

М. Ю. Т о л п и н а (Москва, МГГУ). **Молекулярно-динамический расчет пространственных и энергетических распределений частиц, распыленных из монокристалла $NiPd$.**

Расчет распыления грани (001) монокристалла $NiPd$ проводился по молекулярно-динамическому методу с подвижным блоком атомов в полубесконечной среде (см. [1], [2]). В каждый момент времени рассматривалось взаимодействие движущейся частицы (энергия которой была больше энергии обрезания потенциала взаимодействия) с атомами мишени. При смене ближайшего к иону атома мишени происходила перестройка блока. Поскольку процесс распыления атома протекает очень короткое время, нестабильность блока атомов не успевала проявиться. Уравнения движения интегрировались с использованием модифицированной схемы Эйлера предиктор-корректор, которая является стабильной. Постоянная решетки d и энергия связи $E_{св}$ брались из экспериментальных данных: $d = 3,72 \text{ \AA}$, $E_{св} = 4,20 \text{ эВ}$ [3]. Был выбран потенциал взаимодействия: $U(r) = A_{bm} \exp\{-r/a_{bm}\} + (A_b/r) \exp\{-2r/a_{bm}\}$, где $A_{bm} = 52(Z_1 Z_2)^{3/4}$, $a_{bm} = 0,219 \text{ \AA}$, $A_b = k(Z_1 Z_2 e^2)$, Z_1 и Z_2 — атомные номера иона и атома мишени, r — радиус-вектор, k — подгоночный параметр порядка единицы.

Для монокристаллов бинарных соединений пространственное распределение распыленных частиц впервые изучалось в [4] для *упорядоченных* монокристаллов $A^{III}B^V$ ($InSb$ и $GaAs$). Было обнаружено, что компоненты A и B распыляются в различных плотноупакованных направлениях. Это явление было названо «анизотропией пространственного распределения распыленных частиц по направлению и по составу». Недавно тот же эффект был обнаружен при молекулярно-динамическом моделировании распыления кристаллов BN [5]. Задача исследования распыления для монокристалла неупорядоченного бинарного соединения впервые поставлена в работе, представленной данным сообщением, где рассчитаны характеристики распыления грани (001) $NiPd$ ионами Ar с энергией $E_0 = 0,1 \div 5 \text{ кэВ}$.

Полярное распределение в плоскости (100) частиц, распыленных с грани (001) $NiPd$, показано на рис. 1. Для $E_0 = 5 \text{ кэВ}$ преимущественный выход атомов, как Ni , так и Pd , происходит в двух направлениях $\langle 011 \rangle$ и в $[001]$ (рис. 1 а, б). При $E_0 = 100 \text{ эВ}$ распыление идет только в направлениях $\langle 011 \rangle$. В случае неизменного состава $NiPd$ эмиссия Ni в направлениях $\langle 011 \rangle$ существенно больше, чем Pd (рис. 1 а). Для указанного выше изменения состава трех верхних слоев (когда верхний слой грани (001) содержит 80% Pd) наблюдается преимущественное распыление Pd (рис. 1 б, в) — наибольшее для малой энергии облучающих ионов; при этом распределение для атомов Pd шире, чем для Ni , и несколько сдвинуто в сторону больших углов вылета.

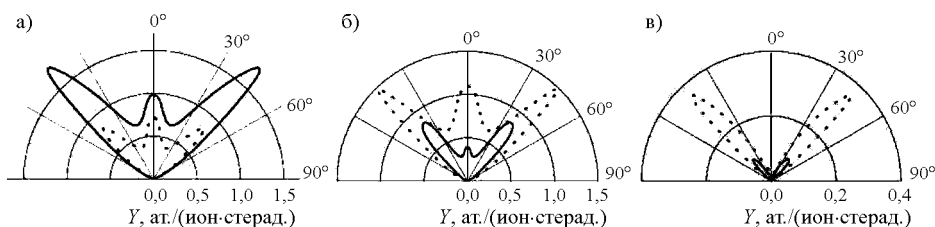


Рис. 1. Полярное распределение в плоскости (100) атомов Ni (сплошная кривая) и Pd (пунктир), распыленных с грани (001) $NiPd$ для нормального падения ионов Ar с энергией: $E_0 = 5 \text{ кэВ}$ (а, б) и $E_0 = 0,1 \text{ кэВ}$ (в) при неизменном составе поверхности (а) и с перестройкой поверхностных слоев (б, в)

Результат расчета углового распределения $Ni + Pd$ и энергии распыленных частиц Ni и Pd для грани (001) $NiPd$, облученной ионами Ar с $E_0 = 100 \text{ эВ}$, показан на рис. 2.

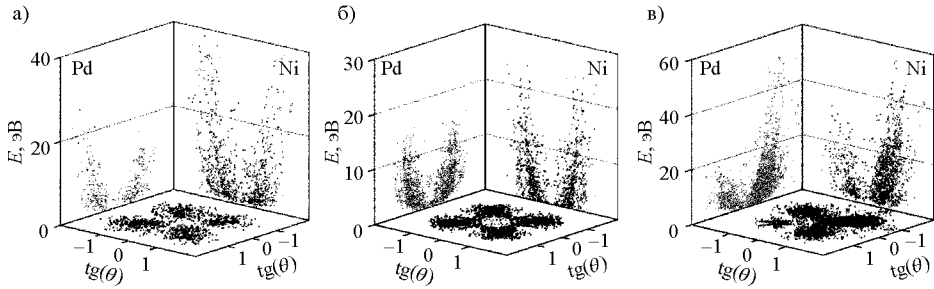


Рис. 2. Картины пятен распыления для $Ni + Pd$ (горизонтальная плоскость) и энергия распыленных частиц Ni и Pd (вертикальные плоскости) при бомбардировке грани (001) $NiPd$ ионами Ar^+ с энергией $E_0 = 100$ эВ: (а) для неизменного состава поверхности и (б, в) с перестройкой поверхностных слоев; (а, б) при нормальном падении ионов, $\alpha = 0^\circ$, и (в) при $\alpha = 40^\circ$

Четко проявляются пятна распыления в четырех плотноупакованных направлениях $\langle 110 \rangle$. Распыление больше для перестроенной поверхности, поскольку в этом случае, при малой энергии облучающих ионов, в основном выходят образующие верхний слой атомы Pd , для которого коэффициент распыления больше, чем для Ni . При $\alpha = 40^\circ$ превалирует выход частиц в направлении $[110]$ вблизи зеркального угла отражения. Для нормального падения ионов быстрых распыленных частиц больше для Ni , чем для тяжелых атомов Pd .

Картины пятен и энергия выходящих частиц при облучении ионами Ar с $E_0 = 5$ кэВ приведены на рис. 3. Появляется центральное пятно, соответствующее направлению $[001]$, куда вылетают более быстрые частицы (рис. 3 а, б). Интересно, что в отличие от случая облучения медленными ионами, распыление здесь меньше для перестроенной поверхности, чем для неизменной. Это можно также заключить из энергетической зависимости коэффициентов распыления для $NiPd$, показанной на рис. 3 в, где распыление перестроенной поверхности больше, чем неизменной, только для медленных ионов.

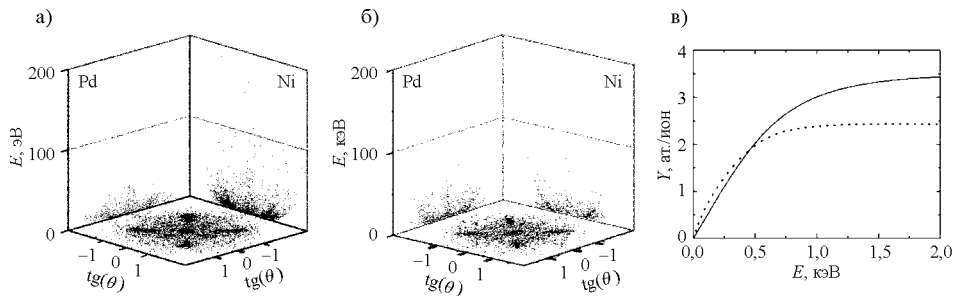


Рис. 3. То же, что на рис. 2, но при $E_0 = 5$ кэВ, $\alpha = 0^\circ$: (а) для неизменного состава поверхности и (б) с перестройкой поверхностных слоев; (в) энергетическая зависимость коэффициентов распыления Ni и Pd с грани (001) $NiPd$, Ar , $\alpha = 0^\circ$, при перестройке верхних слоев (...) и без нее (—)

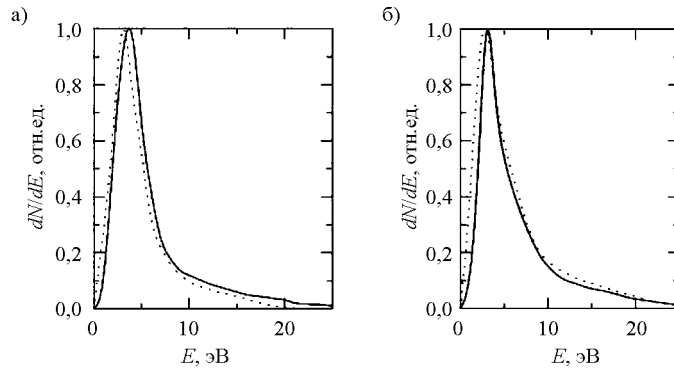


Рис. 4. Энергетические распределения атомов Ni (сплошная кривая) и Pd (пунктир), распыленных с грани (001) $NiPd$ для нормального падения ионов Ar с энергией $E_0 = 100$ эВ: (а) при неизменном составе поверхности и (б) с перестройкой поверхностных слоев

Энергетические распределения атомов Ni и Pd , распыленных ионами Ar с энергией 100 эВ, приведены на рис. 4. Спектр для более тяжелых частиц Pd немного сдвинут в сторону меньших энергий как для поверхности с перестройкой, так и без нее. При неизменном составе спектры Ni и Pd более узкие, чем для перестроенных слоев. В последнем случае энергетическое распределение Pd шире, чем для Ni (рис. 4 б).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Promokhov A. A., Eltekov V. A., Yurasova V. E., Colligon J., Mosunov A. S.* NIMB 1996, v. 115, p. 544.
2. *Юрасова В. Е.* Взаимодействие ионов с поверхностью. М: ПримаВ, 1999, 640 с.
3. *Харрисон У.* Электронная структура и свойства твердых тел. Т. 1. М: Мир, 1983.
4. *Юрасова В. Е., Левыкина Л. Н., Бржезинский В. А.* Известия АН СССР, сер. физ., 1964, т. 28, с. 1441.
5. *Юрасова В. Е., Промохов А. А., Зыкова Е. Ю., Еловиков С. С.* — Поверхность, 2007, № 6, с. 38.