *Harrison D. E., Johnson J. P., Levy N. S.* Spot patterns and Silsbee chains on a Cu single crystal // *Appl. Phys. Lett.* 1966. Vol. 8, no. 2. P. 33–36.
100. *Harrison D. E.* Additional information on “Computer Simulation of Sputtering” // *J. Appl. Phys.* 1969. Vol. 40, no. 9. P. 3870–3872.
101. *Harrison D. E., Moore W. L., Holcombe H. T.* Computer simulation of sputtering II // *Radiat. Eff.* 1973. Vol. 17, no. 3–4. P. 167–183.
102. *Harrison D. E. et al.* Low energy ion impact phenomena on single crystal surfaces // *Surf. Sci.* 1978. Vol. 76, no. 2. P. 311–322.
103. *Shapiro M. H. et al.* Computer-simulated energy and angular distributions of sputtered Cu atoms // *Radiat. Eff.* 1985. Vol. 89, no. 3–4. P. 243–255.
104. *Bohdansky J. et al.* Sputtering yield of Cu and Ag at target temperatures close to the melting point // *Nucl. Instr. Meth. B.* 1986. Vol. 18, no. 1–6. P. 509–514.
105. *Евдокимов И. Н. и др.* Влияние тепловых колебаний кристаллической решетки на анизотропию коэффициентов распыления и ионно-электронной эмиссии монокристаллов // *Докл. АН СССР.* 1967. Т. 177, № 3. С. 550–553.
106. *Бокштейн Б. С. и др.* Изучение фактора Дебая-Валлера вблизи температуры фазового перехода первого рода в кобальте // *ЖЭТФ.* 1973. Т. 64, № 2. С. 553–556.
107. *Chernysh V. S., Johansen A., Sarholt-Kristensen L.* Sputtering yield measurements on H.C.P. and F.C.C. cobalt // *Radiat. Eff. Lett.* 1981. Vol. 57, no. 4. P. 119–124.
108. *Chernysh V. S., Johansen A., Sarholt-Kristensen L.* Sputtering yield measurements on single crystal cobalt // *Nucl. Instr. Meth.* 1981. Vol. 191, no. 1–3. P. 253–258.
109. *Sarholt-Kristensen L. et al.* Sputtering on cobalt with noble gas ions // *Nucl. Instr. Meth.* 1983. Vol. 209–210. P. 543–548.
110. *Андреев А. А.* Аномалии температурной и угловой зависимости выхода вторичных частиц при ионной бомбардировке металлов : дисс. канд.

- физ.-мат. наук / А. А. Андреев ; МГУ им. М. В. Ломоносова. Физ. фак. Москва. 1984.
111. *Samoylov V. N. et al.* Simulation of ion transmission and sputtering for hcp and fcc cobalt crystals // *Nucl. Instr. Meth. B.* 1986. Vol. 18, no. 1–6. P. 243–252.
 112. *Самойлов В. Н.* Исследование эмиссии и проникновения атомных частиц при ионной бомбардировке монокристаллов : дисс. канд. физ.-мат. наук / В. Н. Самойлов ; МГУ им. М. В. Ломоносова. Физ. фак. Москва. 1984.
 113. *Юрасова В. Е. и др.* Изменение распыления монокристалла при переходе через точку Кюри // *ЖЭТФ, Письма.* 1975. Т. 21, № 3. С. 197–199.
 114. *Dziurda W. et al.* Phase transition on a Ni (111) surface in the presence of oxygenous environment // *Surf. Sci. Lett.* 1981. Vol. 105, no. 2–3. P. L277–L280.
 115. *Konov D. A. et al.* Angular dependence of sputtering for nickel in ferro and paramagnetic states // *Vacuum.* 2001. Vol. 64, no. 1. P. 47–53.
 116. *Chernysh V. S., Kuvakin M. V., Yurasova V. E.* Sputtering and secondary ion emission of ferromagnetics near Curie-point // In: *Physics of Ionized Gases. Proc. of contr. papers of VIII Int. Summer School and Symposium.* Dubrovnik, 1976. P. 245.
 117. *Черныш В. С.* Температурные эффекты при взаимодействии ионных пучков с монокристаллами : дисс. канд. физ.-мат. наук / В. С. Черныш ; МГУ им. М. В. Ломоносова. Физ. фак. Москва. 1976.
 118. *Eltekov V. A. et al.* Computer calculations of secondary particle emission near the Curie point in nickel // In: *Atomic Collisions in Solids. Abstr. of 11th Int. Conf. Washington, 1985.* P. PB–12.
 119. *Ананьева Н. Г., Матвеев А. Н., Самойлов В. Н.* Об изменении эмиссии атомов с поверхности монокристалла никеля при магнитном фазовом переходе // *Вестник Моск. ун-та. Сер. 3. Физика. Астрономия.* 1989. Т. 30, № 6. С. 63–68.

120. *Кувакин М. В.* Некоторые задачи теории распыления : дисс. канд. физ.-мат. наук / М. В. Кувакин ; МГУ им. М. В. Ломоносова. Физ. фак. Москва. 1979.
121. *Самойлов В. Н., Эльтеков В. А., Юрасова В. Е.* Расчет распыления монокристалла никеля при магнитном фазовом переходе // *Вестник Моск. ун-та. Сер. 3. Физика. Астрономия.* 1986. Т. 27, № 2. С. 87–89.
122. *Кувакин М. В., Харламовичкин Е. С., Бачурин В. И.* Изменение межатомного потенциала взаимодействия в гадолинии при магнитном фазовом переходе // *Поверхность.* 1982. № 3. С. 89–92.
123. *Харламовичкин Е. С.* Кинетика распыления аморфного и кристаллического вещества : дисс. канд. физ.-мат. наук / Е. С. Харламовичкин ; МГУ им. М. В. Ломоносова. Физ. фак. Москва. 1983.
124. *Sigmund P.* Recollections of fifty years with sputtering // *Thin Solid Films.* 2012. Vol. 520, no. 19. P. 6031–6049.
125. *Shulga V. I., Sigmund P.* Simulation of energy-dependent isotope sputtering // *Nucl. Instr. Meth. B.* 1995. Vol. 103, no. 3. P. 383–386.
126. *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.
127. *Самойлов В. Н. и др.* 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.
128. *Shulga V. I.* Ejection of fast recoils under ion bombardment of crystals // *Radiat. Eff.* 1980. Vol. 51, no. 1–2. P. 1–10.
129. *Harrison D. E., Gay W. L., Effron H. M.* Algorithm for the calculation of the classical equations of motion of an N-body system // *J. Math. Phys.* 1969. Vol. 10, no. 7. P. 1179–1184.

130. *Рананорт Д. К.* Искусство молекулярной динамики. Москва : Ижевск, НИЦ “Регулярная и хаотическая динамика”, 2012. С. 630. ISBN: 978-5-4344-0083-1.
131. *Kornich G. V., Betz G.* MD simulation of atomic displacements in pure metals and metallic bilayers during low energy ion bombardment at 0 K // *Nucl. Instr. Meth. B.* 1998. Vol. 143, no. 4. P. 455–472.
132. *Kornich G. V., Betz G., Bazhin A. I.* MD simulation of atomic displacements in metals and metallic bilayers under low energy ion bombardment at 300 K // *Nucl. Instr. Meth. B.* 1999. Vol. 153, no. 1–4. P. 383–390.
133. *Gao F., Bacon D. J., Ackland G. J.* Point-defect and threshold displacement energies in Ni₃Al. I. Point-defect properties // *Phil. Mag. A.* 1993. Vol. 67, no. 2. P. 275–288.
134. *Gao F., Bacon D. J.* Point-defect and threshold displacement energies in Ni₃Al. II. Events at the displacement threshold // *Phil. Mag. A.* 1993. Vol. 67, no. 2. P. 289–306.
135. *Bacon D. J., Deng H. F., Gao F.* Computer simulation of threshold displacement events in alloys // *J. Nucl. Mater.* 1993. Vol. 205. P. 84–91.
136. *Karetta F., Urbassek H. M.* Molecular-dynamics simulations of bulk and surface damage production in low-energy Cu→Cu bombardment // *J. Appl. Phys.* 1992. Vol. 71, no. 11. P. 5410–5418.
137. *Betz G. et al.* Low primary ion fluence dependence of single crystal sputtering: a molecular dynamics study // *Nucl. Instr. Meth. B.* 1991. Vol. 58, no. 3–4. P. 429–437.
138. VMD (Visual Molecular Dynamics) code. Access mode: <http://www.ks.uiuc.edu/Research/vmd/> (online; accessed: April 3, 2023).
139. *Humphrey W., Dalke A., Schulten K.* VMD – Visual Molecular Dynamics // *Journal of Molecular Graphics.* 1996. Vol. 14, no. 1. P. 33–38.
140. *Самойлов В. Н., Дехтяр К. В.* О некоторых новых особенностях распыления грани (111) Ni с одновременным угловым и энергетическим разреше-

- нием // *Известия РАН. Серия физическая*. 2001. Т. 65, № 9. С. 1324–1327.
141. *Воеводин В. В. и др.* Практика суперкомпьютера “Ломоносов” // *Открытые системы*. 2012. № 7. С. 36–39.
142. *Sadovnichy V. et al.* Supercomputing at Moscow State University // In: *Contemporary High Performance Computing: From Petascale toward Exascale*. Chapman & Hall/CRC Computational Science. Boca Raton, USA : CRC Press, 2013. P. 283–307.
143. *Voevodin V. V. et al.* Supercomputer Lomonosov-2: Large scale, deep monitoring and fine analytics for the user community // *Supercomp. Front. Innov.* 2019. Vol. 6, no. 2. P. 4–11.

Список сокращений и условных обозначений

- θ — полярный угол наблюдения распыленного атома
- θ_0 — начальный полярный угол эмиссии атома из узла
- θ_i — полярный угол атома после рассеяния на ближайших соседях, до преодоления потенциального барьера
- φ — азимутальный угол наблюдения распыленного атома
- φ_0 — начальный азимутальный угол эмиссии атома из узла
- φ_i — азимутальный угол атома после рассеяния на ближайших соседях, до преодоления потенциального барьера
- E — энергия наблюдения распыленного атома
- E_0 — начальная энергия эмиссии атома из узла
- E_b — поверхностная энергия связи, также высота потенциального барьера
- E_i — энергия атома после рассеяния на ближайших соседях, до преодоления потенциального барьера
- F — функция распределения распыленных атомов
- F_0 — начальная функция распределения эмитированных атомов
- m — параметр жесткости взаимодействия атомов, см. (1.11), стр. 25
- Y — коэффициент распыления
- Z — атомный номер вещества мишени
- SIMS — масс-спектрометрия вторичных ионов
- SNMS — масс-спектрометрия распыленных нейтральных атомов
- ToF — времяпролетный метод

Словарь терминов

Атомы, перефокусированные — распыленные атомы, которые наблюдаются в азимутальном направлении, противоположном относительно центра линзы азимутальному направлению эмиссии **39**

Атомы, сильно блокированные — распыленные атомы, для которых отклонение по полярному углу за счет блокировки больше, чем отклонение в противоположную сторону за счет преломления на потенциальном барьере **33**

Атомы, собственные — распыленные атомы, для которых азимутальный угол наблюдения близок к начальному азимутальному углу эмиссии **38**

Атомы, фокусированные — распыленные атомы, которые наблюдаются в азимутальном направлении с той же стороны линзы, что и азимутальное направление эмиссии **39**

Блокировка — отклонение по полярному углу в направлении нормали к поверхности **32**

Каскад столкновений — пространственная область под поверхностью кристалла, в которой атомы смещаются из равновесных положений из-за падения бомбардирующего иона **12**

Линза — два атома поверхности, при рассеянии на которых наблюдается эффект фокусировки **32**

Механизмы, каскадные — механизмы, объясняющие структуру распределения распыленных атомов столкновительными эффектами в каскаде **16**

Механизмы, поверхностные — механизмы, объясняющие структуру распределения распыленных атомов их взаимодействием с поверхностью **17**

Многозначность — эффект, при котором атомы, наблюдаемые в одном и том же интервале углов, имеют существенно разные начальные углы, либо наоборот **57**

Область тени — множество значений параметров распределения, для которых нет распыленных атомов **53**

Пятна Венера — максимумы двумерного углового распределения атомов, распыленных с поверхности монокристалла **12**

Распыление — удаление атомов с поверхности мишени при бомбардировке ионами **11**

Фокусировка — отклонение траектории эмитируемого атома при рассеянии на линзе из двух атомов поверхности **33**

Хребет — максимум в двумерном распределении **53**

Благодарности

Благодарение Пресвятой Троице, потому что *всякая премудрость — от Господа* (Сир. 1:1). *Как премудро Ты все сотворил* (Пс. 103:24)!

Автор благодарит своего научного руководителя доц. В. Н. Самойлова за воспитание в стенах *Alma mater*, за неоценимую помощь в постановке задачи и обсуждение результатов диссертационного исследования. Автор также благодарен своему старшему коллеге, д.ф.-м.н., проф. Г. В. Корничу, за помощь и неоценимые советы. Хочется выразить благодарность и д.ф.-м.н., проф. В. А. Жачкину за интерес к работе и поддержку во время обучения в аспирантуре.

Работа выполнена с использованием оборудования Центра коллективного пользования сверхвысокопроизводительными вычислительными ресурсами МГУ имени М.В. Ломоносова [141–143] — суперкомпьютеров Ломоносов-1 и Ломоносов-2. Автор благодарит руководителя ЦКП МГУ, член-корреспондента РАН, д.ф.-м.н., проф. В. В. Воеводина за предоставленные ресурсы, без которых выполнение диссертационного исследования было бы невозможным.

За административную поддержку исследования автор благодарен к.ф.-м.н., доц. Н. Н. Барабановой и к.пед.н., доц. С. А. Холиной, благодаря им удалось решить многие организационные вопросы.

За доступ к источникам автор благодарит Российскую государственную библиотеку и Фундаментальную библиотеку МГУ. Отдельное спасибо МАГАТЭ (Международному агентству по атомной энергии) за добавление в базу данных INIS (<http://inis.iaea.org>) в открытый доступ оцифрованной диссертации [40], которая содержит важные экспериментальные результаты, подтверждающие расчеты автора.

За материальную поддержку автор благодарит своих родителей.

За моральную поддержку автор благодарит свою супругу, всех членов своей семьи, друзей и коллег, духовенство и прихожан домового храма МГОПУ во имя Пресвятой Троицы и храма во имя св. Патриарха Тихона в г. Московском.