

КРАТКИЕ СООБЩЕНИЯ

УДК 537.534

DOI: 10.17223/00213411/68/7/13

**Влияние атомов поверхности грани (001) Au
на коэффициент ионного распыления:
сравнение с теорией Зигмунда**А.И. Мусин^{1,2}, В.Н. Самойлов³¹Вятский государственный университет, г. Киров, Россия²Московский государственный технологический университет «СТАНКИН», г. Москва, Россия³Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова, г. Москва, Россия

Исследовано влияние атомов поверхности грани (001) Au на коэффициент распыления. Показано, что чем большее количество атомов окружения возле эмитируемого атома учитывается, тем выше коэффициент распыления по сравнению с предсказанием классической теории распыления Зигмунда. Увеличение вероятности распыления и коэффициента распыления на ~40% связано с увеличением числа рассеивающих центров, на которых происходит рассеяние эмитируемого атома с отклонением в сторону нормали к поверхности, вследствие этого возрастает число распыленных эмитируемых атомов, преодолевших плоский потенциальный барьер. Результат показывает, что эффект надповерхностного рассеяния вносит значительный вклад в распыление.

Ключевые слова: ионное распыление, теория Зигмунда, поверхностные модели распыления, молекулярная динамика, коэффициент распыления, плоский потенциальный барьер.

Падение ускоренных ионов на поверхность твердого тела вызывает ионное распыление, которое количественно характеризуется коэффициентом распыления Y , равным отношению числа распыленных атомов к числу упавших ионов. На основе уравнений переноса П. Зигмундом была создана теория распыления для аморфных и поликристаллических мишеней [1], в рамках которой можно вычислить Y .

В теории Зигмунда последняя стадия распыления, на которой происходит эмиссия атома с поверхности кристалла, описывается исключительно с помощью потенциального барьера, при пересечении которого преобразовываются энергия и импульс атома. Однако это описание является слишком упрощенным, поскольку не учитываются затраты энергии при рассеянии на соседних атомах поверхности (которые могут превышать энергию связи [2]) и отклонение эмитируемого атома в направлении нормали к поверхности за счет такого рассеяния.

Пусть E_0 , θ_0 , φ_0 – начальная энергия, полярный и азимутальный углы вылета эмитируемого атома при пересечении им поверхности кристалла, E , θ , φ – энергия, полярный и азимутальный углы наблюдения атома (на бесконечности). Если потенциальный барьер является плоским, то в теории Зигмунда будет:

$$E = E_0 - E_b,$$
$$\cos \theta = \sqrt{\frac{E_0 \cos^2 \theta_0 - E_b}{E_0 - E_b}},$$
$$\varphi = \varphi_0.$$

Однако при учете дискретной поверхности кристалла энергия и углы меняются более сложным образом.

В настоящей работе была рассмотрена эмиссия атомов с поверхности грани (001) Au, имеющего ГЦК-структуру, с помощью 4 моделей, аналогичным модели из [3]. Атомы эмитировались только в азимутальном направлении $\langle 010 \rangle$ на центр линзы из двух ближайших атомов поверхности, с начальными энергиями E_0 от 0.5 до 100 эВ с шагом 0.01 эВ, с полярными углами θ_0 от 0° до 90° с шагом $1/450$ по $\cos \theta_0$ – около 4.5 млн испытаний.

Расчет траекторий эмитированных атомов происходил с помощью метода молекулярной динамики (МД). Взаимодействие эмитируемого атома с атомами окружения описывалось отталкивающим потенциалом Борна – Майера. Притяжение эмитируемого атома к поверхности описывалось плоским потенциальным барьером высоты $E_b = 3.78$ эВ. Атомы, преодолевшие потенциальный барьер, считались распыленными.

Модель I содержала, кроме эмитируемого атома, 4 ближайших атома первого слоя, в модели II к 4 ближайшим атомам первого слоя добавлялись 4 ближайших атома второго слоя (итого 8 атомов окружения). Модель III содержала 20 атомов окружения из первого слоя, как в [3], в модели IV число атомов окружения