

УДК 537.534

© 1997 г. **КОРСАКОВА О.С., АЛЕШКЕВИЧ В.А., САМОЙЛОВ В.Н.,
НИКИТИН А.М.**

ИССЛЕДОВАНИЯ ПОВЕРХНОСТНОГО МЕХАНИЗМА ФОКУСИРОВКИ АТОМОВ, ЭМИТИРУЕМЫХ С ПОВЕРХНОСТИ ГРАНИ (001) Ni, МЕТОДОМ МОЛЕКУЛЯРНОЙ ДИНАМИКИ

Методом молекулярной динамики исследованы закономерности фокусировки распыленных атомов в процессе эмиссии с поверхности. Выявлены механизмы фокусировки по полярному и азимутальному углам и показана их роль в формировании анизотропии двумерного углового распределения распыленных частиц. Доказана доминирующая роль линз, состоящих из двух атомов – ближайших к вылетающему атому соседей в плоскости поверхности, в формировании максимумов эмиссии, выяснен механизм сдвига максимума полярного углового распределения распыленных атомов с ростом энергии наблюдения. Показано, что в азимутальных направлениях между максимумами эмиссии полярное угловое распределение эмитированных атомов определяется взаимодействием вылетающего атома с одним атомом – ближайшим соседом в плоскости поверхности.

Введение

В двумерном угловом распределении атомов, распыленных с поверхности низкоиндексных граней монокристалла под действием ионной бомбардировки, наблюдаются максимумы эмиссии [1, 2] (см. также обзор [3] и приведенные в нем ссылки). Обнаружение этих максимумов – так называемых пятен Венера – в работе [1] вызвало всплеск интереса к изучению процесса распыления и интенсивную полемику по поводу фундаментальных механизмов, ответственных за распыление атомов с поверхности.

Предложенный Силсби [4] механизм формирования пятен Венера основывался на возможности вклада в распыление в направлениях плотной упаковки фокусированных цепочек столкновений, или фокусонсов. При этом предполагалось, что фокусонсы зарождаются на глубине во много атомных слоев от поверхности и позволяют эффективно передать импульс с этой глубины вдоль плотноупакованных направлений кристаллической решетки эмитируемым атомам. Этот механизм был исследован с помощью методов моделирования на ЭВМ в целом ряде работ для энергий падающих ионов в десятки кэВ [5–7] и единицы кэВ [8–10]. Однако, этот механизм не мог, по-видимому, объяснить образование максимумов эмиссии, наблюдаемых в угловых распределениях, полученных в экспериментах, в которых поверхность бомбардировалась низкоэнергетичными ионами (см. эксперименты [1, 2], в которых энергия ионов составляла десятки эВ). Это связано с тем, что в низкой энергии иона, которая быстро распределяется по атомам отдачи, оказывается не достаточно для генерации фокусированной цепочки столкновений из достаточно глубоких слоев, приводящей к распылению, ввиду того, что у эмитируемого с поверхности вследствие распространения фокусона атома не хватает энергии, чтобы преодолеть поле сил притяжения к поверхности в процессе вылета.

Приблизительно десятилетие спустя после выхода работы [4] Леманом и Зигмундом [11], а также Харрисоном [12] было сделано предположение, что образование максимумов эмиссии не обязательно связано с распространением фокусированных цепочек столкновений, а обусловлено упорядоченным расположением атомов нескольких приповерхностных атомных слоев. К середине 1970-х годов образование этих максимумов связывалось с рядом механизмов: Силсби, или фокусонным [4], Лемана–Зигмунда [11], линзовой фокусировки [13]. В работе [14] эти механизмы были названы каскадными механизмами фокусировки. В работах [2, 15] было показано, что существует отличный от каскадных механизм фокусировки (в [14] он был назван поверхностным механизмом), согласно которому изотропный поток атомов, эмитируемых из узла на поверхности монокристалла, фокусируется в тех направлениях, в которых экспериментально наблюдаются максимумы эмиссии распыленных атомов.

Современные экспериментальные исследования распыления вышли на уровень изучения угловых распределений распыленных атомов с энергетическим разрешением. На этот же уровень вышли и исследования распыления методом моделирования на ЭВМ [16, 17]. В работе [17] предложена другая классификация механизмов эмиссии по тому признаку, взаимодействие с атомом какого слоя сыграло доминирующую роль в эмиссии распыленного атома. В частности, в [17] отмечалось, что механизм, включающий столкновение эмитируемого атома с атомом того же слоя, является определяющим в формировании наблюдаемого экспериментального сдвига максимума углового распределения с ростом энергии наблюдения. В работе [18] был рассчитан вклад в распыление коррелированных цепочек столкновений и было показано (см. также [17]), что для ионной бомбардировки грани (001) ГЦК-монокристаллов даже ионами кэВ-ных энергий вклад этих цепочек в распыление не превышает 10%.

В ряде наших работ изучались эффекты, обусловленные атомной дискретностью поверхности на стадии эмиссии: эффект блокировки и его роль в формировании угловых распределений распыленных атомов [19] и поверхностный механизм фокусировки эмитируемых атомов [20, 21]. Было показано (см. работы [19–22]), что на стадии эмиссии происходит сильное перераспределение вылетающих атомов по углам и энергиям, такое, что, по-видимому, стадия эмиссии дает доминирующий вклад в формирование углового и энергетического распределений распыленных атомов.

Как было показано в работе [23], в которой было проведено компьютерное моделирование распыления методом молекулярной динамики, при бомбардировке поверхности грани (001) Ni ионами Ar^+ с начальными энергиями в диапазоне 50–250 эВ в угловых распределениях атомов Ni, пересекающих поверхность кристалла (построенных только для атомов, позднее распыленных), не наблюдается ожидаемых максимумов в направлениях $\langle 011 \rangle$ (см. рис. 1 работы [23]). В то же время, во внешнем (наблюдаемом) двумерном угловом распределении распыленных атомов максимумы расположены вблизи направлений $\langle 011 \rangle$ в хорошем согласии с экспериментальными данными, полученными для таких же малых энергий бомбардирующих ионов 50–100 эВ (см., например, [2]). Таким образом, возникают сомнения относительно роли фокусонного механизма в формировании анизотропии углового распределения распыленных атомов при бомбардировке поверхности ионами сравнительно низких энергий. Анализ полученных результатов приводит к заключению, что каскадные механизмы фокусировки (включая фокусонный механизм [4] и механизм Лемана–Зигмунда [11]), по-видимому, не являются доминирующими при формировании наблюдаемой анизотропии углового распределения распыленных атомов.

Отдельно в работе [23] был изучен механизм фокусировки распыленных атомов на стадии эмиссии атомов из узла решетки на поверхности грани (001) Ni. Было обнаружено, что сильное перераспределение потока атомов по углам эмиссии на стадии вылета обеспечивает формирование наблюдаемых экспериментально максимумов даже для случаев изотропного и пропорционального $\cos\vartheta_0$ начальных распределений атомов, эмитируемых из узла на поверхности мишени, без полного моделирования процесса распыления атомов, то есть без моделирования падения ионов на рассмат-

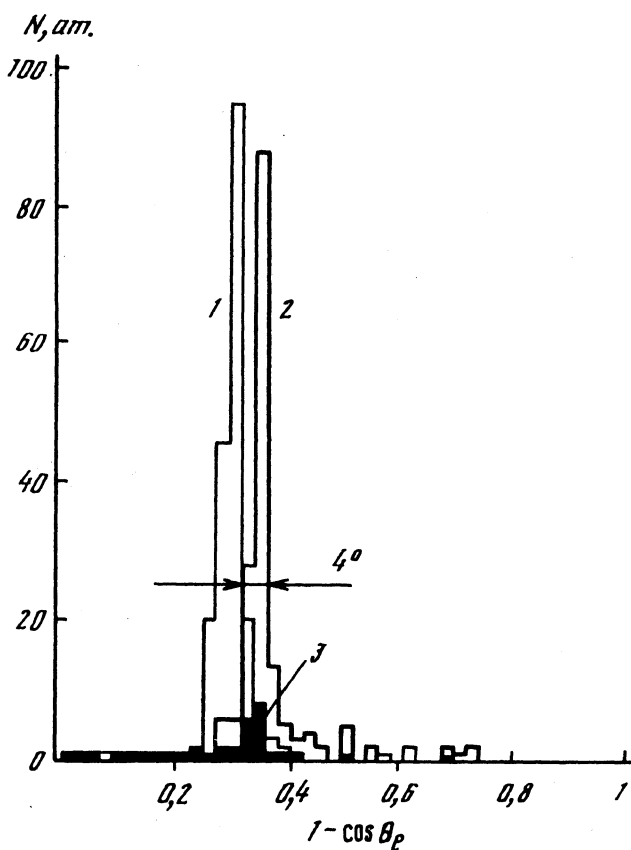


Рис. 1. Распределения числа эмитированных атомов по $1 - \cos \vartheta_e$ (ϑ_e – конечный полярный угол вылета, отсчитываемый от нормали) для интервала азимутальных углов наблюдения φ_e $[-1,5^\circ, 1,5^\circ]$ и начальных энергий $E_0 = 20$ эВ (1) и 15 эВ (2); распределение "собственных" по азимутальному углу эмитированных атомов по $1 - \cos \vartheta_e$ для того же интервала углов φ_e и начальной энергии $E_0 = 15$ эВ (3). Расчет по модели I. Начальное распределение атомов, эмитируемых из узла на поверхности грани (001) монокристалла Ni было изотропным и равнялось 1 атому

риваемую грань (полное моделирование процесса распыления поверхности грани (001) Ni в ферромагнитном и парамагнитном состояниях ионами Ar^+ с энергией 200 эВ было проведено также в работе [24]). Также было показано, что фокусировка по обоим – полярному и азимутальному – углам является существенной для того, чтобы наблюдалась высокая эффективность фокусировки, наблюдаемая в [23].

До настоящего времени остается не вполне ясной роль поверхности в формировании углового и энергетического распределений атомов, распыленных с поверхности кристалла под действием ионной бомбардировки. Выяснение этого вопроса сталкивается со значительными трудностями, связанными с рассмотрением прохождения каскадом столкновений границы твердое тело–вакуум. Эти трудности в значительной мере связаны с необходимостью рассмотрения процесса на уровне моделей с атомной дискретизацией поверхности на стадии вылета [19, 25]. Кроме того, для низких энергий эмитируемых атомов необходимым становится учет коллективного одновременного взаимодействия вылетающего атома с атомами кристалла [26].

В настоящей работе мы представляем детальное исследование механизмов фокусировки атомов в процессе их эмиссии с поверхности грани (001) монокристалла Ni (компьютерное моделирование методом молекулярной динамики).

Рассчитывалась эмиссия атомов из узла на поверхности грани (001) монокристалла Ni с использованием модели молекулярной динамики. Были использованы две модели. В рамках модели I кристалл моделировался с помощью блока, состоящего из 343 атомов, расположенных в 5 слоях, параллельных грани (001). В качестве потенциала взаимодействия атом-атом был использован потенциал Морзе:

$$U(r) = D \{ \exp(-2\alpha(r - r_0)) - 2\exp(-\alpha(r - r_0)) \}$$

с параметрами $D = 0,4205$ эВ, $\alpha = 1,4199 \text{ \AA}^{-1}$, $r_0 = 2,780 \text{ \AA}$ (параметры, входящие в этот потенциал, были рассчитаны в работе [27]). Использование такого потенциала позволило исследовать эмиссию атомов в реальном поле отталкивания-притяжения у поверхности кристалла (в отличие от подхода, развитого в ряде наших предыдущих работ, например, [19–22], где эмиссия моделировалась с использованием потенциала отталкивания, а притяжение атома к кристаллу заменялось действием плоского потенциального барьера). Тепловые колебания атомов в модели не учитывались.

Атом выбивался с начальной энергией E_0 под углами ϑ_0 и ϕ_0 (угол ϑ_0 отсчитывался от нормали к поверхности, угол ϕ_0 – от направления (010) в плоскости поверхности). Значения E_0 для расчетов были выбраны от 7 эВ до 100 эВ. Интегрирование уравнений движения проводилось методом "средней силы" [28]. Вычисления проводились до тех пор, пока атом не достигал расстояния $8 \text{ \AA}$ от поверхности (до таких расстояний идет изменение углов вылета и энергии эмитируемого атома вследствие взаимодействия с поверхностью из-за дальнего действия характера потенциала Морзе). Здесь для атома рассчитывались углы ϑ_e и ϕ_e – углы наблюдения. Критерием для выбора шага интегрирования служило сохранение суммарной механической энергии всей системы взаимодействующих частиц. Шаг по расстоянию был обычно равен $0,1 \text{ \AA}$. При этом суммарная энергия сохранялась с точностью, лучше 1%.

Для фиксированного значения E_0 угол ϑ_0 изменялся от 0° до 90° , шаг по $1 - \cos\vartheta_0$ был равен $1/45$, угол ϕ_0 изменялся от 0° до 360° , шаг по ϕ_0 составлял 3° , то есть для каждого значения E_0 был рассчитан изотропный вылет 5401 атома из узла на поверхности в верхнюю полусферу. Таким образом, был рассмотрен идеальный случай, в котором не учитывалась анизотропия углового распределения эмитируемых частиц, связанная с действием каскадных механизмов фокусировки. Кроме того, было использовано начальное распределение эмитируемых атомов по углам вылета, пропорциональное $\cos\vartheta_0$.

Кроме модели, описанной выше, была также использована модель II, в рамках которой взаимодействие атомов, как и в ряде наших предыдущих работ, описывалось только потенциалом отталкивания, а на достаточно большом удалении атома от поверхности был введен плоский потенциальный барьер. В качестве потенциала межатомного взаимодействия был использован потенциал Борна–Майера:

$$U(r) = A \exp\{-r/b\}$$

с параметрами $A = 23853,96$ эВ и $b = 0,196 \text{ \AA}$ из работы [29]. Использование потенциала отталкивания и последующий учет потенциального барьера, моделирующего действие сил притяжения, позволили разделить вклады в фокусировку отталкивания и притяжения, а следовательно, и выделить механизмы, ответственные за формирование конечного двумерного углового распределения эмитированных частиц.

Для учета дискретности поверхности в последнем случае были выбраны минимальные фрагменты исследуемой грани (001) Ni: ближайшее к рассматриваемому узлу решетке, из которого происходит эмиссия, кольцо атомов в плоскости поверхности (4 атома); а также отдельно 1 атом из ближайшего кольца как первое приближение (модель молекулярной динамики в этом случае переходит в модель парных столкновений). Расчеты проводились по схеме, аналогичной описанной выше. Шаг по ϕ_0 составлял 3° , шаг по $1 - \cos\vartheta_0$ был равен $1/45$. Начальная энергия E_0 изменялась от

значения E_b (высота плоского потенциального барьера) до 100 эВ. Шаг по E_0 составлял 0,1 эВ, значение E_b бралось равным 4,435 эВ. Таким образом, для каждого фиксированного значения E_0 , которых было около 1000, был рассчитан вылет 5401 атома из узла на поверхности в верхнюю полусферу. Было использовано два начальных распределения эмитируемых атомов по углам и энергиям: изотропное, пропорциональное $1/E_0^2$ (см. работу [30]), и распределение атомов $\cos\vartheta_0/E_0^2$ [31, 32].

В работе считалось, что распыление происходит только за счет атомов поверхностного слоя. Это допущение кажется вполне оправданным ввиду того, что для мишеней, состоящих из средних по массе и тяжелых атомов, вклад атомов поверхностного слоя в распыление является доминирующим (88,6% для случая ионной бомбардировки Cu [33], 82% для случая ионной бомбардировки Mo [34]). Отметим также, что использованное изотропное распределение (вылет одинакового числа частиц в равные элементы телесного угла) является стандартным для расчетов вероятности распыления выбитых атомов (в том числе атомов поверхностного слоя кристалла) [19, 35, 36]. В то же время оказывается, что для случая аморфной мишени реальное распределение атомов, выбитых с поверхности ($z = 0$), по начальному углу вылета согласно аналитическим и компьютерным расчетам близко к изотропному для всех значений начальной энергии E_0 (см. рис. 3, а работы [30]).

Обсуждение некоторых особенностей использованных моделей приведено также в работах [20, 23].

Результаты и обсуждение

Особенности формирования максимумов двумерного углового распределения эмитируемых атомов

В угловом распределении атомов, распыленных с поверхности грани (001) Ni, наблюдаются 4 максимума при углах φ_e , равных 0° , 90° , 180° и 270° . При этих углах формируются очень высокие максимумы эмиссии только за счет чувствительности траекторий к неоднородностям приповерхностного поля (расчет для полного кристалла методом молекулярной динамики, прямое решение уравнений Ньютона для задачи многих тел). Анализ показывает, что максимумы эмиссии наблюдаются в частности для интервала углов наблюдения $\varphi_e = [-1,5^\circ, 1,5^\circ]$, то есть в направлении на линзу из двух атомов – ближайших соседей в плоскости поверхности. Наблюдается соответствие между азимутальными углами, в которых наблюдаются максимумы эмиссии, в настоящих расчетах и в экспериментах по распылению грани (001) Ni ионными пучками (например, [17]).

Для энергии $E_0 = 20$ эВ в полярном распределении распыленных атомов наблюдается один узкий максимум большой интенсивности в направлении на линзу $\varphi_e = [-1,5^\circ, 1,5^\circ]$ (рис. 1, распределение 1). Эффективность фокусировки атомов в процессе эмиссии оказалась очень высокой: отношение числа частиц в максимуме распределения и числа частиц, первоначально эмитируемых в тот же телесный угол, равно 95 (и 88 для $E_0 = 15$ эВ, см. рис. 1, распределение 2). Максимум расположен в интервале углов ϑ_e от $45,6^\circ$ до $47,3^\circ$ от нормали (и от $49,0^\circ$ до $50,7^\circ$ для энергии $E_0 = 15$ эВ).

Гистограмма 3 на рис. 1 представляет распределение так называемых "собственных" распыленных атомов (этот термин был введен в работах [20, 21] для обозначения атомов, для которых интервал углов наблюдения φ_e включает в себя значения начальных углов эмиссии φ_0). Механизм формирования максимумов эмиссии для "собственных" атомов можно объяснить исходя из зависимостей $1 - \cos\vartheta_e$ от $1 - \cos\vartheta_0$, представленных на рис. 2. Распыленные атомы, наблюдаемые в узком интервале $1 - \cos\vartheta_e$, эмитировались с поверхности в широком интервале значений $1 - \cos\vartheta_0$ (см., например, кривую 3 на рис. 2). Это означает, что атомы с различными историями вылета наблюдаются в одной узкой апертуре детектора. Более подробное обсуждение механизма

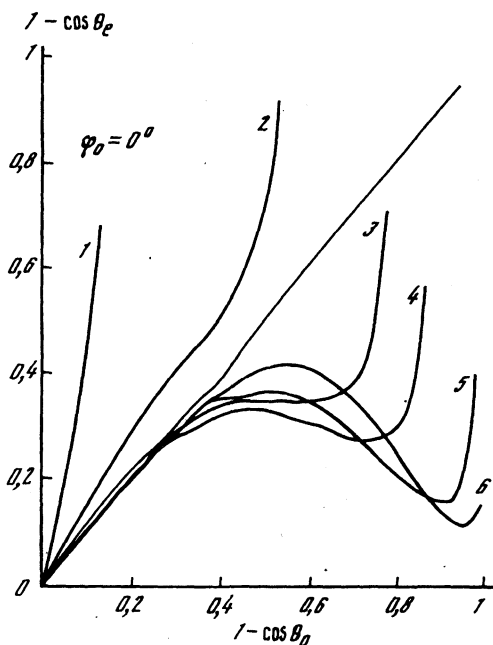


Рис. 2. Зависимости $1 - \cos \vartheta_e$ от $1 - \cos \vartheta_0$ для атомов, эмитируемых с поверхности под начальным азимутальным углом $\varphi_0 = 0^\circ$ с начальными энергиями $E_0 = 7$ эВ (1), 10 эВ (2), 15 эВ (3), 20 эВ (4), 50 эВ (5) и 100 эВ (6), рассчитанные по модели I

фокусировки эмитируемых атомов по полярному углу приведено в работах [19, 20]. Подобные результаты были получены также в работах [2] и [37].

Как следует из рис. 1, "собственные" атомы составляют лишь малую часть от всех частиц, распыленных в данный интервал углов $\varphi_e = [-1,5^\circ, 1,5^\circ]$ (19% всех частиц и 9% в максимуме). Большую часть атомов составляют "несобственные" атомы [20, 21], то есть эмитированные первоначально при углах φ_0 , вне интервала углов наблюдения φ_e . Они сфокусировались в этот интервал углов φ_e , в частности, вследствие взаимодействия с атомами линзы, состоящей из двух ато-

мов – ближайших соседей в плоскости поверхности.

На рис. 3, а представлено интегральное по всем энергиям E_e распределение эмитированных атомов по $1 - \cos \vartheta_e$, рассчитанное для начальной функции распределения $F_0(\cos \vartheta_0, E_0) = \cos \vartheta_0 / E_0^2$ (распределение 1). Фактически, здесь по оси ординат отложено значение функции $F(1 - \cos \vartheta_e)$, рассчитанное для каждого интервала наблюдения $1 - \cos \vartheta_e$ как:

$$F(1 - \cos \vartheta_e) = \frac{\int_{E_b}^{E_{\max}} N(1 - \cos \vartheta_e, E_0) / E_0^2 dE_0}{\int_{E_b}^{E_{\max}} 1 / E_0^2 dE_0}.$$

Ширина распределения на полувысоте составляет порядка 10° . Максимум распределения расположен при угле ϑ_e приблизительно от 47 до 49° от нормали. Этот результат хорошо согласуется как с расчетными распределениями, полученными другими авторами, так и с экспериментальными данными. Для сравнения также представлено экспериментальное распределение распыленных атомов для бомбардировки грани (001) Au ионами Kr^+ с энергией 50 эВ (кривая 2), полученное в работе [2]. Расчетный максимум уже экспериментального вследствие, во-первых, малой апертуры детектора в расчетах (0,0012 стеррад., в эксперименте [2] – 0,03 стеррад.), во-вторых, в связи с тем, что в используемой модели не были учтены тепловые колебания атомов решетки. Учет тепловых колебаний привел бы к увеличению ширины максимума углового распределения. Отметим, что подобное хорошее соответствие с экспериментальными данными получено нами в результате моделирования только последней стадии распыления – эмиссии атома с поверхности, без учета каскадных механизмов фокусировки. Очевидно, именно взаимодействие вылетающего атома с другими атомами решетки кристалла и обеспечивает формирование наблюдаемых максимумов эмиссии. Таким образом, стадия эмиссии является существенной в перераспределении потока эмитируемых атомов по углам вылета.

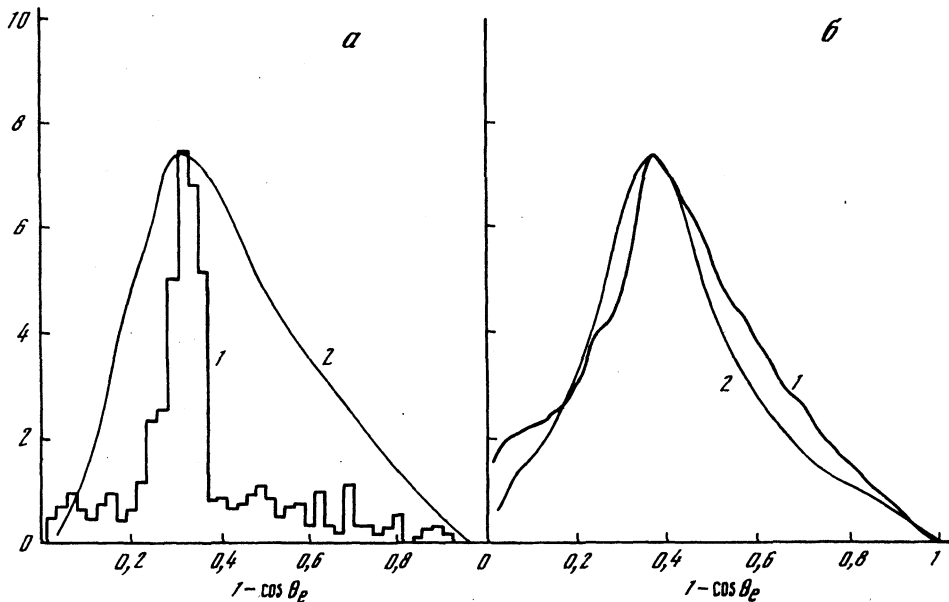


Рис. 3. а – Интегральное по всем энергиям E_e распределение эмитированных атомов по $1 - \cos \vartheta_e$ для интервала азимутальных углов наблюдения φ_e $[-1,5^\circ, 1,5^\circ]$, рассчитанное по модели I для начальной функции распределения $F_0(\cos \vartheta_0, E_0) = \cos \vartheta_0 / E_0^2$ (1); распределение по $1 - \cos \vartheta_e$ атомов, распыленных с поверхности грани (001) Au в азимутальном направлении $\langle 010 \rangle$ при бомбардировке ионами Kr^+ с энергией 50 эВ, эксперимент [2] (2). б – Распределение эмитированных атомов по $1 - \cos \vartheta_e$ для интервала углов φ_e $[-7,5^\circ, 7,5^\circ]$ и интервала энергий наблюдения E_e от 0 до 40 эВ, рассчитанное по модели II для начальной функции распределения $F_0(\cos \vartheta_0, E_0) = 1/E_0^2$ (1); распределение по $1 - \cos \vartheta_e$ атомов, распыленных с поверхности грани (001) Si в азимутальном направлении $\langle 010 \rangle$ при бомбардировке ионами Ar^+ с энергией 65 эВ, эксперимент [2] (2). Апертура детектора в экспериментах [2] составляла $\Omega_d = 0,03$ стеррад

На рис. 3, б представлено интегральное по всем энергиям E_e (от 0 до 40 эВ) распределение по $1 - \cos \vartheta_e$ эмитированных атомов, рассчитанное для начального распределения $F_0(\cos \vartheta_0, E_0) = 1/E_0^2$ по модели II (кривая 1). Интервал наблюдения по азимутальному углу $\varphi_e = [-7,5^\circ, 7,5^\circ]$ близок к экспериментальному [2]. Максимум этого распределения немного сдвинут в сторону поверхности относительно максимума распределения, представленного на рис. 3, а. Это может быть объяснено тем фактом, что в рассмотрении оставался лишь минимальный фрагмент поверхности кристалла – кольцо из ближайших 4-х атомов в плоскости поверхности. Отсутствие атома второго кольца в направлении $\langle 010 \rangle$, а также атома второго слоя непосредственно под линзой может приводить к небольшому сдвигу распределения в сторону поверхности. Для сравнения также представлено экспериментальное распределение распыленных атомов для бомбардировки грани (001) Si ионами Ar^+ с начальной энергией 65 эВ (кривая 2). Экспериментальный максимум эмиссии наблюдается вблизи $\vartheta_e \approx 50^\circ$ (5° от направления $\langle 011 \rangle$).

Общее хорошее согласие двумерных распределений распыленных атомов, полученных в рамках двух моделей, позволяет заключить, что именно линза из двух атомов, ближайших к эмитируемому атому, ответственна за фокусировку атомов по полярному и азимутальному углам. Подобное предположение для расчетов взаимодействия эмитируемого атома с кристаллом было сделано ранее в работе [20]. Соотношение

вкладов "собственных" и "несобственных" атомов также согласуется с расчетами по модели полного кристалла (как для полного распределения, так и для максимума).

Расчеты, проведенные для отдельных фиксированных значений энергии E_0 по модели, где в плоскости поверхности был оставлен лишь ближайший соседний атом, показали, что после преодоления атомами потенциального барьера, полученная картина двумерного углового распределения атомов отличается от соответствующих результатов, полученных по более реалистичным моделям (для азимутальных направлений, близких к пятну Венеры). Траектории частиц, рассчитанные по моделям с учетом одновременного коллективного взаимодействия вылетающего атома с атомами фрагмента кристалла, принципиально трехмерные (в отличие от расчетов с использованием приближения парных столкновений). И хотя результаты, представленные на рис. 1, показывают, что в максимумах двумерных угловых распределений распыленных атомов преобладают "несобственные" атомы, все "собственные" атомы остаются в рассматриваемых интервалах φ_e и тоже участвуют в формировании максимумов эмиссии, в то же время максимумы, рассчитанные по модели парных столкновений, на 100% состоят из "несобственных" атомов, что является, по-видимому, неверным. Тем не менее, для азимутальных направлений, близких к $\langle 110 \rangle$ – направлению на атом, бинарная модель не уступает моделям с одновременным коллективным взаимодействием как для расчетов угловых распределений распыленных атомов, так и для расчета их энергетических распределений. Модель парных столкновений оказывается также важной для перехода к аналитическому описанию наблюдаемых особенностей формирования угловых распределений эмитируемых атомов. Таким образом, имея в виду, что, очевидно, использование моделей парных столкновений при исследовании процесса эмиссии атомов с поверхности кристалла под действием ионной бомбардировки является не совсем правомерным, следует отметить, что этот метод остается вполне корректным и удобным при решении ряда конкретных задач.

Распределения эмитированных атомов по полярному углу с разрешением по энергии наблюдения

На рис. 4, а представлены распределения распыленных атомов по $1 - \cos\vartheta_e$ для интервала азимутальных углов $\varphi_e [-7,5^\circ, 7,5^\circ]$ и энергий наблюдения E_e , равных 5, 7, 10, 15, 20, 30 и 40 эВ ($\pm 0,4$ эВ). Расчеты были проведены по модели взаимодействия эмитируемого атома с 4-мя соседними атомами в плоскости поверхности. Для сравнения на рис. 4, б представлены соответствующие экспериментальные распределения, полученные в работе [2].

На рис. 5, а представлены распределения распыленных атомов по $1 - \cos\vartheta_e$ для интервала азимутальных углов $\varphi_e [-7,5^\circ, 7,5^\circ]$ и энергий наблюдения E_e 5–10, 10–20 и 20–40 эВ. Расчеты были проведены по той же модели II. Для сравнения на рис. 5, б представлены соответствующие экспериментальные распределения, полученные в работе [17]. Все исследования, как экспериментальные [2, 17], так и моделирование, были проведены для сравнительно небольших энергий наблюдения – до 40–50 эВ.

Механизм сдвига максимума полярного распределения в сторону нормали к поверхности с ростом энергии наблюдения E_e сходен с механизмом подобного сдвига полярного углового распределения, полученного для фиксированного значения энергии E_0 , с ростом E_0 , обсуждение которого было проведено в работах [19, 20, 25]. При формировании положения максимума полярного распределения с изменением энергии E_e происходит конкуренция двух факторов. С ростом энергии действие эффекта блокировки уменьшается вследствие уменьшения сечения взаимодействия атом–атом, что приводит к сокращению угловых размеров тени от линзы из двух рассеивающих центров [20]. С другой стороны, с ростом энергии плоский барьер все менее эффективно отклоняет атомы в сторону от нормали к поверхности. В настоящем случае при сравнительно малых (менее 30 эВ) энергиях E_e (и, соответственно, малых энергиях E_0)

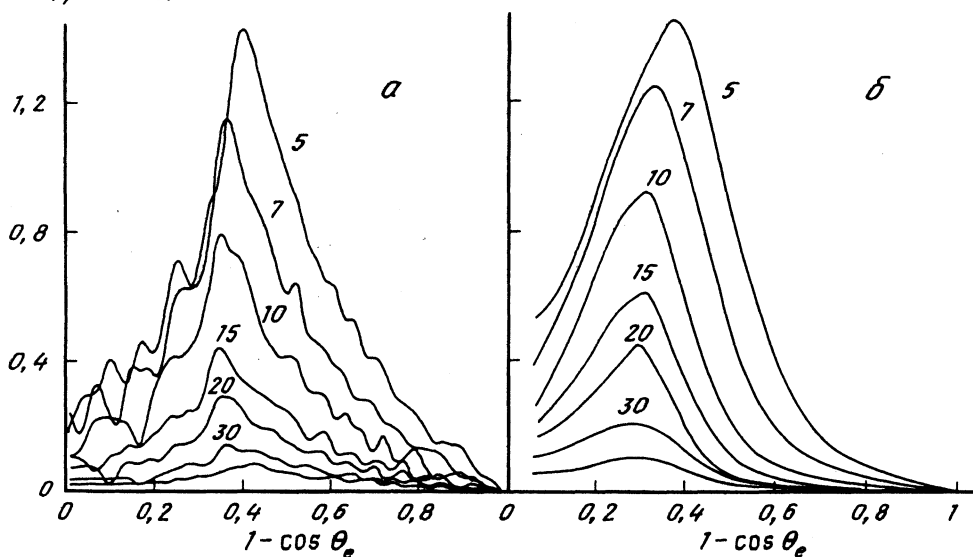


Рис. 4. Распределения эмитированных атомов по $1 - \cos \theta_e$ для интервала азимутальных углов наблюдения $\varphi_e [-7,5^\circ, 7,5^\circ]$, дифференциальные по энергии наблюдения E_e , рассчитанные по модели II для начальной функции распределения $F_0(\cos \theta_0, E_0) = 1/E_0^2$. Энергии $E_e = 5, 7, 10, 15, 20, 30$ и 40 эВ ($\pm 0,4$ эВ) (а). Распределения по $1 - \cos \theta_e$ атомов, распыленных с поверхности грани (001) Cu в азимутальном направлении (010) при бомбардировке ионами Ag^+ с энергией 5 кэВ для тех же значений энергии наблюдения E_e , эксперимент [2] (б)

энергия атомов перед плоским барьером оказывается соизмеримой с энергией связи, что приводит к сильному влиянию плоского барьера. В результате в этом диапазоне энергий E_e уменьшение энергии наблюдения приводит к более сильному преломлению атомов на потенциальном барьере и, следовательно, к сдвигу максимума в сторону от нормали к поверхности.

Мы также получили, что в диапазоне энергий $E_e > 50$ эВ с ростом энергии наблюдения происходит сдвиг максимума полярного углового распределения в сторону от нормали к поверхности. Этот сдвиг довольно слабый и связан с сокращением угловых размеров тени от линзы из двух рассеивающих центров. Насколько известно авторам настоящей работы, экспериментальные данные в отношении сдвига максимума полярного углового распределения нейтральных распыленных атомов в этом диапазоне энергий наблюдения отсутствуют. Экспериментальное обнаружение такого сдвига было бы сильным доводом в подтверждение доминирующей роли поверхностного механизма фокусировки в формировании наблюдаемых максимумов эмиссии в двумерных угловых распределениях распыленных атомов.

Анализ экспериментальных данных [16, 17] (см. рис. 5, б) позволяет предположить, что положение максимума углового распределения атомов практически не зависит от энергии наблюдения. В то же время эксперимент [2] (см. рис. 4, б) показывает заметный сдвиг положения максимума в сторону нормали к поверхности с увеличением энергии наблюдения. Проведенные нами расчеты доказали возможность компромисса между результатами этих экспериментов: столь заметный сдвиг положения максимума становится слабо различимым при выборе широких интервалов регистрации энергий наблюдения E_e (сравни зависимости, представленные на рис. 4, а и 5, а). Таким образом, усреднение угловых распределений распыленных атомов, полученных в экспериментах с энергетическим разрешением, в пределах некоторых интервалов E_e , не

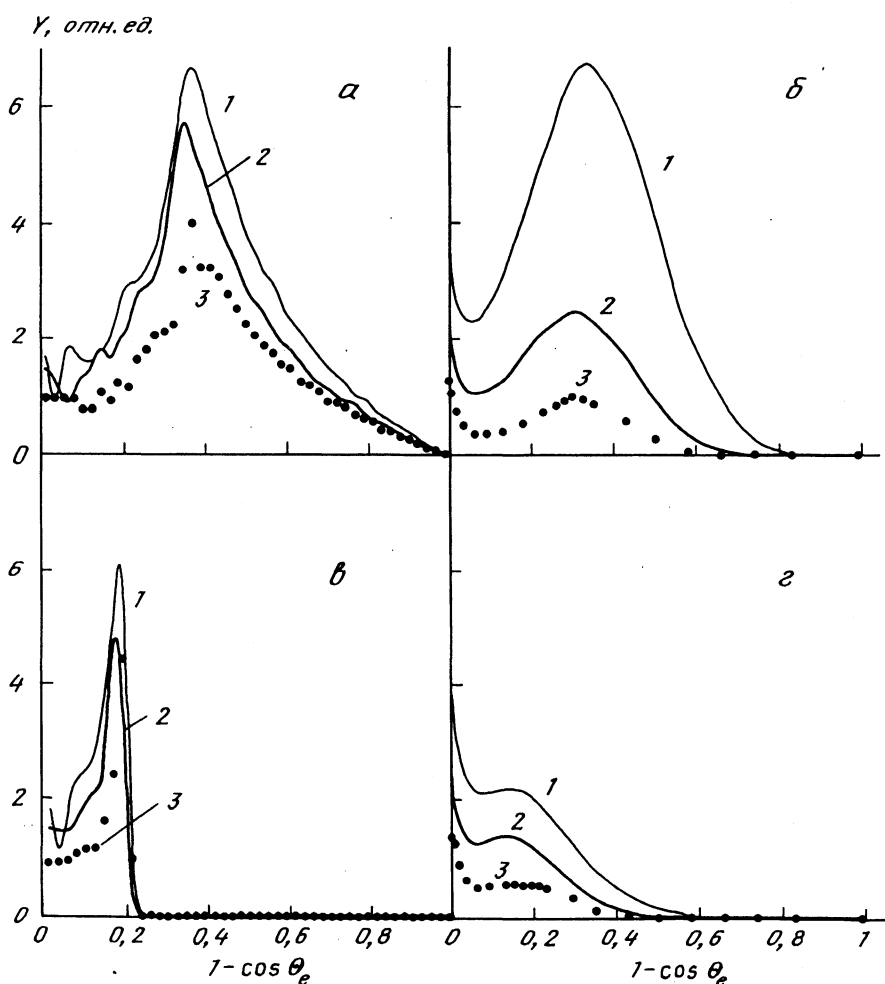


Рис. 5. Распределения эмитированных атомов по $1 - \cos \theta_e$ для интервалов азимутальных углов наблюдения φ_e $[-7,5^\circ, 7,5^\circ]$ (*а*) и $[37,5^\circ, 52,5^\circ]$ (*б*) и интервалов энергии наблюдения $E_e = 5-10$ (1), $10-20$ (2) и $20-40$ эВ (3), рассчитанные по модели II для начальной функции распределения $F_0(\cos \vartheta_0, E_0) = 1/E_0^2$. Распределения по $1 - \cos \theta_e$ атомов, распыленных с поверхности грани (001) Ni в азимутальных направлениях (010) (*б*) и (110) (*г*) при бомбардировке ионами Ag^+ с энергией 5 кэВ для тех же интервалов энергии наблюдения E_e , эксперимент [17]

позволяет наблюдать реальную зависимость положения максимумов угловых распределений от энергии E_e . Сравнение зависимостей, представленных на рис. 4, *а*, *б* и 5, *а*, *б*, показывает, что, так как интервалы усреднений в последнем случае оказались, очевидно, слишком большими, результаты экспериментов [16, 17] и [2] не противоречат друг другу. Одновременно показано, что даже такая несложная модель (модель взаимодействия эмитируемого атома с 4-мя соседними атомами в плоскости поверхности) обеспечивает формирование анизотропии углового распределения распыленных атомов, наблюдаемой экспериментально, в том числе с разрешением по энергии наблюдения.

На рис. 5, *в* представлены распределения распыленных атомов по $1 - \cos \theta_e$ для интервала азимутальных углов φ_e $[37,5^\circ, 52,5^\circ]$ (в направлении на атом – ближайший сосед в плоскости поверхности) и энергий наблюдения E_e 5–10, 10–20 и 20–40 эВ.

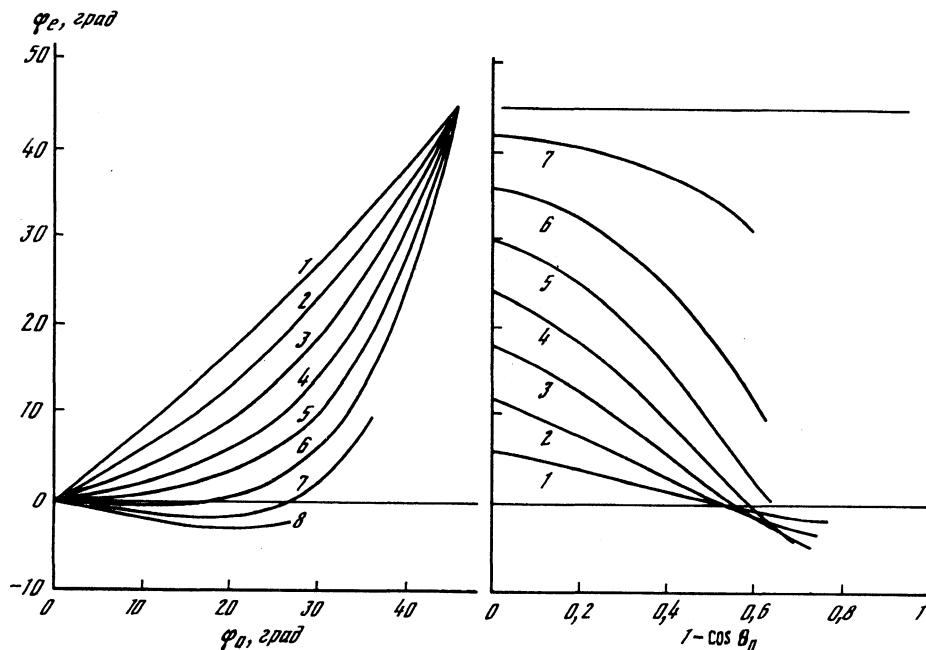


Рис. 6. Зависимости конечного азимутального угла вылета φ_e от начального азимутального угла φ_0 для значений $1 - \cos \vartheta_0$, равных 5/45 (1), 10/45 (2), 15/45 (3), 19/45 (4), 22/45 (5), 25/45 (6), 28/45 (7) и 30/45 (8) и зависимости угла φ_e от $1 - \cos \vartheta_0$ для значений угла φ_0 , равных 6° (1), 12° (2), 18° (3), 24° (4), 30° (5), 36° (6) и 42° (7), рассчитанные по модели I для начальной энергии эмиссии $E_0 = 15$ эВ

Расчеты были проведены по модели II. Для сравнения на рис. 5, г представлены соответствующие экспериментальные распределения, полученные в работе [17]. Угловые положения максимумов в расчете и эксперименте находятся в хорошем согласии. Было показано, что в этом азимутальном направлении формирование углового распределения эмитируемых атомов определяется взаимодействием вылетающего атома с одним атомом – ближайшим соседом в плоскости поверхности.

Механизм фокусировки эмитированных атомов по азимутальному углу

Рассмотрим в деталях механизм фокусировки по азимутальному углу, анализируя результаты, полученные в расчетах по модели I (полный кристалл). На рис. 6 представлены зависимости азимутального угла наблюдения φ_e от начального угла φ_0 для значения $E_0 = 15$ эВ для нескольких фиксированных значений $1 - \cos \vartheta_0$. Из рис. 6 можно видеть, как атомы, эмитируемые первоначально при положительных углах φ_0 , дают вклад в интервал углов $\varphi_e < 0^\circ$. Это происходит вследствие сильного отталкивания вылетающего атома от ближайшего из двух атомов линзы в плоскости поверхности (расположенного первоначально в направлении $\varphi_0 = 45^\circ$), когда атом вылетает при больших (далеких от нормали) начальных полярных углах ($\vartheta_0 = 70,5^\circ$ для кривой 8 на рис. 6). Подобные зависимости наблюдаются также для всех энергий $E_0 > 15$ эВ. Для $E_0 < 10$ эВ атомы, которые могли бы давать соответствующий вклад при $\varphi_e < 0^\circ$, не распыляются. Их энергия после блокировки оказывается недостаточной для преодоления притяжения к кристаллу.

На рис. 6 представлены также зависимости азимутального угла наблюдения φ_e от $1 - \cos \vartheta_0$. Из рисунка легко видно, каким образом в интервал углов наблюдения φ_e ,

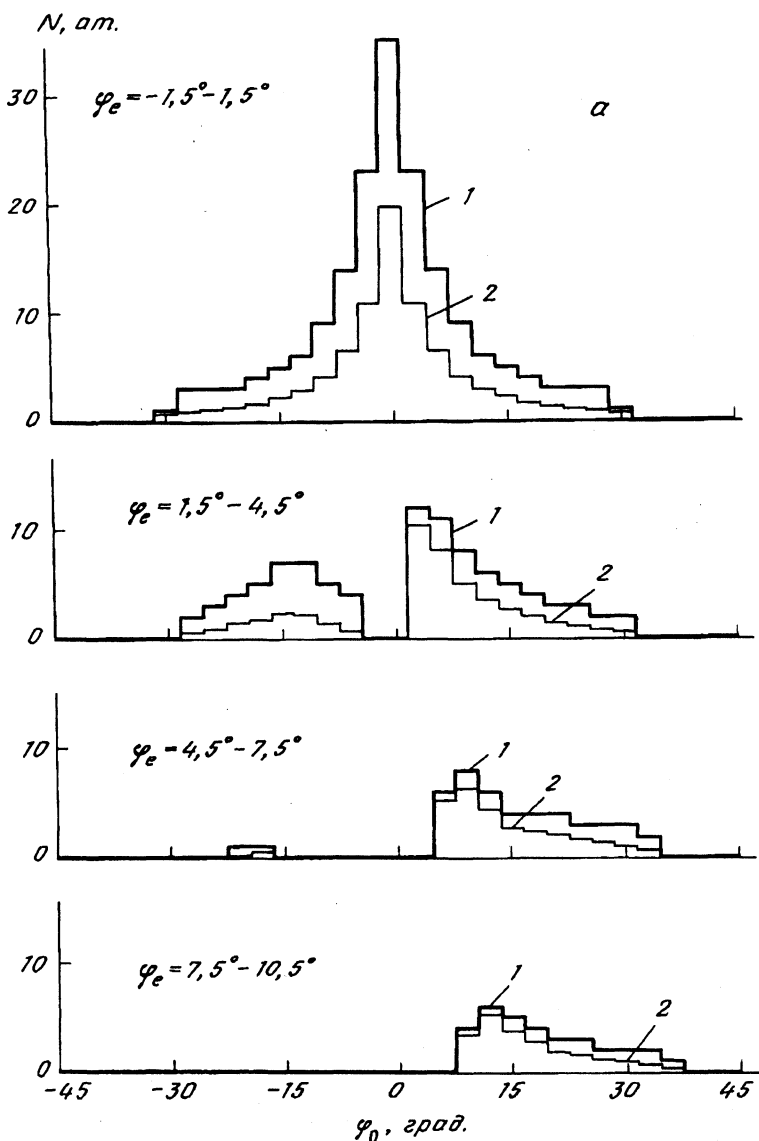


Рис. 7, а

например, $[-1,5^\circ, 1,5^\circ]$, попадают "собственные" и "несобственные" атомы, то есть как происходит фокусировка по азимутальному углу (см. также рис. 7, а). Начиная с некоторого угла φ_0 в центральный интервал углов φ_e начинают попадать атомы, вылетающие с поверхности под углом $\varphi_0 \neq 0^\circ$. Причем с увеличением $|\varphi_0|$ в этот интервал попадают частицы, вылетающие все дальше от нормали, а количество таких атомов с ростом $|\varphi_0|$ уменьшается (ср. с рис. 7, а) — это видно из наклона кривых. И, наконец, при φ_0 , большем некоторого значения, вклад атомов в центральный интервал отсутствует.

На рис. 7, а представлены распределения вкладов атомов, вылетающих под начальными углами φ_0 , в распыление для четырех интервалов углов наблюдения φ_e вне зависимости от конечного угла φ_e для начальной энергии эмиссии $E_0 = 15$ эВ, рассчи-

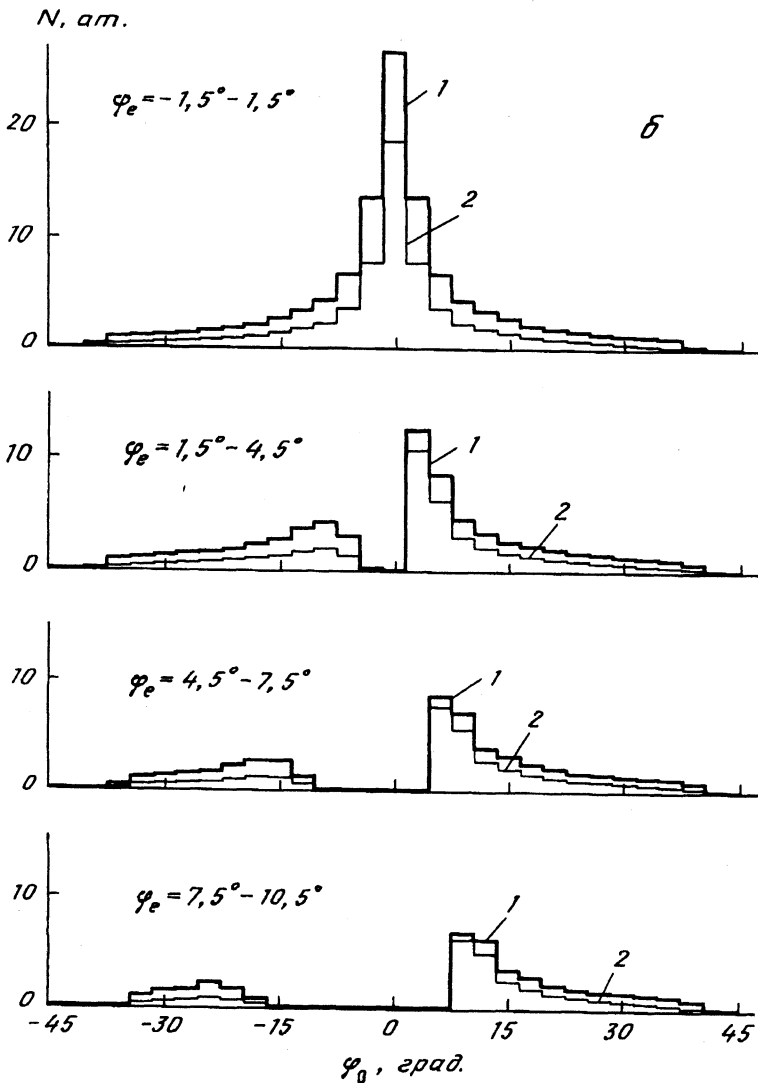


Рис. 7. Распределения вкладов атомов, первоначально эмитируемых при азимутальных углах φ_0 , в распыление в интервалы азимутальных углов наблюдения φ_e $[-1,5^\circ, 1,5^\circ]$, $[1,5^\circ, 4,5^\circ]$, $[4,5^\circ, 7,5^\circ]$ и $[7,5^\circ, 10,5^\circ]$ (для всех углов φ_e , исключая $\varphi_e = 0^\circ$), рассчитанные по модели I (а) и по модели II (б) для начальных распределений атомов, эмитируемых из узла на поверхности, изотропного (равного 1 атому) (1) и пропорционального $\cos\vartheta_0$ (2) и начальной энергии эмиссии $E_0 = 15$ эВ

танные по модели I. С увеличением $|\varphi_e - \varphi_0|$, как следует из рисунка, вклад "несобственных" атомов в интервал углов φ_e $[-1,5^\circ, 1,5^\circ]$ снижается. При этом фокусировка наблюдается вплоть до угла $\varphi_0 = 33^\circ$. Атомы, попавшие в интервалы углов φ_e $[1,5^\circ, 4,5^\circ]$ и $[4,5^\circ, 7,5^\circ]$, вылетали как под углами $\varphi_0 > \varphi_e$, так и под углами $\varphi_0 < 0^\circ$. Для последних атомов происходит их перефокусировка через центр линзы. Для последнего из рассматриваемых интервалов углов φ_e $[7,5^\circ, 10,5^\circ]$ (интервал, наиболее удаленный от направления на центр линзы) перефокусировка не наблюдается. Все атомы фокусируются в этот интервал углов, вылетая с поверхности под углами $\varphi_0 > \varphi_e$ в результате взаимодействия с одним из атомов, образующих линзу (первоначально расположенным при угле $\varphi_0 = 45^\circ$). В соответствии с этим механизмом для энергий E_0 ,

ниже определенного значения (например, для $E_0 = 10$ эВ), перефокусированных атомов в распылении не наблюдается. Распределения 2 на рис. 7, а показывают те же вклады, рассчитанные для начальной функции распределения $F_0(\cos\vartheta_0, E_0) = \cos\vartheta_0/E_0^2$. Сравнивая вклады атомов в интервалы наблюдения для двух различных начальных распределений, видно, что эта разница невелика для частиц, пришедших в рассматриваемый интервал углов φ_e ($\varphi_e > 0^\circ$) с $\varphi_0 > \varphi_e$, и значительна для частиц, пришедших с противоположной, по отношению к углу наблюдения, стороны линзы. Это объясняется тем, что вклады из положительной области φ_0 дают частицы, вылетающие первоначально под сравнительно малыми углами ϑ_0 (ближе к нормали), а вклады из отрицательной области φ_0 дают частицы, вылетающие первоначально вблизи поверхности ($\cos\vartheta_0$ существенно меньше 1) и отклонившиеся на большой угол в результате сильного взаимодействия с одним из атомов линзы, поэтому различие, обусловленное множителем $\cos\vartheta_0$ в последнем случае более значительно. Такие атомы теряют значительную часть своей энергии на отдачу и при энергиях $E_0 < 10$ эВ уже не могут преодолеть притяжение к кристаллу, и, следовательно, не распыляются. Поэтому для таких низких значений начальной энергии эмиссии не наблюдается вклада перефокусированных атомов.

Для сравнения эффективности фокусировки эмитируемых атомов по азимутальному углу по двум моделям на рис. 7, б представлены распределения вкладов атомов, вылетающих под начальными углами φ_0 , в распыление для четырех интервалов углов наблюдения φ_e вне зависимости от конечного угла ϑ_e для начальной энергии эмиссии $E_0 = 15$ эВ, рассчитанные по модели II. Сравнение с результатами, представленными на рис. 7, а, показывает, что линзы из двух атомов – ближайших к эмитируемому атому соседей в плоскости поверхности, обеспечивают практически такую же эффективную фокусировку атомов по азимутальному углу в процессе вылета с поверхности, как и полный кристалл.

Выводы

Для исследования закономерностей поверхностного механизма фокусировки атомов в формировании максимумов эмиссии при распылении поверхности монокристалла было проведено компьютерное моделирование методом молекулярной динамики эмиссии атомов с поверхности грани (001) Ni. Анализ полученных результатов позволяет заключить, что эффект надповерхностного рассеяния является важным в формировании углового распределения эмитируемых атомов.

Показано, что основные особенности наблюдаемого углового распределения, в том числе и с энергетическим разрешением, описываются взаимодействием эмитируемых атомов с линзами, состоящими из двух атомов – ближайших к вылетающему атому соседей в плоскости поверхности. Такой фрагмент кристалла обеспечивает эффективную фокусировку потока эмитируемых атомов как по полярному, так и по азимутальному углам. При этом наблюдается хорошее согласие в положении максимума углового распределения распыленных атомов, полученного в расчетах, с имеющимися экспериментальными данными.

Выяснен механизм сдвига максимума полярного углового распределения распыленных атомов с ростом энергии наблюдения. Показано, что для обнаружения сдвига максимума необходимо не усреднять результаты экспериментов по широким интервалам наблюдения. Удалось разрешить кажущееся противоречие между экспериментальными результатами, полученными двумя научными группами [2] и [16, 17].

Предсказано, что при дальнейшем увеличении энергии наблюдения выше 50 эВ максимум эмиссии должен смещаться в сторону от нормали к поверхности (в рамках поверхностного механизма фокусировки). Для подтверждения этого предположения и прямой демонстрации доминирующей роли поверхностного механизма фокусировки актуальным было бы проведение соответствующих прецизионных экспериментов по

регистрации положения максимума полярного углового распределения атомов, распыленных с поверхности грани (001) Ni.

Выявлены механизмы фокусировки по полярному и азимутальному углам и показана их роль в формировании анизотропии двумерного углового распределения распыленных частиц. Проведено детальное сравнение результатов, полученных в рамках двух моделей, между собой и с имеющимися данными экспериментов, в том числе и с разрешением по энергии наблюдения.

В работе показано, что в азимутальном направлении между максимумами эмиссии полярное угловое распределение эмитированных атомов определяется взаимодействием вылетающего атома с одним атомом – ближайшим соседом в плоскости поверхности, при этом применение модели парных столкновений дает качественное согласие с данными экспериментов.

Авторы благодарны В.А. Эльтекову за многочисленные полезные обсуждения и поддержку этой работы, П. Зигмунду (Оденсе, Дания) за гостеприимство во время визита одного из авторов (В.Н.С.) в Оденсе, плодотворные дискуссии и внимание к настоящим исследованиям, Б.Дж. Гаррисон (Юниверсити Парк, шт. Пенсильвания, США) за внимание и поддержку этих исследований, предложения и любезно предоставленную возможность ознакомиться с работами [17, 18] до их публикации в печати, Дж.М. Флайту (Утрехт, Нидерланды) за возможность ознакомиться с диссертацией [2] и рядом других работ и высказанное им мнение по поводу некоторых особенностей модели, применявшейся в расчетах [2, 15]. За советы, поддержку и интерес к этим исследованиям нам приятно поблагодарить Г. Бетца (Вена, Австрия), Х.Э. Розендала (Амстердам, Нидерланды), В.О. Хофера (Юлих, Германия) и Я. Ликонена (Эспо, Финляндия). Представленные исследования были выполнены частично в рамках гранта РФФИ № 94-01-00369.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Wehner G.K.* // J. Appl. Phys. 1955. V. 26. № 8. P. 1056–1057.
2. *van Veen A.* Sputtering and Scattering by Interaction of Low Energy Noble Gas Ions with Monocrystalline Metal Surfaces: Ph. D. Thesis. Univ. Utrecht, Utrecht, Netherlands, 1979. 177 p.
3. *Hofer W.O.* // Sputtering by Particle Bombardment III. / Eds.: R. Behrisch, K. Wittmaack. Berlin, Heidelberg: Springer-Verlag, 1991. P. 15–90.
4. *Silsbee R.H.* // J. Appl. Phys. 1957. V. 28. № 11. P. 1246–1250.
5. *Шульга В.И.* // Поверхность. 1982. № 3. С. 38–42.
6. *Shulga V.I.* // Radiat. Eff. 1983. V. 70. № 1–4. P. 65–83.
7. *Shulga V.I.* // Radiat. Eff. 1984. V. 82. № 3–4. P. 169–187.
8. *Hautala M., Likonen J.* // Phys. Rev. 1990. V. B41. № 4. P. 1759–1769.
9. *Likonen J.* // Phys. Rev. 1990. V. B42. № 7. P. 3853–3865.
10. *Likonen J.* Computer Simulations of Collision Cascade Anisotropies and Sputtering: Ph.D. Thesis. Univ. Helsinki, Helsinki, Finland, 1990. 114 p.
11. *Lehmann Chr., Sigmund P.* // Phys. Stat. Sol. 1966. V. 16. № 2. P. 507–511.
12. *Harrison D.E., Johnson J.P., Levy N.S.* // Appl. Phys. Lett. 1966. V. 8. № 2. P. 33–36.
13. *Nelson R.S., Thompson M.W.* // Proc. Roy. Soc. 1961. V. A259. № 1299. P. 458–479.
14. *Самойлов В.Н.* Препринт физ. фак-та МГУ № 41/1987. М., 1987. 5 с.
15. *van Veen A., de Wit A.G.J., Fluit J.M.* // Proc. Symp. on Sputtering, Perchtoldsdorf, Austria, 1980. P. 226–235.
16. *Bernardo D.N., Bhatia R., Garrison B.J.* // Comp. Phys. Comm. 1994. V. 80. P. 259–273.
17. *Rosencrance S.W., Burnham J.S., Sanders D.E., He C., Garrison B.J., Winograd N., Postawa Z., DePristo A.E.* // Phys. Rev. 1995. V. B52. № 8. P. 6006–6014.
18. *Rosencrance S.W., Winograd N., Garrison B.J., Postawa Z.* // Phys. Rev. 1996. V. B53. № 5. P. 2378–2384.
19. *Самойлов В.Н.* // Известия АН СССР, сер. физич. 1990. Т. 54. № 7. С. 1283–1287.
20. *Самойлов В.Н.* // Известия РАН, сер. физич. 1992. Т. 56. № 6. С. 38–45.

21. *Samoylov V.N.* // *Advances in Low-Temperature Plasma Chemistry, Technology, Applications.* Vol. 4. Ed.: H.V. Boenig. Lancaster, Pa., U.S.A.: Technomic Publ. Co., Inc., 1992. P. 153–197.
22. *Самойлов В.Н., Корсакова О.С., Тамур А.Э.* // *Известия РАН, сер. физич.* 1996. Т. 60. № 7. С. 100–105.
23. *Samoilov V.N., Korsakova O.S., Rodionova E.L., Nikitin A.M., Bachurin V.I.* // *Proc. of 9th Int. Conf. on Ion Beam Modification of Materials*, Canberra, Australia, 5–10 February 1995. / Eds.: J.S. Williams, R.G. Elliman and M.C. Ridgway. Amsterdam, Netherlands: Elsevier Science B.V., 1996. P. 710–714.
24. *Eltekov V.A., Samoylov V.N., Yurasova V.E., Motaweh H.A.* // *Nucl. Instr. and Meth. in Phys. Res.* 1986. V. B13. № 1–3. P. 443–448.
25. *Robinson M.T.* // *Sputtering by Particle Bombardment I.* / Ed.: R. Behrisch. Berlin, Heidelberg, New York: Springer-Verlag, 1981. P. 73–144 (перевод: Робинсон М. // *Распыление твердых тел ионной бомбардировкой.* / Под ред. Р. Бериша. М.: Мир, 1984. С. 99–193).
26. *Ананьева Н.Г., Матвеев А.Н., Самойлов В.Н.* // *Вестник Моск. ун-та. Сер. 3. Физика. Астрономия.* 1989. Т. 30, № 6. С. 63–68.
27. *Girifalco L.A., Weizer V.G.* // *Phys. Rev.* 1959. V. 114. № 3. P. 687–690.
28. *Harrison D.E., Gay W.L., Effron H.M.* // *J. Math. Phys.* 1969. V. 10. № 7. P. 1179–1184.
29. *Shulga V.I.* // *Radiat. Eff.* 1980. V. 51. № 1–2. P. 1–10.
30. *Vicanek M., Jimenez Rodrigues J.J., Sigmund P.* // *Nucl. Instr. and Meth. in Phys. Res.* 1989. V. B36. № 2. P. 124–136.
31. *Thompson M.W.* // *Phil. Mag.* 1968. V. 18. № 152. P. 377–414.
32. *Sigmund P.* // *Phys. Rev.* 1969. V. 184. № 2. P. 383–416.
33. *Shapiro M.H.* // *Nucl. Instr. and Meth. in Phys. Res.* 1989. V. B42. № 2. P. 290–292.
34. *Chakarov I.R., Cherepin V.T., Karpuzov D.S., Kosyachkov A.A., Vichev R.G.* // *Nucl. Instr. and Meth. in Phys. Res.* 1989. V. B39. № 1–4. P. 81–85.
35. *Sigmund P., Robinson M.T., Baskes M.I., Hautala M. et al.* // *Nucl. Instr. and Meth. in Phys. Res.* 1989. V. B36. № 2. P. 110–123.
36. *Бачурин В.И., Никитин А.М., Самойлов В.Н., Тамур А.Э., Ястржембский В.И.* // *Известия РАН, сер. физич.* 1994. Т. 58. № 3. С. 102–108.
37. *Jackson D.P.* // *Canad. J. Phys.* 1975. V. 53. № 16. P. 1513–1523.

Физический факультет МГУ
им. М.В. Ломоносова
Москва

Поступила в редакцию
11.VII.1996 г.
Принята в печать
17.VII.1996 г.

KORSAKOVA O.S., ALESHKEVICH V.A., SAMOILOV V.N., NIKITIN A.M.

SURFACE MECHANISM OF FOCUSING OF ATOMS EJECTED FROM THE SURFACE OF (001) Ni: MOLECULAR DYNAMICS COMPUTER SIMULATION STUDIES

Molecular dynamics computer simulation model was used to study regularities of focusing of sputtered atoms during ejection from the surface of (001) Ni. The mechanisms of focusing vs. both polar and azimuthal angles were revealed, and their role in the formation of anisotropy of two-dimensional distribution of sputtered particles was shown. The role of the lenses, consisting of two nearest neighbouring atoms to the ejecting atom in the surface plane, in formation of ejection maxima was shown to be dominating. The mechanism of the polar angular distribution of sputtered atoms maximum shift with the rise of energy of observation was revealed. For azimuthal directions between ejection maxima, the polar angular distribution of ejected atoms was shown to be determined by interaction of the ejecting atom with one atom – the nearest neighbouring one in the surface plane.