

МОСКОВСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ

имени М.В. ЛОМОНОСОВА

ФИЗИЧЕСКИЙ ФАКУЛЬТЕТ

Кафедра общей физики

ЭФФЕКТЫ ФОКУСИРОВКИ ПО АЗИМУТАЛЬНОМУ
УГЛУ АТОМОВ, ЭМИТИРУЕМЫХ С ПОВЕРХНОСТИ
ГРАНЕЙ (001) Ni и (001) Au

Дипломная работа
студента 6-го курса
Носова Н.В.

Научный руководитель:
доцент, канд. физ.– мат. наук
В.Н. Самойлов

Допущен к защите
“23” декабря 2011 г.
Зав. кафедрой общей физики
профессор
А.М. Салецкий

Москва 2011 г.

Содержание

Содержание.....	2
Введение.....	3
1. Обзор литературы.....	6
2. Модель расчета.....	22
3. Фокусировка эмитированных атомов по азимутальному углу.....	24
3.1. Интегральные распределения распыленных атомов по углам φ_e и φ_0	24
3.2. Формирование азимутальных распределений эмитированных атомов с разрешением по $\cos\theta_e$	36
3.3. Формирование азимутальных распределений эмитированных атомов с разрешением по энергии E_e	40
3.4. Азимутальные распределения эмитированных атомов с разрешением по $\cos\theta_e$ и по энергии E_e	50
4. Выводы.....	53
Литература.....	55

Введение

Распыление, т.е. выбивание поверхностных атомов при бомбардировке твердого тела ускоренными ионами происходит в результате столкновений между бомбардирующими ионами и атомами в поверхностных слоях мишени.

С тех пор, как распыление наблюдалось впервые, прошло более 150 лет, однако до сих пор не было представлено удовлетворительной количественной теории, описывающей это явление, в частности, для случая ионной бомбардировки монокристаллических мишеней. Наибольшую трудность представляет описание механизма вылета распыленных атомов с поверхности. В 1955 г. Г. Венер обнаружил эффект преимущественного выхода распыленных атомов в направлениях вблизи основных кристаллографических осей при ионной бомбардировке монокристаллов [1], т.е. эффект анизотропии углового распределения распыленных атомов. Для ионной бомбардировки грани (001) Ag полученные угловые распределения представлены на рис. 1. Это открытие привело к всплеску научного интереса к распылению. В последующие годы проводились активные исследования в этом направлении и было предложено несколько теоретических механизмов для объяснения особенностей распыления монокристаллов.

В 1957 г. Р. Силсби предложил идею последовательных фокусированных столкновений – фокусонов, которые осуществляют передачу импульса из глубины кристалла в направлении низкоиндексных кристаллографических осей (плотноупакованных направлений в кристаллической решетке) [2].

В середине 60-х г.г. прошлого века, приблизительно через десятилетие после опубликования работы Р. Силсби, К. Леман и П. Зигмунд [3], а также Д. Харрисон [4] предположили, что максимумы эмиссии не обязательно обусловлены распространением фокусированных цепочек столкновений, как это предполагал Р. Силсби, а могут быть обусловлены упорядоченным расположением атомов лишь двух приповерхностных атомных слоев. Р. Нельсон и М. Томпсон в качестве возможной причины появления “пятен Венеры” (т.е. максимумов углового распределения распыленных атомов в направлениях, близких к направлениям плотной упаковки) предложили механизм линзовой фокусировки, согласно которому импульс фокусируется линзами из нескольких атомов [5].

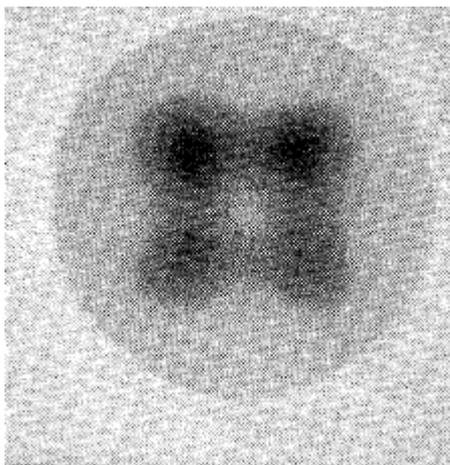


Рис. 1. Пятна Венера, обнаруженные при бомбардировке грани (001) Ag ионами Hg⁺ с энергией 100 эВ [1].

Однако в этих механизмах не учитывается изменение траектории эмитируемого атома в процессе его вылета с поверхности кристалла, за исключением учета роли плоского или сферического потенциального барьера. Однако известно, что траектории атомов могут меняться более сложным образом, чем просто преодоление поверхностного потенциального барьера [6-7].

До настоящего времени не выяснен вид дважды дифференциального распределения атомов, эмитируемых с поверхности монокристалла, по полярному и азимутальному углам. Компьютерное моделирование распыления позволяет определить, насколько сильно наблюдаемое распределение эмитированных атомов по углам зависит от вида распределения атомов, покидающих поверхность кристалла. Также представляет интерес задача о восстановлении исходного распределения атомов, сформировавшегося в каскаде столкновений, по наблюдаемому распределению распыленных атомов.

В ряде работ изучались эффекты, обусловленные рассеянием эмитируемых атомов в процессе вылета с поверхности: эффект блокировки и его роль в формировании угловых распределений распыленных атомов [8-10] и поверхностный механизм фокусировки эмитируемых атомов [9, 10]. На стадии эмиссии происходит сильное перераспределение вылетающих атомов по углам и энергии, такое, что, по видимому, стадия эмиссии играет определяющую роль в формировании углового и энергетического распределений распыленных атомов. Оказывается, что в расчетах

эмиссии атомов с начальными распределениями $\cos\vartheta_0/E_0^2$ и $1/E_0^2$ с поверхности граней (001) Ni и (111) Ni наблюдались максимумы эмиссии, которые по своей угловой ширине и направлениям формирования соответствовали экспериментально наблюдаемым максимумам эмиссии. Таким образом, формирование экспериментально наблюдаемых пятен Венера в дважды дифференциальном распределении атомов, распыленных с поверхности, возможно, объясняется действием только поверхностного механизма фокусировки.

Основное внимание при исследовании фокусировки распыленных атомов уделялось исследованиям механизмов фокусировки по полярному углу вылета. Исследованиям фокусировки распыленных атомов по азимутальному углу посвящено достаточно скромное число работ. В связи с этим целью настоящей работы являлось изучение механизмов фокусировки эмитированных атомов по азимутальному углу.

Одной из основных задач настоящей работы являлись расчеты азимутального углового распределения эмитированных атомов (интегрального и с разрешением по полярному углу наблюдения ϑ_e и энергии E_e). Также ставилась цель вы-

явить роль перефокусировки атомов через центр линзы, состоящей из двух атомов – ближайших к эмитируемому атому соседей в плоскости поверхности. Была также поставлена задача выявить вклад в формирование особенностей азимутальных распределений распыленных атомов сильно блокированных распыленных атомов, вылетающих под полярными углами $\vartheta_e < \vartheta_0$, для которых блокировка, т.е. отклонение

по полярному углу в направлении нормали к поверхности вследствие рассеяния на ближайших атомах поверхности, больше отклонения в сторону от нормали к поверхности вследствие преломления на плоском потенциальном барьере.

1. Обзор литературы

В работе [11] была рассчитана фокусировка частиц атомными линзами в кристаллах в импульсном (малоугловом) приближении. Отмечено, что в случае распыления монокристаллов фокусировка атомов отдачи способствует появлению направлений преимущественного распыления (пятен Венера) и при определенных условиях может значительно усилить распыление атомов подповерхностного слоя кристаллической решетки. Рассеяние на одном атоме приводит к сгущению траекторий позади рассеивающего центра, что связано с уменьшением угла рассеяния частиц с ростом прицельного параметра столкновения. Эффект усиливается при рассеянии на двух и большем числе атомов, образующих фокусирующую линзу. Основной характеристикой действия атомной линзы является энергия фокусировки, т.е. энергия, при которой траектории падающих частиц сходятся в заданную точку или, наоборот, расходящийся пучок частиц преобразуется в параллельный [11]. Энергия фокусировки была рассчитана в этой работе для ряда потенциалов взаимодействия.

В статье [12] было показано, что в угловом распределении атомов, эмитированных с поверхности грани (001) Ni при фиксированных энергиях E_0 для начальных функций распределения $\cos\vartheta_0/E_0^2$ и $1/E_0^2$, 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. Анализ показал, что максимумы эмиссии наблюдаются, в частности, для интервала углов наблюдения $\varphi_e = [-1,5^\circ, 1,5^\circ]$, т.е. в направлении на линзу из двух атомов – ближайших соседей в плоскости поверхности. Число максимумов по азимутальному углу соответствует числу фокусирующих линз, состоящих из двух атомов – ближайших к эмитируемому атому соседей в плоскости поверхности.

В работе [12] было использовано две модели: модель 1 и модель 2. В рамках модели 1 кристалл моделировался с помощью блока, состоявшего из 343 атомов, расположенных в 5 слоях, параллельных грани (001). В качестве потенциала взаимодействия атом-атом был использован потенциал Морзе:

$$U(r) = D \{ \exp(-2\alpha(r-r_0)) - 2\exp(-\alpha(r-r_0)) \}. \quad (1)$$

В рамках модели 2 кристалл моделировался 4 атомами – ближайшими к эмитируемому атому соседями в плоскости поверхности. Взаимодействие атомов описывалось 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:

$$U(r) = A \exp(-r/b). \quad (2)$$

Были исследованы механизмы фокусировки атомов, эмитируемых с поверхности грани (001) Ni, для фиксированных значений начальной энергии E_0 . В [12] был обнаружен эффект “перифокусировки” эмитированных атомов по азимутальному углу. На рис. 2 показано, как атомы, эмитируемые первоначально при положительных начальных азимутальных углах вылета φ_0 , наблюдаются при конечных азимутальных углах $\varphi_e < 0^\circ$. Это происходит вследствие сильного отталкивания вылетающего атома от ближайшего из двух атомов линзы (дальнего из двух атомов линзы для рассматриваемого интервала углов φ_e) 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. 2). Подобные зависимости наблюдаются для всех энергий $E_0 \geq 15$ 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. 2 представлены также зависимости азимутального угла наблюдения φ_e от $1 - \cos\vartheta_0$, где ϑ_0 – начальный полярный угол вылета.

Из рис. 2 видно, каким образом в интервал углов наблюдения φ_e , например $[-1,5^\circ, 1,5^\circ]$, попадают “собственные” и “несобственные” по азимутальному углу атомы, т.е. как происходит фокусировка по азимутальному углу (см. также рис. 3). Термин “собственные” по азимутальному углу распыленные атомы был введен в работах [13, 14] для обозначения атомов, для которых интервал углов наблюдения φ_e включает в себя значения начальных углов эмиссии φ_0 , соответственно “несобственные” по азимутальному углу распыленные атомы – это атомы, для которых

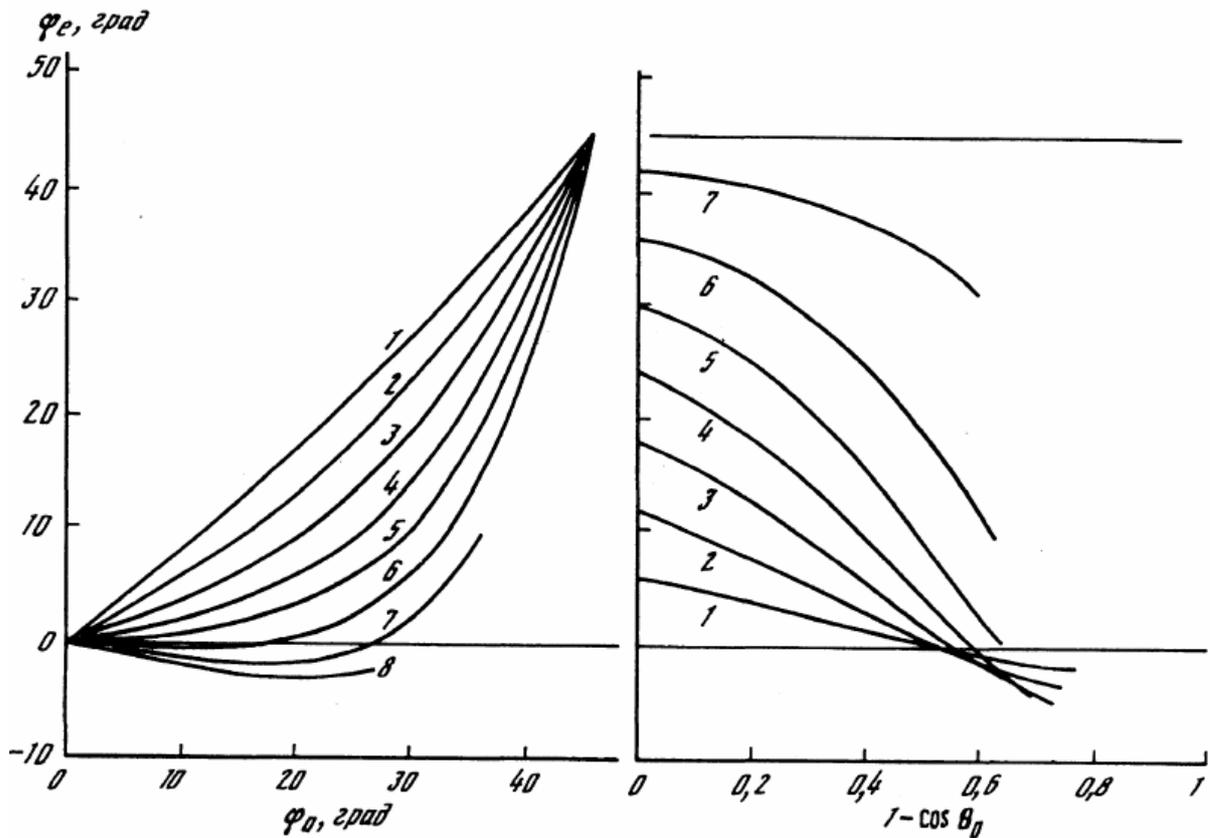


Рис. 2. Зависимости конечного азимутального угла вылета φ_e от начального азимутального угла φ_0 для значений $1 - \cos\vartheta_0$, равных 5/45 (1), 10/45 (2), 15/45 (3), 19/45 (4), 22/45 (5), 25/45 (6), 28/45 (7) и 30/45 (8), и зависимости угла φ_e от $1 - \cos\vartheta_0$ для значений угла φ_0 , равных 6° (1), 12° (2), 18° (3), 24° (4), 30° (5), 36° (6) и 42° (7), рассчитанные по модели 1 для начальной энергии эмиссии атомов с поверхности грани (001) Ni $E_0 = 15$ эВ [12].

интервал углов наблюдения φ_e не включает в себя значения начальных углов эмиссии φ_0 . Начиная с некоторого угла ϑ_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 – это видно из наклона кривых. И, наконец, при φ_0 , большем некоторого значения, вклад атомов в центральный интервал отсутствует.

На рис. 3 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 и энергии E_e для начальной энергии эмиссии $E_0 = 15$ эВ. С увеличением $|\varphi_e - \varphi_0|$, как следует из рисунка, вклад “несобственных” атомов в интервал углов $\varphi_e [-1,5^\circ, 1,5^\circ]$ снижается. При этом фокусировка наблюда-

ется вплоть до угла $\varphi_0 = 30^\circ$. Атомы, попавшие в интервалы углов $\varphi_e [1,5^\circ, 4,5^\circ]$ и $\varphi_e [4,5^\circ, 7,5^\circ]$, вылетали как под углами $\varphi_0 > \varphi_e$, так и под углами $\varphi_0 < 0^\circ$. Для последних атомов происходит перефокусировка через центр линзы. Для последнего из рассматриваемых интервалов углов $\varphi_e [7,5^\circ, 10,5^\circ]$ (интервал, наиболее удаленный от центра линзы) перефокусировка не наблюдается. Все атомы фокусируются в этот интервал углов, вылетая с поверхности под углами $\varphi_0 > \varphi_e$ в результате взаимодействия с ближайшим из атомов, образующих линзу, как для эмитируемых атомов, так и для интервала углов наблюдения φ_e (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. 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, вылетавшие первоначально под сравнительно малыми углами ϑ_0 (ближе к нормали, $\cos\vartheta_0$ не сильно отличается от 1), а вклады из отрицательной области φ_0 дают частицы, вылетавшие первоначально ближе к поверхности ($\cos\vartheta_0$ существенно меньше 1) и отклонившиеся на большой угол в результате сильного взаимодействия с одним из атомов линзы (ближайшим для эмитируемых атомов и дальним для интервала углов наблюдения φ_e). 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.

На рис. 4 представлены распределения вкладов атомов, первоначально эмитируемых при азимутальных углах φ_0 , в распыление в интервалы азимутальных углов наблюдения $\varphi_e [-1,5^\circ, 1,5^\circ]$, $[1,5^\circ, 4,5^\circ]$, $[4,5^\circ, 7,5^\circ]$, $[7,5^\circ, 10,5^\circ]$ (для всех углов ϑ_e , исключая $\vartheta_e = 0^\circ$, и всех энергий E_e), рассчитанные по модели 2 для начальных распределений атомов, эмитируемых из узла на поверхности, изотропного (равного

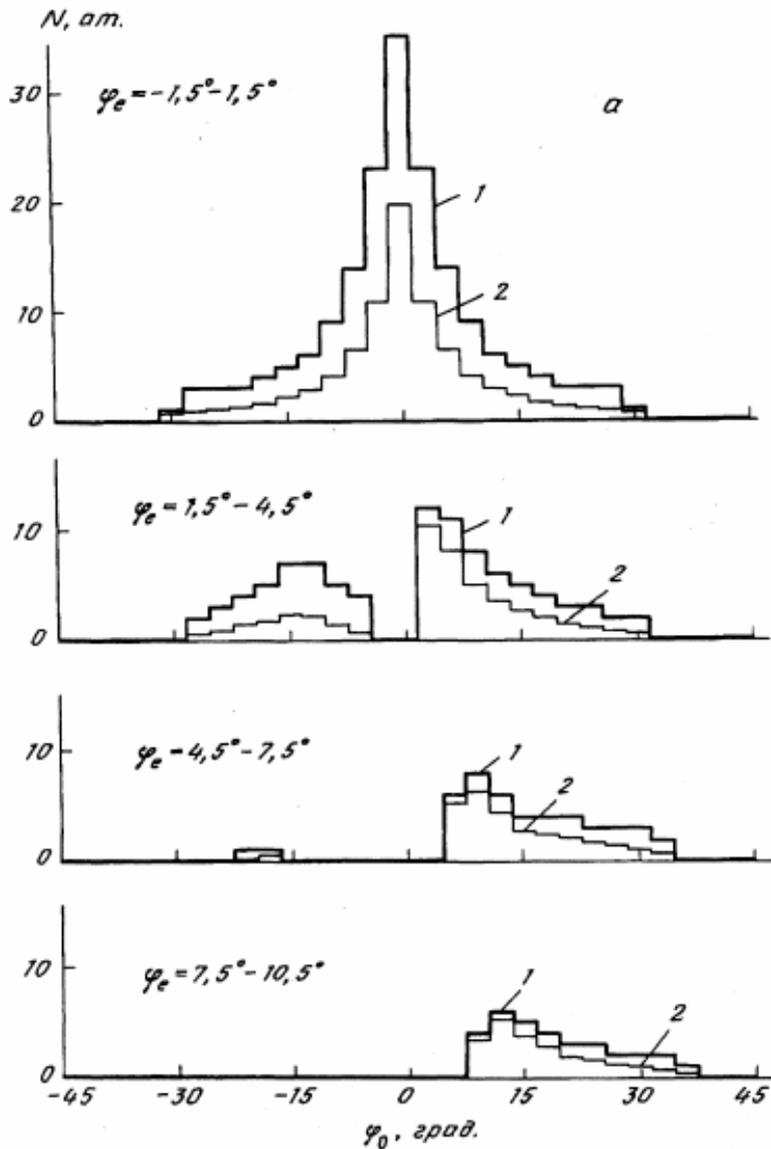


Рис. 3. Распределения вкладов атомов, первоначально эмитируемых при азимутальных углах φ_0 , в распыление в интервалы азимутальных углов наблюдения φ_e $[-1,5^\circ, 1,5^\circ]$, $[1,5^\circ, 4,5^\circ]$, $[4,5^\circ, 7,5^\circ]$ и $[7,5^\circ, 10,5^\circ]$ (для всех углов ϑ_e , исключая $\vartheta_e = 0^\circ$), рассчитанные по модели 1 для начальных распределений атомов, эмитируемых из узла на поверхности грани (001) Ni, изотропного (равного 1 атому) (1) и пропорционального $\cos\vartheta_0$ (2) и начальной энергии эмиссии $E_0 = 15$ эВ [12].

1 атому) (1) и пропорционально $\cos\vartheta_0$ (2) и начальной энергии эмиссии $E_0 = 15$ эВ [12]. Сравнение распределений, представленных на рис. 3 и 4, показало, 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.

Тем не менее, расчеты в работе [12] были проведены для фиксированных на-

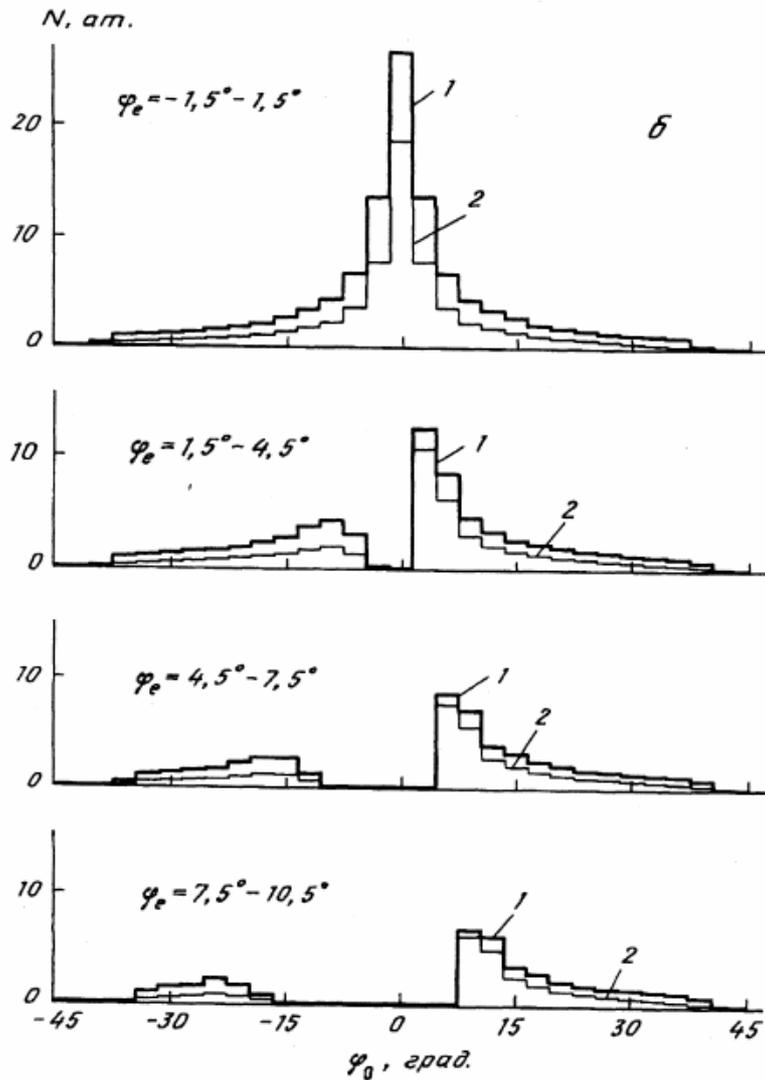


Рис. 4. Распределения вкладов атомов, первоначально эмитируемых при азимутальных углах φ_0 , в распыление в интервалы азимутальных углов наблюдения φ_e $[-1,5^\circ, 1,5^\circ]$, $[1,5^\circ, 4,5^\circ]$, $[4,5^\circ, 7,5^\circ]$, $[7,5^\circ, 10,5^\circ]$ (для всех углов ϑ_e , исключая $\vartheta_e = 0^\circ$), рассчитанные по модели 2 для начальных распределений атомов, эмитируемых из узла на поверхности грани (001) Ni, изотропного (равного 1 атому) (1) и пропорционально $\cos\vartheta_0$ (2) и начальной энергии эмиссии $E_0 = 15$ эВ [12].

чальных энергий E_0 эмитируемых атомов. Картина наблюдаемого распределения эмитированных атомов по азимутальному и полярному углам вылета формируется за счет вылета атомов с поверхности с начальными энергиями E_0 в широком интервале значений. Поэтому представляло большой интерес исследовать механизмы фокусировки атомов при формировании азимутальных угловых распределений эмитированных атомов (интегральные и с разрешением по полярному углу наблюдения ϑ_e и энергии E_e) с использованием начальных функций распределения, на-

пример, $\cos\vartheta_0/E_0^2$ и $1/E_0^2$. Такое исследование было одной из целей настоящей дипломной работы.

В азимутальном направлении, в отличие от полярного, при моделировании распыления в рамках модели с потенциалом Борна-Майера в качестве потенциала взаимодействия двух атомов отсутствует механизм, конкурирующий с фокусировкой потока эмитируемых атомов линзой из двух ближайших атомов поверхности (плоский потенциальный барьер не изменяет азимутальный угол вылета распыляемого атома). Поэтому в распределении эмитированных атомов по азимутальному углу ожидалось формирование резкого максимума в азимутальном направлении $\langle 100 \rangle$ на центр линзы [15].

В расчетах азимутальных угловых распределений эмитированных атомов в работе [15], в которой была рассчитана эмиссия с поверхности гауссовых пучков атомов, учитывались все атомы, вылетевшие под данным азимутальным углом, независимо от энергии и полярного угла вылета. Полученные распределения демонстрируют резкую фокусировку распыленных атомов по азимутальному углу (см. рис. 5). Например, для гауссова пучка с параметрами $\delta\vartheta_0 = 18^\circ$ ($\delta_1 = \sin\vartheta\delta\vartheta_0$) и $\delta_2 = 18^\circ$ распределение распыленных атомов по азимутальному углу оказывается уже начального распределения по азимутальному углу в 13 раз. С уменьшением ширины начального распределения эффективность фокусировки снижается (для пучков с параметрами $\delta\vartheta_0 = 9^\circ$, $\delta_2 = 9^\circ$ и $\delta\vartheta_0 = 6^\circ$, $\delta_2 = 6^\circ$ ширина начального пучка уменьшается приблизительно в 6,5 и 4,28 раз соответственно), однако все еще оказывается гораздо сильнее, чем фокусировка пучка по полярному углу. Расчеты в работе [15] показали, что вклад сильно заблокированных атомов, т.е. атомов эмитированных под углами $\vartheta_e < \vartheta_0$, в формирование узкого максимума азимутального углового распределения не является определяющим. Для узких пучков эмитируемых атомов сильно заблокированные атомы не формируют максимума в азимутальном направлении точно на центр линзы (рис. 5).

Экспериментальные исследования фокусировки распыленных атомов продолжают до настоящего времени. На рис. 6 представлены интегральные по энергии угловые распределения распыленных атомов, полученные в экспериментах в 2009 году [16]. Экспериментальных и расчетных исследований распределений распыленных атомов по азимутальному углу на данный момент проведено не так мно-

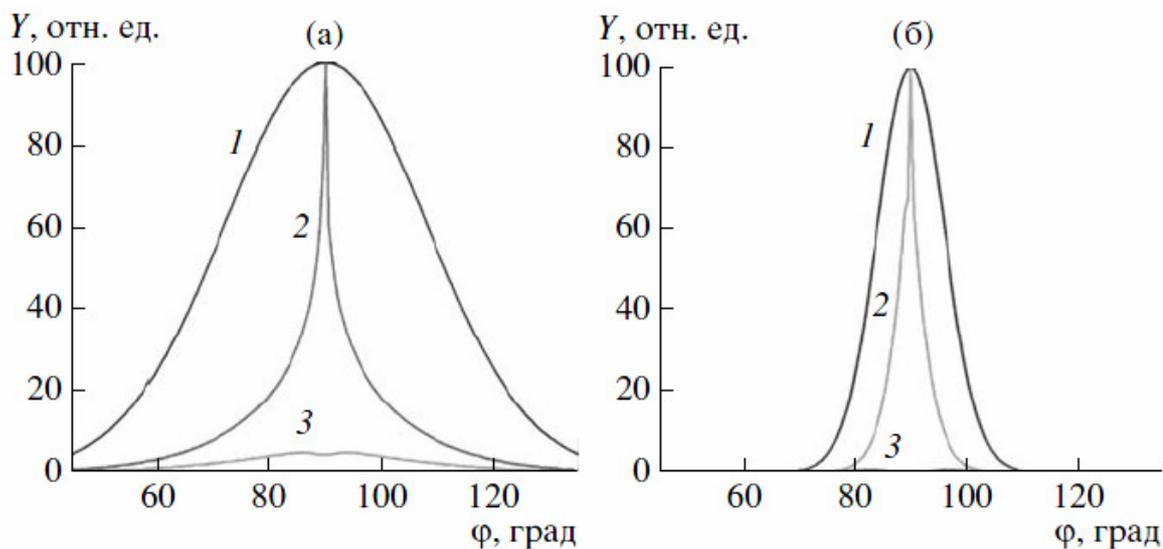


Рис. 5. Гауссовы распределения эмитируемых атомов (1) по углу φ_0 с параметрами $\delta\vartheta_0 = 18^\circ$, $\delta_2 = 18^\circ$ (а) и $\delta\vartheta_0 = 6^\circ$, $\delta_2 = 6^\circ$ (б) и соответствующие интегральные по углу ϑ и энергии E распределения по углу φ всех эмитированных атомов (2) и сильно заблокированных атомов, эмитированных под углами $\vartheta < \vartheta_0$ (3) [15].

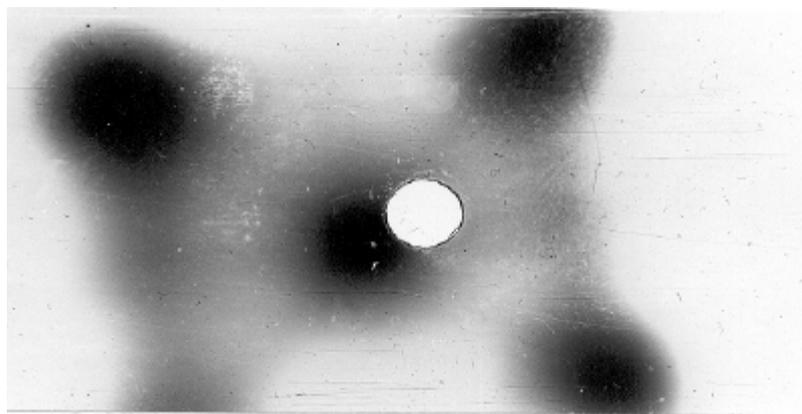


Рис. 6. Пятна Венеры, полученные экспериментально для случая облучения грани (001) Си ионами Ag^+ [16].

го. Далее мы представляем краткий обзор результатов, полученных в этих работах.

На рис. 7 представлены распределения атомов Ni, распыленных при ионной бомбардировке грани (001) Ni_4Mo ионами Ag^+ низких энергий, полученные в расчетах методом молекулярной динамики [17]. Максимум этих распределений наблюдается в направлении центра линзы, состоящей из двух атомов, но не точно

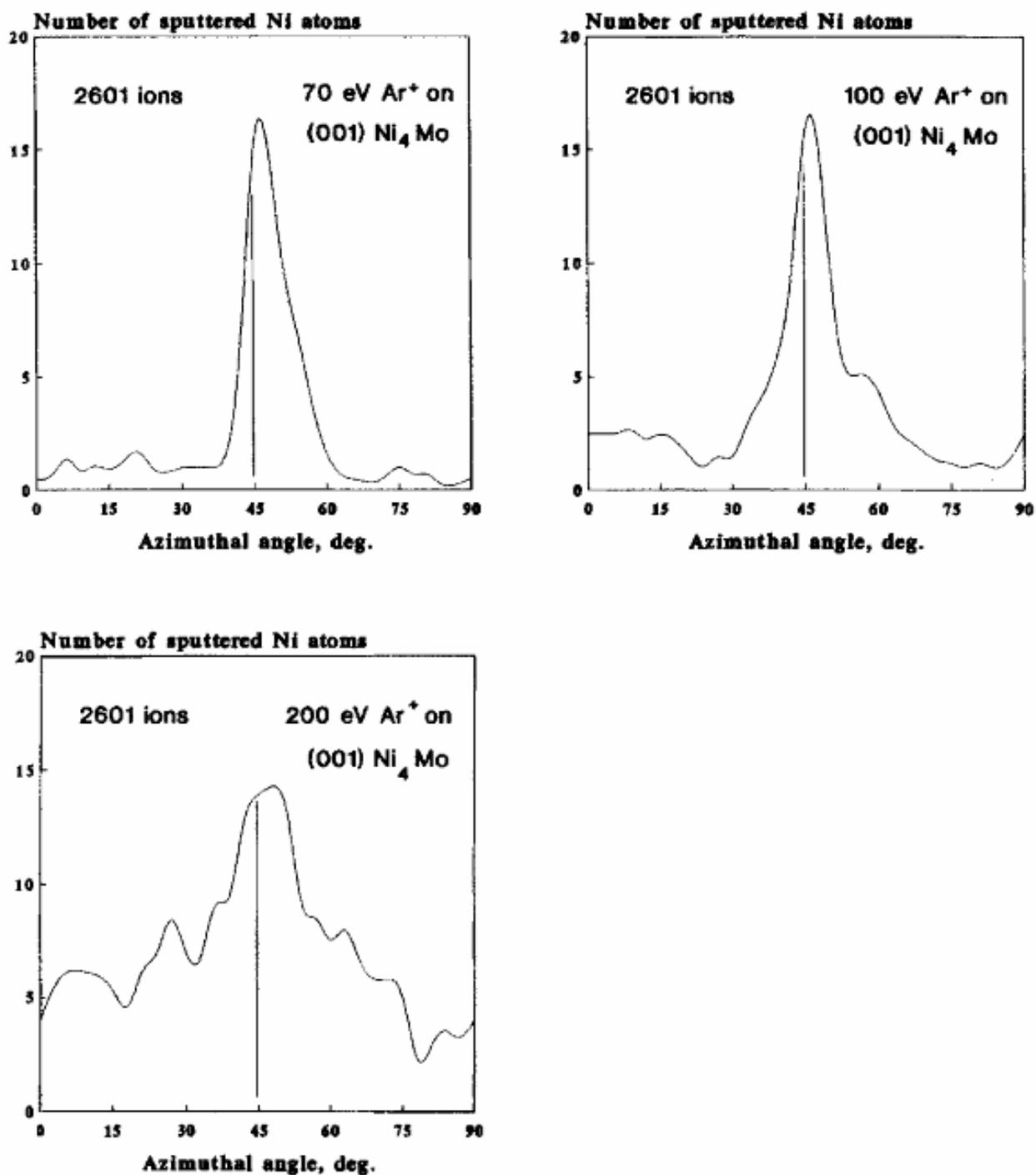


Рис. 7. Интегральные по азимутальному углу (без разрешения по полярному углу и энергии) распределения атомов Ni, распыленных с грани (001) Ni₄Mo при ионной бомбардировке ионами Ar⁺ по нормали к поверхности с энергией 70, 100 и 200 эВ [17].

совпадает с ним. Наблюдаемый сдвиг максимума – признак отсутствия симметрии поверхности (001) Ni₄Mo для атомов Ni, вылетающих с поверхности, который имеет место в модели кристаллита, состоящего из 20 атомов, но не наблюдается в мо-

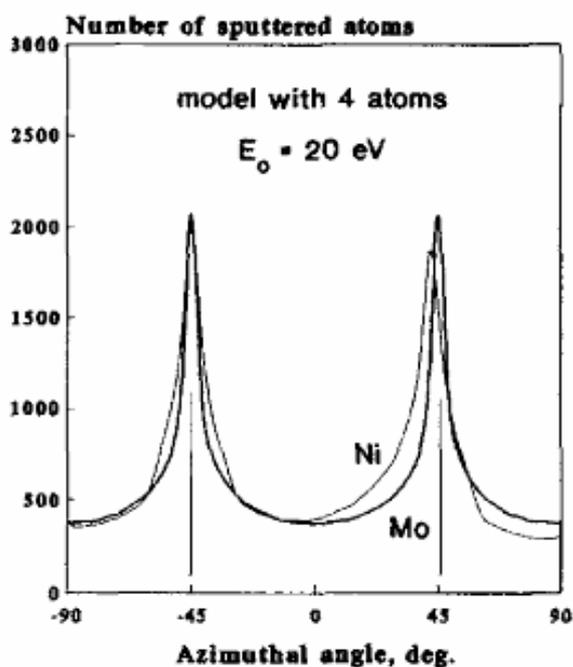
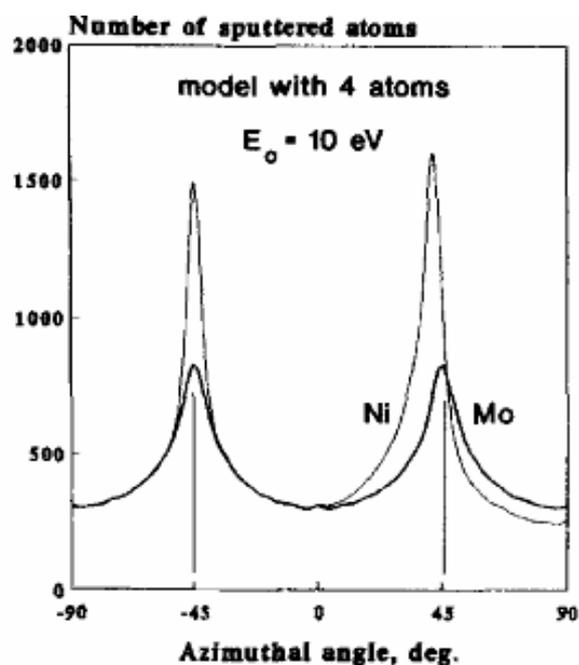
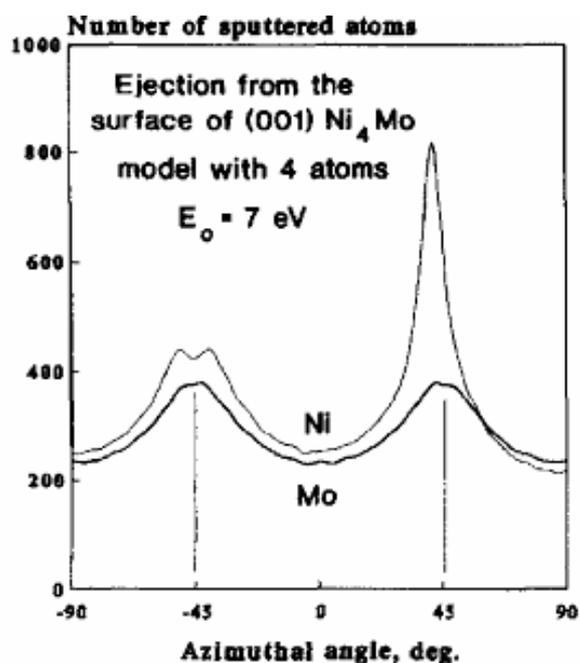


Рис. 8. Интегральные распределения по азимутальному углу (без разрешения по полярному углу и энергии) атомов Ni и Mo, эмитированных с грани (001) Ni₄Mo с начальной энергией E₀ = 7, 10 и 20 эВ. Энергии связи E_{bNi} = E_{bMo} = 4,435 эВ. В модели учитывались только 4 ближайших атома. Для эмитируемых атомов Ni ближайшие атомы – атомы Ni, расположенные в азимутальных направлениях -180°, -90°, 0°, и атом Mo в азимутальном направлении 90°; для эмитируемых атомов Mo – в тех же четырех азимутальных направлениях – ближайшие атомы Ni [17].

дели, в которой кристалл моделировался 4 атомами – ближайшими к эмитируемому атому соседями плоскости поверхности. Для энергий E₀ 7 и 10 эВ атомы Ni фо-

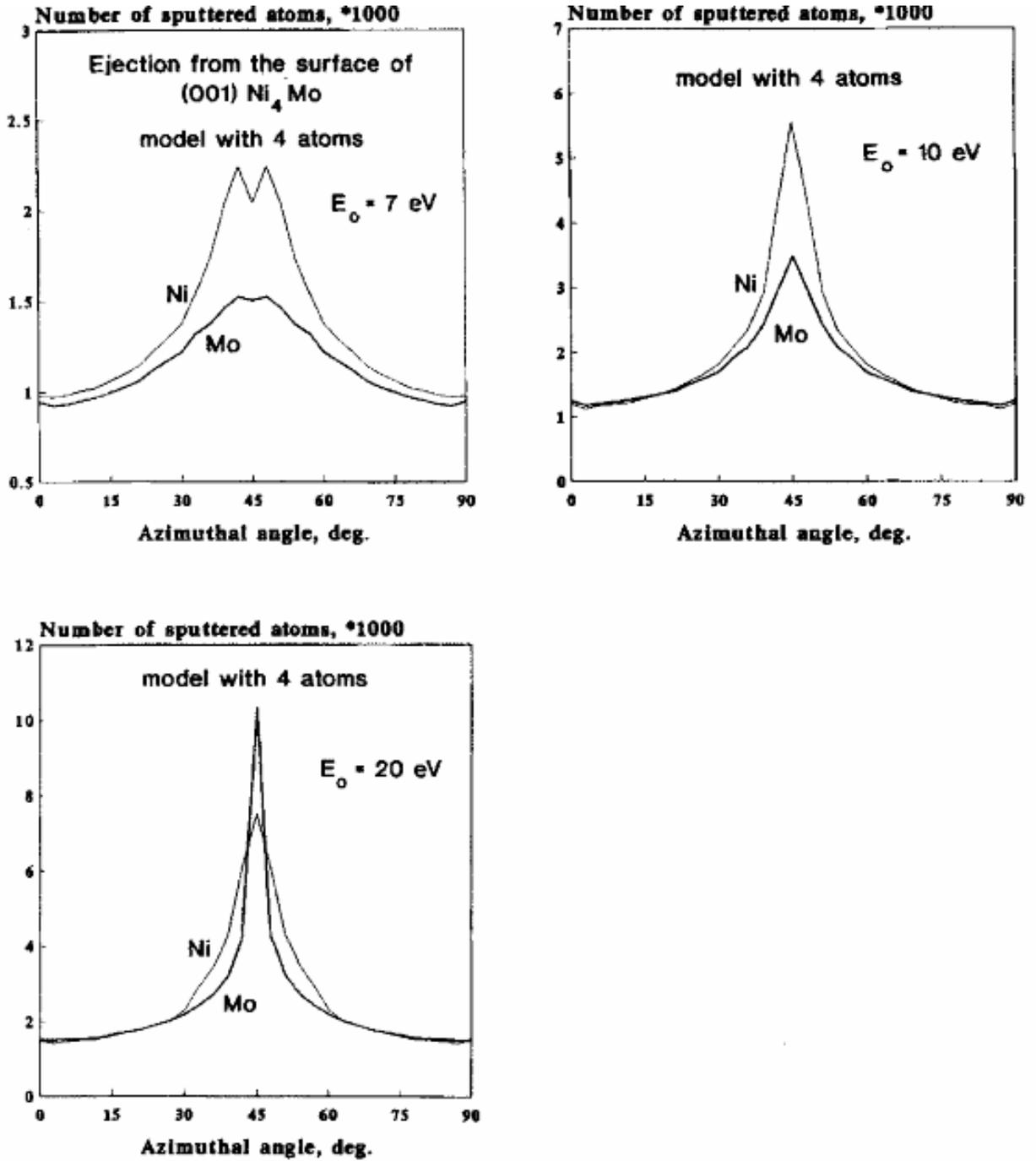


Рис. 9. Интегральные распределения по азимутальному углу (без разрешения по полярному углу и энергии) атомов Ni и Mo, эмитированных с грани (001) Ni₄Mo с начальной энергией $E_0 = 7, 10$ и 20 эВ. Энергии связи $E_{bNi} = E_{bMo} = 4,435$ эВ. В модели учитывались только 4 ближайших атома. Распределения усреднены для всех четырех линз из двух ближайших атомов. Для эмитируемых атомов Ni линзы состоят из атомов Ni в азимутальных направлениях 0° и Mo при 90° , Mo при 0° и Ni при 90° , Ni при 0° и Ni при 90° , Ni при 0° и Ni при 90° . Для вылетающих атомов Mo все 4 линзы состоят из Ni при 0° и Ni при 90° [17].

кусируются по азимутальному углу эффективнее, чем атомы Mo (максимумы распределений по азимутальному углу на полувысоте уже для эмитированных атомов

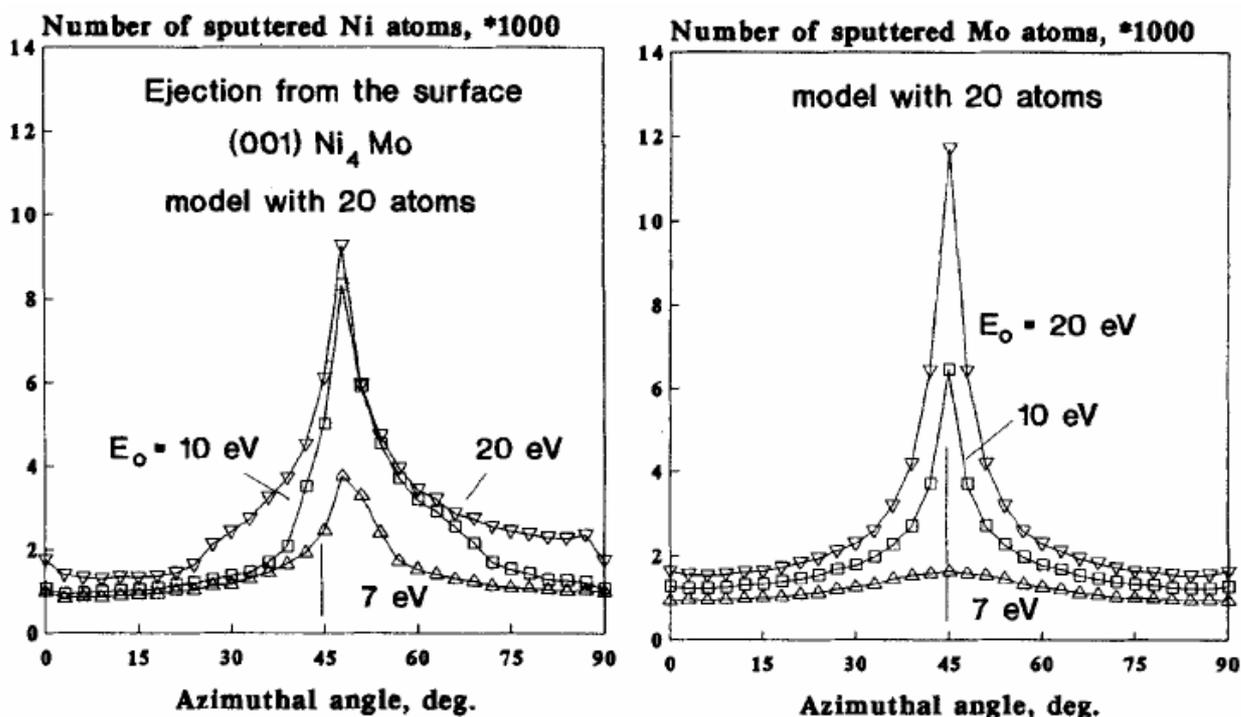


Рис. 10. Интегральные распределения по азимутальному углу (без разрешения по полярному углу и энергии) атомов Ni (слева) и Mo (справа), эмитированных с грани (001) Ni₄Mo с начальной энергией 7, 10 и 20 эВ. Энергии связи $E_{bNi} = E_{bMo} = 4,435$ эВ. Расчеты по модели с 20 соседними атомами [17].

Ni, чем для эмитированных атомов Mo). Для энергии $E_0 = 20$ эВ картина меняется на противоположную (атомы Mo более эффективно фокусируются по азимутальному углу, чем атомы Ni). Для энергии $E_0 = 7$ эВ наблюдается особенность, состоящая в том, что в распределении атомов Ni фокусировка симметричной линзой, состоящей из двух атомов Ni, приводит к формированию локального минимума в азимутальном направлении точно на центр линзы.

Результаты фокусировки атомов Ni и Mo, эмитированных с грани (001) Ni₄Mo, представлены на рис. 8. Сравнение распределений эмитированных атомов Mo, рассчитанных с использованием моделей кристалла, состоящего из 4 и 20 атомов для фиксированных значений начальной энергии E_0 (ср. рис. 9 и 10), показало их хорошее согласие.

Механизмы формирования анизотропных дважды дифференциальных угловых распределений распыленных атомов при бомбардировке грани (0001) Rh ионами Ar⁺ с энергией 1,5 кэВ были рассмотрены в работе [18]. Визуализация каскадов столкновений и распыления атомов при ионной бомбардировке поверхности

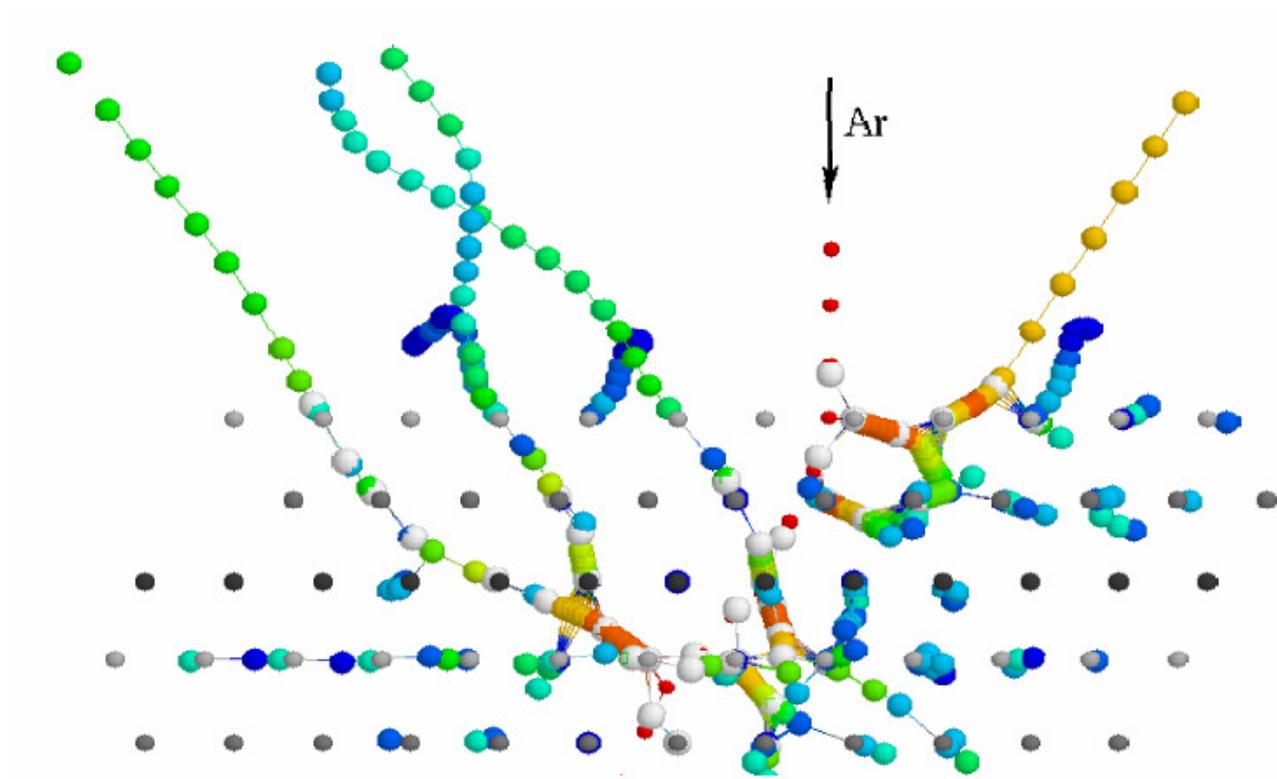


Рис. 11. Визуализация распыления атомов с поверхности. Расчеты методом молекулярной динамики [18].

монокристалла ионами Ar^+ представлена на рис. 11. Получив энергию, атомы поверхностного слоя распыляются, т.е. вылетают с поверхности. Атомы, обладающие большей энергией, обозначены яркими цветами, чем цвет темнее, тем энергия атома меньше. Показаны направления вылета распыленных атомов в результате взаимодействия с другими атомами, видно как меняется полярный угол вылета [18]. На рис. 11 видны три атома, в процессе эмиссии с поверхности сначала заблокированные (рассеянные в сторону нормали к поверхности вследствие отталкивания от ближайших атомов поверхности), а затем их полярный угол вылета постепенно увеличивается вследствие притяжения к поверхности.

На рис. 12 представлены дважды дифференциальные угловые распределения распыленных атомов, рассчитанные для бомбардировки грани (0001) Zr ионами Ar^+ с энергией 1,5 кэВ [18]. С возрастанием энергии происходит сдвиг максимумов полярного углового распределения распыленных атомов сначала в сторону нормали к поверхности, а далее в сторону от нормали к поверхности. Соответствие угловых распределений и интервалов энергии распыленных атомов приведено в таблице на

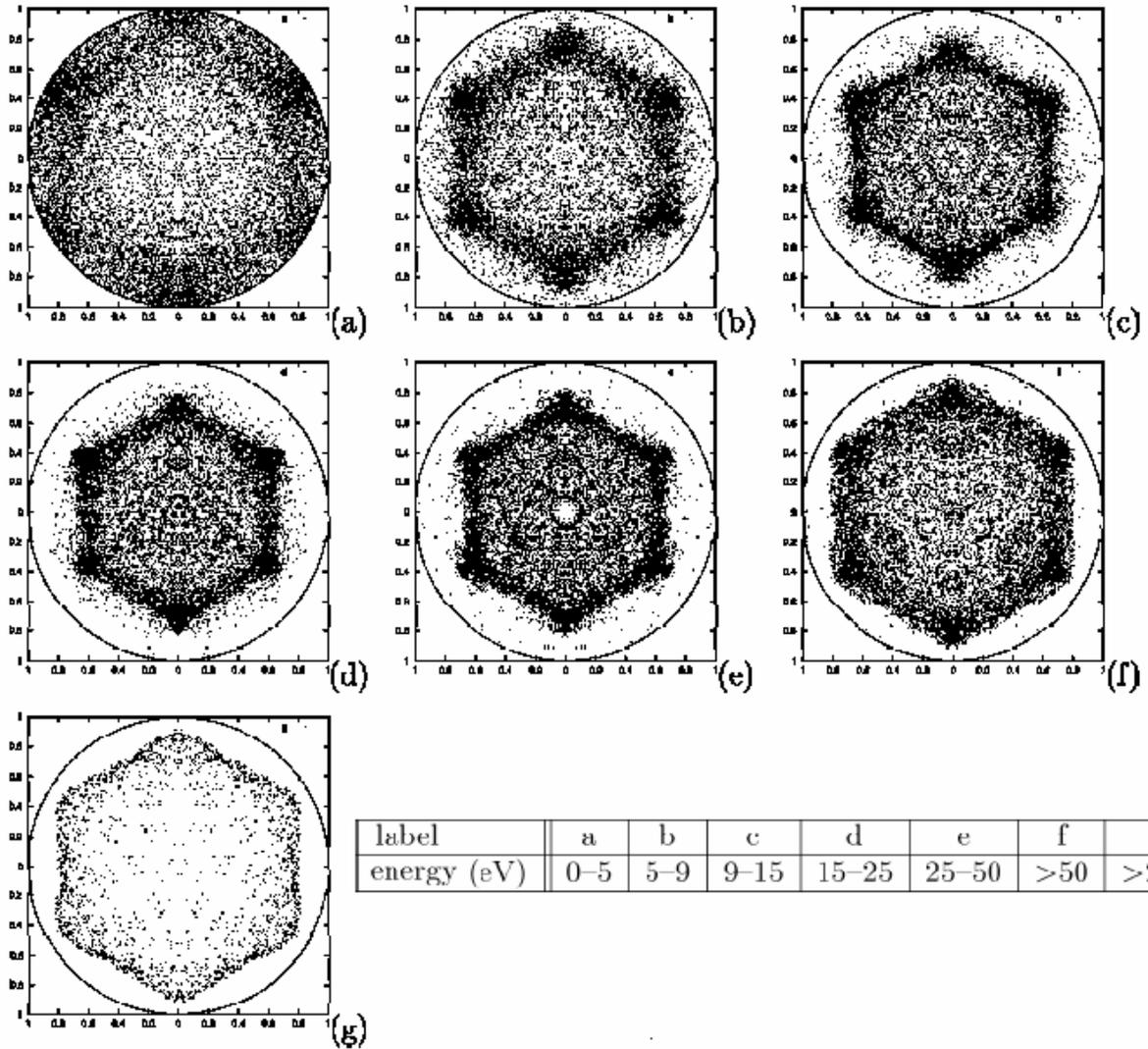


Рис. 12. Дважды дифференциальные угловые распределения распыленных атомов с энергиями в интервалах, представленных в таблице. Расчеты методом молекулярной динамики для бомбардировки грани (0001) Rh ионами Ar^+ с энергией 1,5 кэВ [18].

рис. 12. На рис. 13 представлено дважды дифференциальное угловое распределение распыленных атомов без разрешения по энергии, рассчитанное методом молекулярной динамики для бомбардировки грани (0001) Rh ионами Ar^+ с энергией 1,5 кэВ в работе [19]. Шесть наблюдаемых максимумов эмиссии распыленных атомов (пятен Венера) соответствуют шести линзам из ближайших к эмитируемому атому соседей в плоскости поверхности.

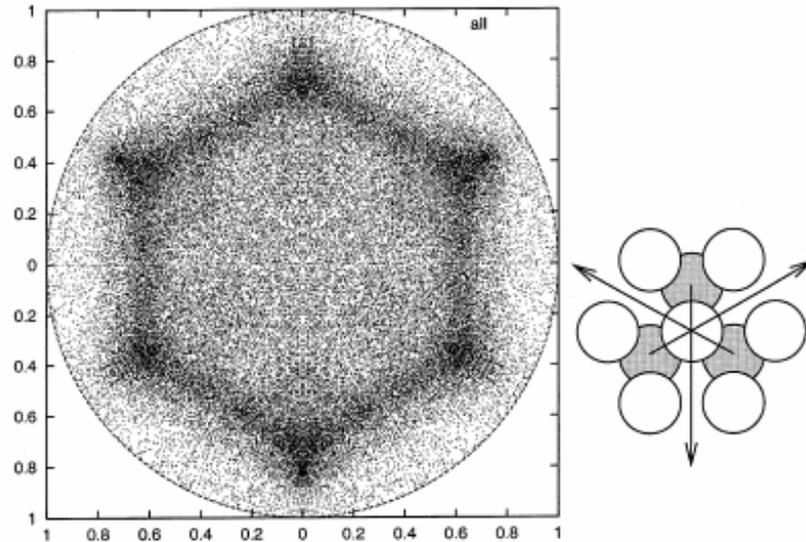


Рис. 13. Дважды дифференциальное угловое распределение распыленных атомов без разрешения по энергии, рассчитанное методом молекулярной динамики для бомбардировки грани (0001) Rh ионами Ar^+ с энергией 1,5 кэВ. Справа представлена схема расположения атомов поверхностного и подповерхностного атомных слоев [19].

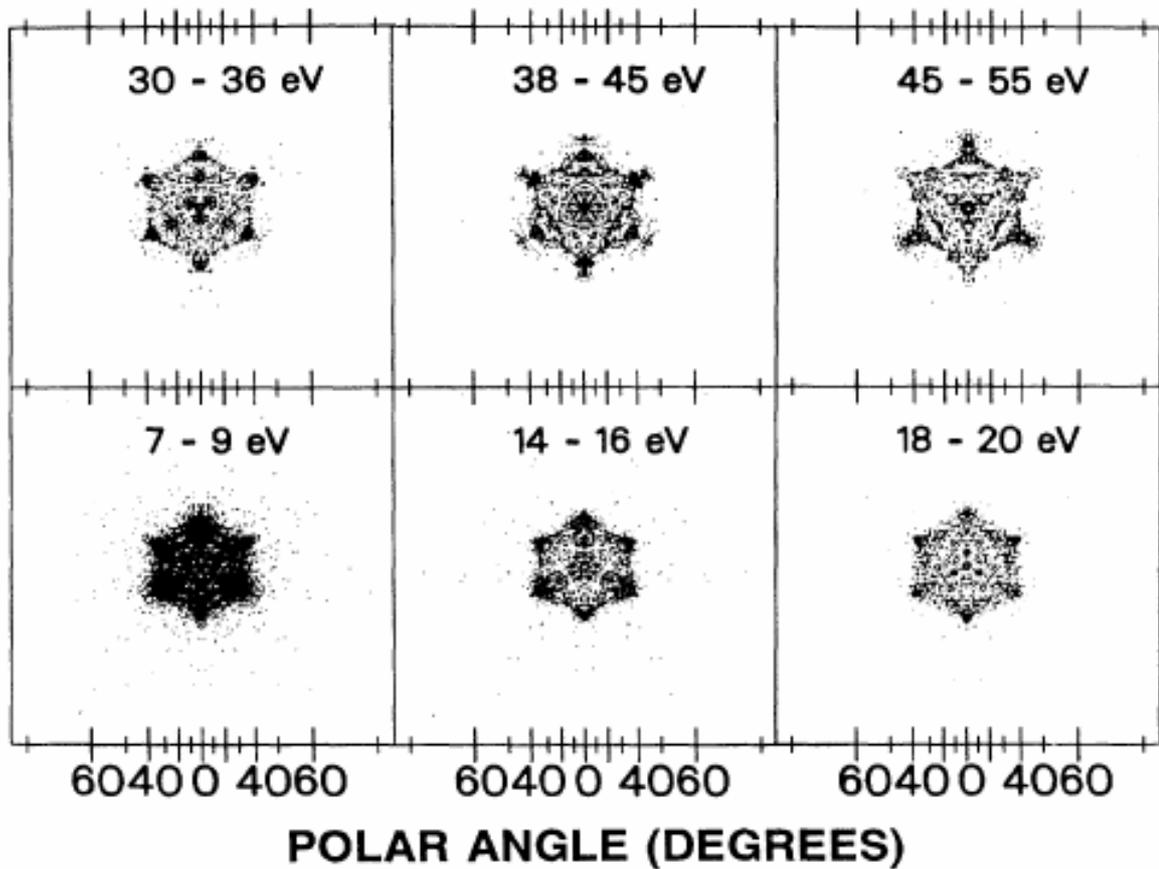


Рис. 14. Дважды дифференциальные угловые распределения распыленных атомов с энергиями в указанных интервалах. Расчеты методом молекулярной динамики для бомбардировки грани (111) Ag ионами Ar^+ с энергией 2 кэВ [20].

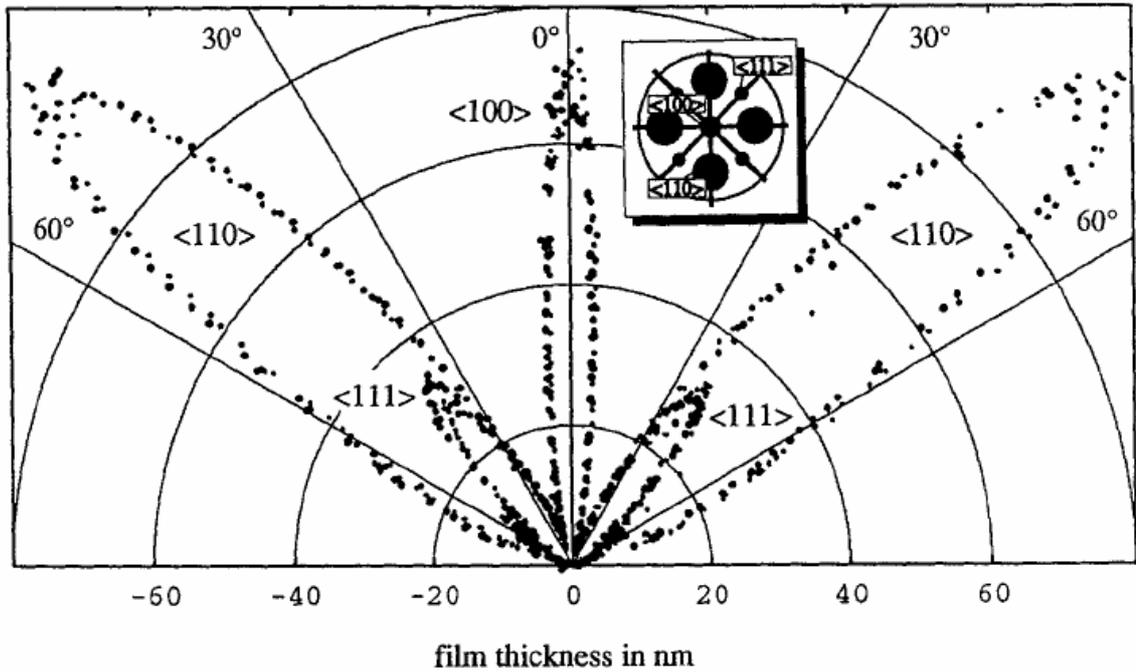


Рис. 15. Распределение распыленных атомов по полярному углу вылета для бомбардировки грани (001) Ni ионами Ar^+ с энергией 23 кэВ под углом $\vartheta = 18^\circ$ от нормали к поверхности. Эксперимент [21]. На рисунке совмещены распределения, наблюдаемые в азимутальных направлениях 0° и 45° .

В работе [20] были рассчитаны дважды дифференциальные угловые распределения атомов, распыленных при бомбардировке грани (111) Ag ионами Ar^+ с энергией 2 кэВ с разрешением по энергии (см. рис.14). С возрастанием энергии происходит сдвиг максимумов полярного углового распределения распыленных атомов сначала в сторону нормали к поверхности, а далее в сторону от нормали к поверхности. Этот немонотонный сдвиг аналогичен сдвигу, наблюдавшемуся в работе [18].

В работе [21] было проведено экспериментальное исследование угловых распределения распыленных атомов для случая бомбардировки ионами Ar^+ грани (001) Ni. Угол падения ионов на грань (001) Ni составлял 18° от нормали к поверхности. Полярное угловое распределение распыленных атомов представлено на рис. 15.

2. Модель расчета

Была рассчитана эмиссия атомов с поверхности граней (001) Ni и (001) Au. В расчетах были использованы функции распределения эмитируемых атомов по начальным углам и энергии $\cos\vartheta_0/E_0^2$ [22, 23] и $1/E_0^2$ (см. работу [24]). В модели поверхности граней (001) Ni и (001) Au были представлены минимальным фрагментом кристалла – кольцом из четырех атомов поверхности, ближайших к узлу решетки, из которого проходила эмиссия атома (рис. 16). Для расчета эмиссии использовался метод молекулярной динамики. Взаимодействие эмитируемого атома с ближайшими атомами описывалось потенциалом отталкивания, а на достаточно большом удалении атома от поверхности вводился плоский потенциальный барьер. В качестве потенциала взаимодействия атом-атом использовался потенциал Борна-Майера $U(r) = A\exp(-r/b)$ с параметрами для эмиссии с грани (001) Ni $A = 23853,96$ эВ и $b = 0,196 \text{ \AA}$ из работы [25], высота потенциального барьера (энергия связи) составляла 4,435 эВ.

Атом выбивался из узла на поверхности с энергией E_0 под углами ϑ_0 (отсчитывался от нормали к поверхности) и φ_0 (отсчитывается от направления $\langle 100 \rangle$ на центр линзы из двух ближайших атомов поверхности). Начальная энергия E_0 изменялась от 0,5 до 100 эВ. Шаг по E_0 составлял 0,1 эВ. Шаг по φ_0 был равен 3° , по $(1 - \cos\vartheta_0) - 1/45$. В более детальных расчетах шаг по φ_0 был равен $0,2^\circ$, по $(1 - \cos\vartheta_0) - 1/450$.

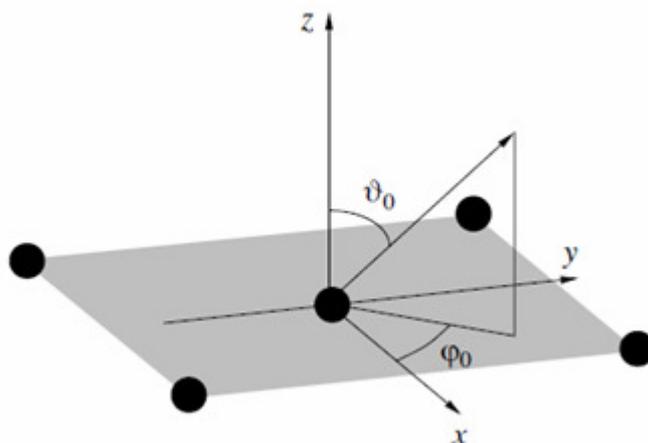


Рис. 16. Фрагмент грани (001) Ni, используемый в расчетах. Показаны углы ϑ_0 и φ_0 для атома, эмитируемого из центрального узла.

Считалось, что распыление происходит только за счет атомов поверхностного слоя. Это допущение вполне оправдано 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 [26], 82% для случая ионной бомбардировки Mo [27]).

Угол, на который происходит отклонение эмитируемого атома при столкновении с атомами линзы, зависит от жесткости потенциала взаимодействия атом-атом. Блокировка оказывается более выраженной при более жестком потенциале взаимодействия сталкивающихся атомов. При переходе к элементам с большим атомным номером Z , например, при переходе от Ni к Au, возрастает константа A в выражении (2) для потенциала взаимодействия атом-атом [25]. В частности, используя выражения для констант потенциала взаимодействия атом-атом [25], получаем:

$$A_{Au}/A_{Ni} = (Z_{Au}/Z_{Ni})^{5/3}. \quad (3)$$

Согласно (3), при переходе от Ni к Au константа A возрастает в 5.63 раза [28].

3. Фокусировка эмитированных атомов по азимутальному углу

3.1. Интегральные распределения распыленных атомов по углам φ_e и ϑ_e

На рис. 17 представлены интегральные распределения атомов, эмитированных с поверхности граней (001) Ni и (001) Au, по азимутальному углу φ_e для всех энергий E_e и полярных углов ϑ_e для начальной функции распределения $\cos\vartheta_e/E_e^2$. Интервалы углов наблюдения φ_e (угловая апертура детектора по азимутальному углу) составили 3° . Интеграл от этих распределений по углу φ_e равен полному числу атомов, распыленных в интервал азимутальных углов наблюдения φ_e [45° , 135°]. Максимум этих распределений наблюдается в азимутальном направлении на центр линзы из двух ближайших атомов к поверхности – в интервале углов наблюдения φ_e [$88,5^\circ$, $91,5^\circ$]. Для этого интервала углов φ_e число распыленных атомов Au в $\sim 1,73$ раза превышает число распыленных атомов Ni. Это связано с более жестким потенциалом взаимодействия двух атомов Au и более выраженной блокировкой (рассеянием в сторону нормали к поверхности) эмитируемых атомов Au, вследствие чего большая доля атомов Au преодолевает плоский потенциальный барьер, т.е. распыляется.

Была рассчитана степень анизотропии для эмиссии атомов с поверхности граней (001) Ni и (001) Au, т.е. отношение максимального числа распыленных атомов к минимальному. Для Ni она равна $\sim 3,99$, а для Au – $\sim 8,63$. Данная разница объясняется более жестким потенциалом взаимодействия двух атомов Au, т.е. константой A в потенциале Борна – Майера, которая для Au в $\sim 5,63$ раза выше, чем для Ni [28].

Расчеты были проведены и с использованием начальной функции распределения $1/E_e^2$ для эмиссии атомов с поверхности грани (001) Ni. Интегральные распределения эмитированных атомов по азимутальному углу φ_e для всех энергий E_e и полярных углов вылета ϑ_e для обеих функций распределения для эмиссии атомов с грани (001) Ni приведены на рис. 18. Максимум распределения для начальной функции распределения $1/E_e^2$ значительно превышает максимум распределения для функции $\cos\vartheta_e/E_e^2$. Степень анизотропии, равная $\sim 6,12$, оказалась в $\sim 1,5$ раза выше, чем степень анизотропии, рассчитанная для функции распределения $\cos\vartheta_e/E_e^2$.

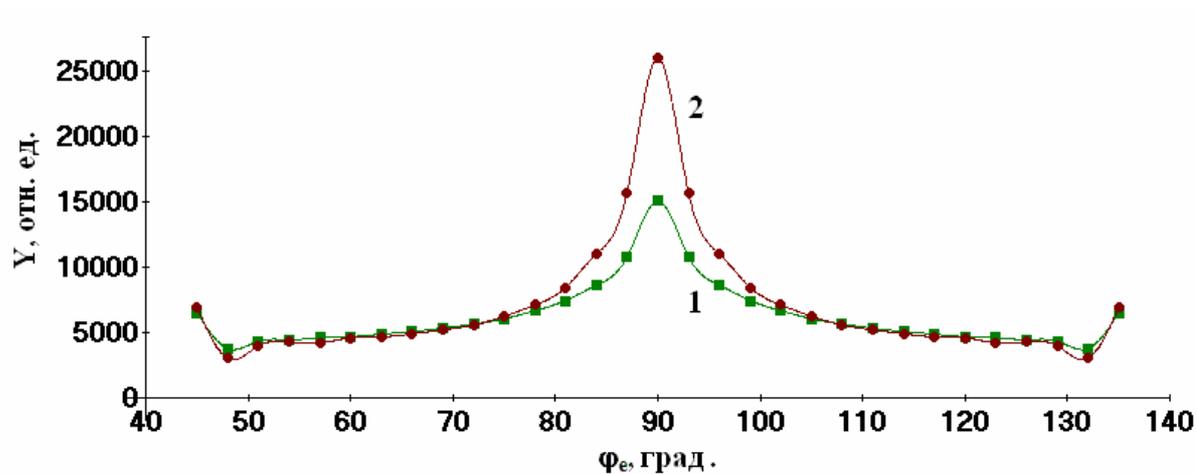


Рис. 17. Интегральные распределения по азимутальному углу φ_e атомов, эмитированных с поверхности граней (001) Ni (1) и (001) Au (2), для всех энергий E_e и полярных углов вылета ϑ_e , рассчитанные для функции распределения $\cos\vartheta_e/E_0^2$.

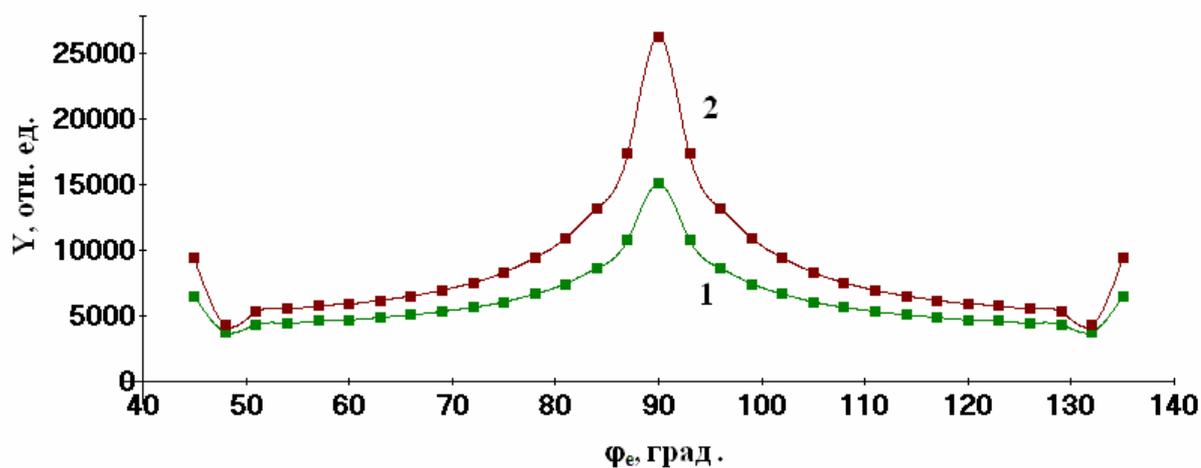


Рис. 18. Интегральные распределения по азимутальному углу φ_e атомов, эмитированных с поверхности грани (001) Ni, для всех энергий E_e и полярных углов вылета ϑ_e , рассчитанные для функций распределения $\cos\vartheta_e/E_0^2$ (1) и $1/E_0^2$ (2).

Кроме распределений распыленных атомов по углу наблюдения φ_e были рассчитаны распределения распыленных атомов по начальному азимутальному углу φ_o для всех энергий и полярных углов вылета. Результаты, рассчитанные для начальной функции распределения $\cos\vartheta_o/E_o^2$, представлены на рис. 19. В полученных результатах по начальному азимутальному углу вылета видно, что в интервалах на центр линзы для эмиссии атомов с грани (001) Ni появляется минимум в отличие от распределения по углу φ_e . Однако, для эмиссии атомов с грани (001) Au были получены результаты, которые в интегральном распределении по начальному углу φ_o в азимутальных направлениях на центр линзы дают максимум. Таким образом, наблюдается качественное различие в эмиссии атомов с поверхности граней (001) Ni и (001) Au, несмотря на то, что эмиссия атомов происходит с одной и той же грани монокристаллов, имеющих одинаковую г.ц.к. структуру кристаллической решетки. Это различие, как и в работе [28], объясняется тем, что при вылете атома в азимутальном направлении вблизи центра линзы с грани (001) Au два рассеивающих атома линзы, действующие совместно, блокируют эмитируемый атом даже больше, чем при вылете атома в направлении на атом, вследствие намного более жесткого потенциала взаимодействия двух атомов Au. Это утверждение оказывается неверным для эмиссии атомов с грани (001) Ni вследствие более мягкого потенциала взаимодействия атом-атом. Таким образом, распределения сигнала по начальному азимутальному углу φ_o для эмиссии с граней (001) Ni и (001) Au качественно различаются. При этом в азимутальном направлении на центр линзы для эмиссии атомов с грани (001) Ni линза из двух атомов оказывается более “проходной”, чем в азимутальном направлении на атом. В азимутальном направлении на центр линзы для эмиссии атомов с грани (001) Au линза из двух атомов оказывается более “жесткой”, чем в азимутальном направлении на атом.

Также был рассчитан вклад сильно заблокированных атомов, эмитированных под углами $\vartheta_e < \vartheta_o$, в распределение распыленных атомов по начальному углу вылета φ_o . Для сильно заблокированных атомов их отклонение в направлении нормали к поверхности $\vartheta_o - \vartheta_i$ вследствие эффекта блокировки больше отклонения к поверхности $\vartheta_e - \vartheta_i$ вследствие преломления на плоском потенциальном барьере. Таким образом, $\vartheta_o - \vartheta_i > \vartheta_e - \vartheta_i$, поэтому $\vartheta_e < \vartheta_o$. Заметим, что вылет таких атомов не

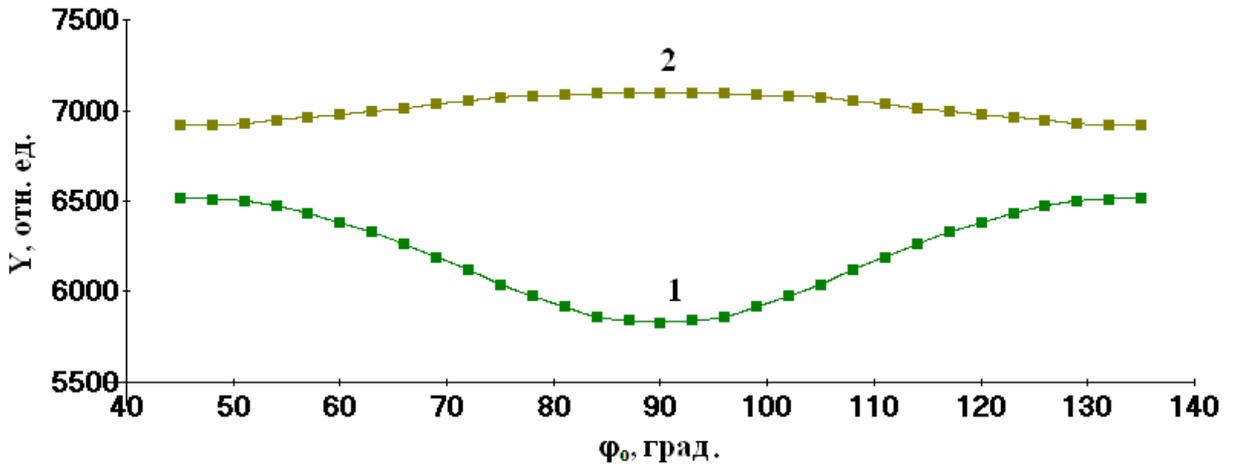


Рис. 19. Интегральные распределения по начальному азимутальному углу φ_0 атомов, эмитированных с поверхности граней (001) Ni (1) и (001) Au (2) для всех энергий E_e , полярных углов вылета ϑ_e и азимутальных углов вылета φ_e , рассчитанные для функции распределения $\cos\vartheta_e/E_e^2$.

возможен в моделях без учета атомной дискретности поверхности на стадии эмиссии атомов с поверхности, например, в моделях [22, 23]. Оказалось, что для эмиссии атомов с грани (001) Ni с начальной функцией распределения $\cos\vartheta_e/E_e^2$ вклад сильно блокированных атомов не превышает 46,6%, при этом в направлении на центр линзы их нет совсем (для азимутальных углов вылета $\varphi_0 = 87^\circ, 90^\circ, 93^\circ$). В то же время, для эмиссии атомов с грани (001) Au с той же начальной функцией распределения для азимутальных углов вылета $\varphi_0 = 87^\circ, 90^\circ, 93^\circ$ вклад сильно блокированных атомов составил 84,0%, максимальный вклад сильно блокированных атомов достигается при начальных азимутальных углах вылета, близких к азимутальному направлению на атом, и составляет 90,6%.

Также были рассчитаны интегральные распределения эмитированных атомов по начальному азимутальному углу φ_0 для эмиссии атомов с грани (001) Ni для начальной функции распределения $1/E_e^2$. Полученные результаты показали, что для азимутальных углов вылета $\varphi_0 = 87^\circ, 90^\circ, 93^\circ$ наблюдается минимум числа расплывших атомов. Вклад сильно блокированных атомов в это распределение выше, чем в расчетах с начальной функцией распределения $\cos\vartheta_e/E_e^2$, максимальный вклад сильно блокированных атомов также наблюдается в направлениях на атом и достигает значения 57,3%.

На рис. 20 представлены распределения всех эмитированных атомов (1) и только сильно блокированных эмитированных атомов (2) по азимутальному углу наблюдения φ_e , интегральные по всем энергиям E_e и полярным углам ϑ_e , для эмиссии атомов с грани (001) Ni с начальной функцией распределения $\cos\vartheta_e/E_0^2$. На рис. 21 представлено соответствующее распределение вклада сильно блокированных атомов по углу φ_e . Вклад сильно блокированных атомов в интегральное распределение эмитированных атомов по азимутальному углу φ_e для этой начальной функции распределения при всех углах φ_e составляет меньше 50%, при этом наибольший вклад наблюдается в наиболее “жестком” направлении – в азимутальном направлении на атом (46,6%). Как видно из рис. 21, формирование максимума распределения, представленного на рис. 20 (распределение 1), в азимутальном направлении на центр линзы происходит при минимальном вкладе сильно блокированных атомов (13,2%).

На рис. 22 приведены распределения всех эмитированных атомов (1) и только сильно блокированных эмитированных атомов (2) по азимутальному углу наблюдения φ_e , интегральные по всем энергиям E_e и полярным углам ϑ_e , для эмиссии атомов с грани (001) Ni с начальной функцией распределения $1/E_0^2$. На рис. 23 представлено соответствующее распределение вклада сильно блокированных атомов по углу φ_e . Для начальной функции распределения $1/E_0^2$ число сильно блокированных атомов больше, чем для начальной функции распределения $\cos\vartheta_e/E_0^2$. Это объясняется тем, что для начальной функции распределения $1/E_0^2$ (изотропного вылета атомов из узла на поверхности) большая часть распыленных атомов вылетала под большими углами ϑ_e , т.е. ближе к поверхности. Таким образом, блокировка атомов в этом случае проявляется более сильно. Тем не менее, значительный вклад сильно блокированных атомов наблюдается только в азимутальном направлении на атом (57,3%), формирование максимума распределения в азимутальном направлении на центр линзы происходит при минимальном вкладе сильно блокированных атомов (17,8%).

Аналогичные распределения были рассчитаны для эмиссии атомов с грани (001) Au. На рис. 24 представлены распределения всех эмитированных атомов (1) и только сильно блокированных эмитированных атомов (2) по азимутальному углу

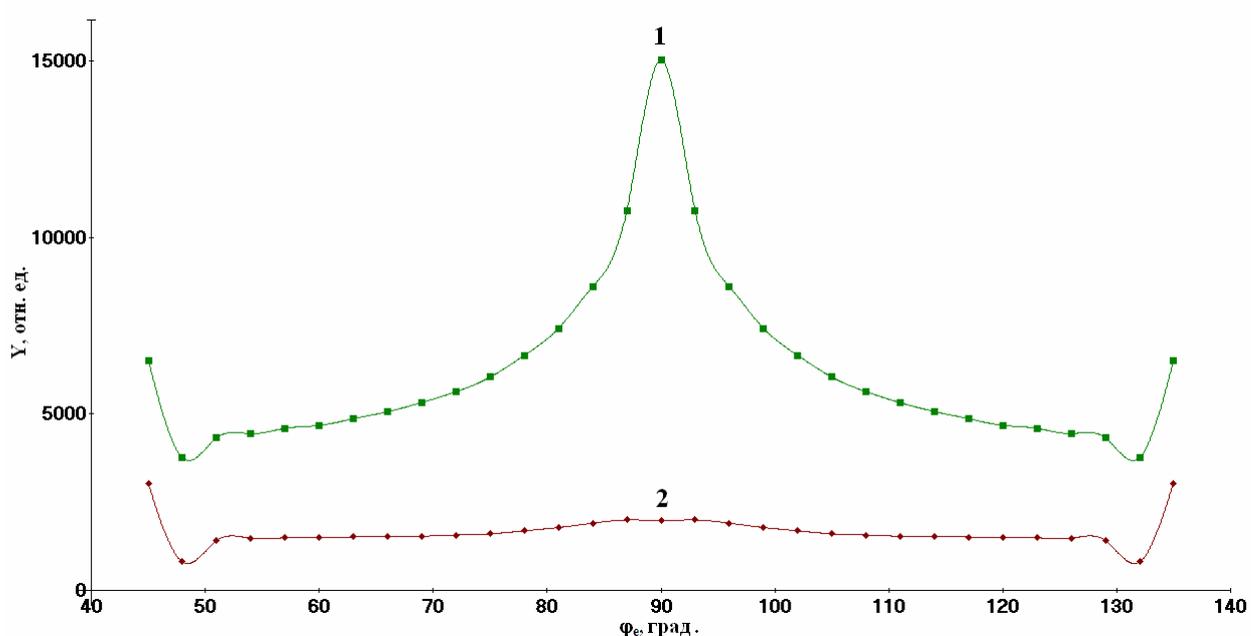


Рис. 20. Интегральные распределения по азимутальному углу φ_e всех эмитированных атомов (1) и только сильно заблокированных эмитированных атомов (2) для всех энергий E_e и полярных углов вылета ϑ_e . Расчет для эмиссии атомов с поверхности грани (001) Ni. Начальная функция распределения $\cos\vartheta_e/E_0^2$.

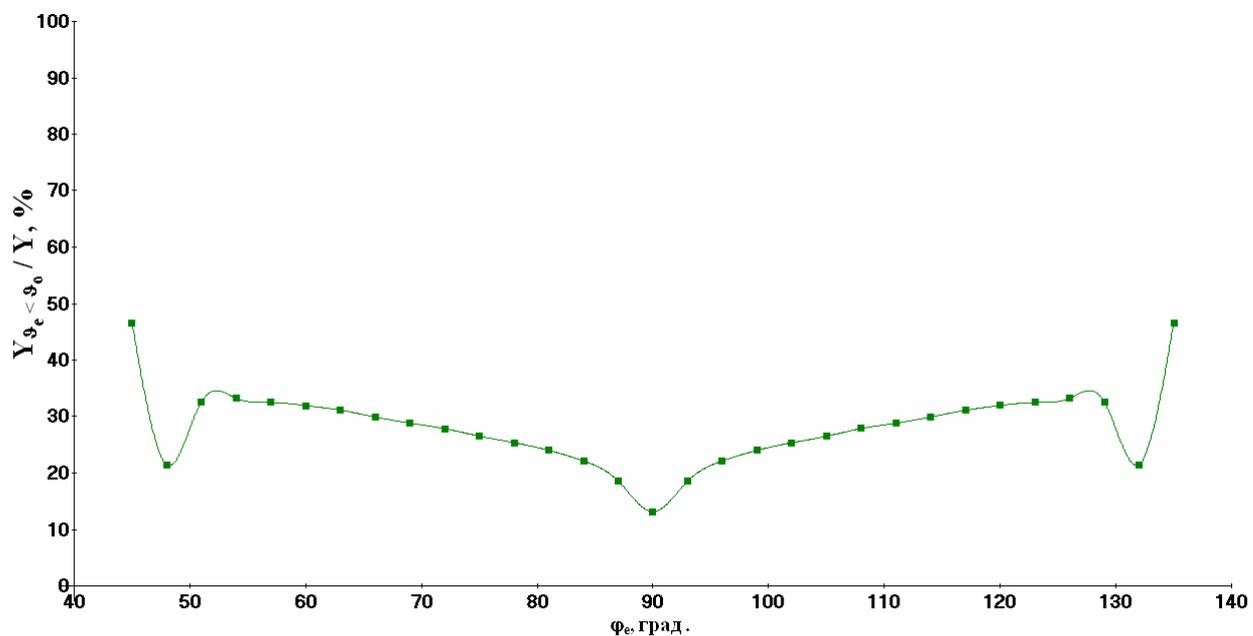


Рис. 21. Распределение вклада сильно заблокированных эмитированных атомов по азимутальному углу наблюдения φ_e для результатов, представленных на рис. 20.

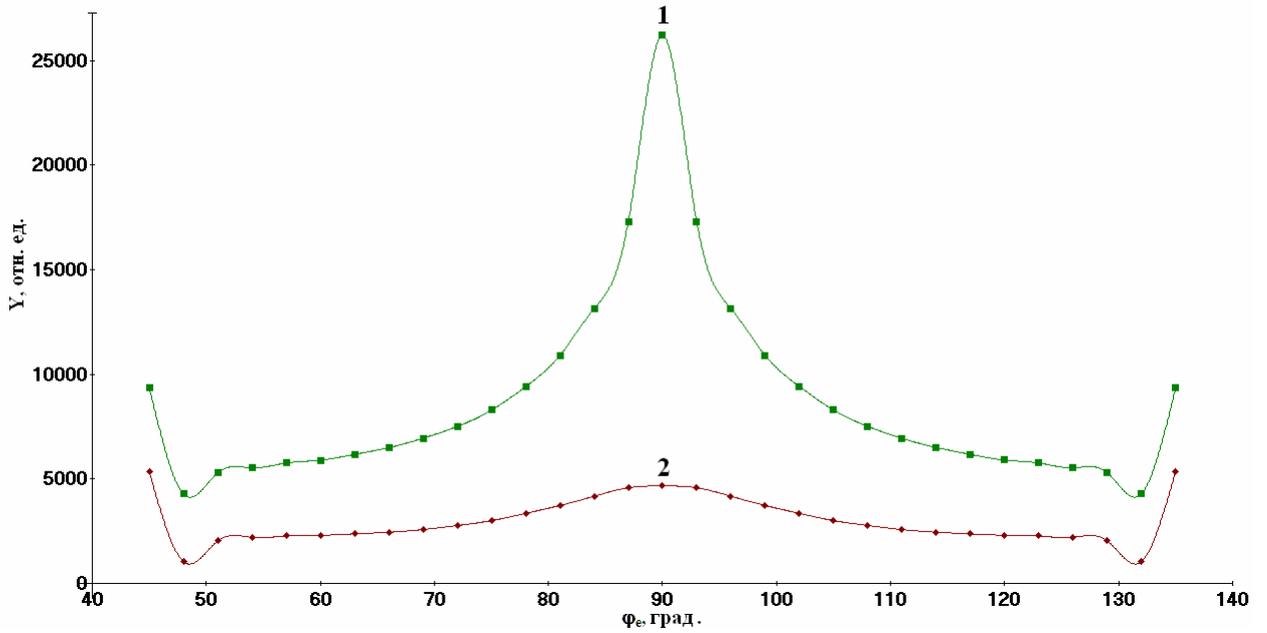


Рис. 22. Интегральные распределения по азимутальному углу φ_e всех эмитированных атомов (1) и только сильно заблокированных эмитированных атомов (2) для всех энергий E_e и полярных углов вылета ϑ_e . Расчет для эмиссии атомов с поверхности грани (001) Ni. Начальная функция распределения $1/E_o^2$.

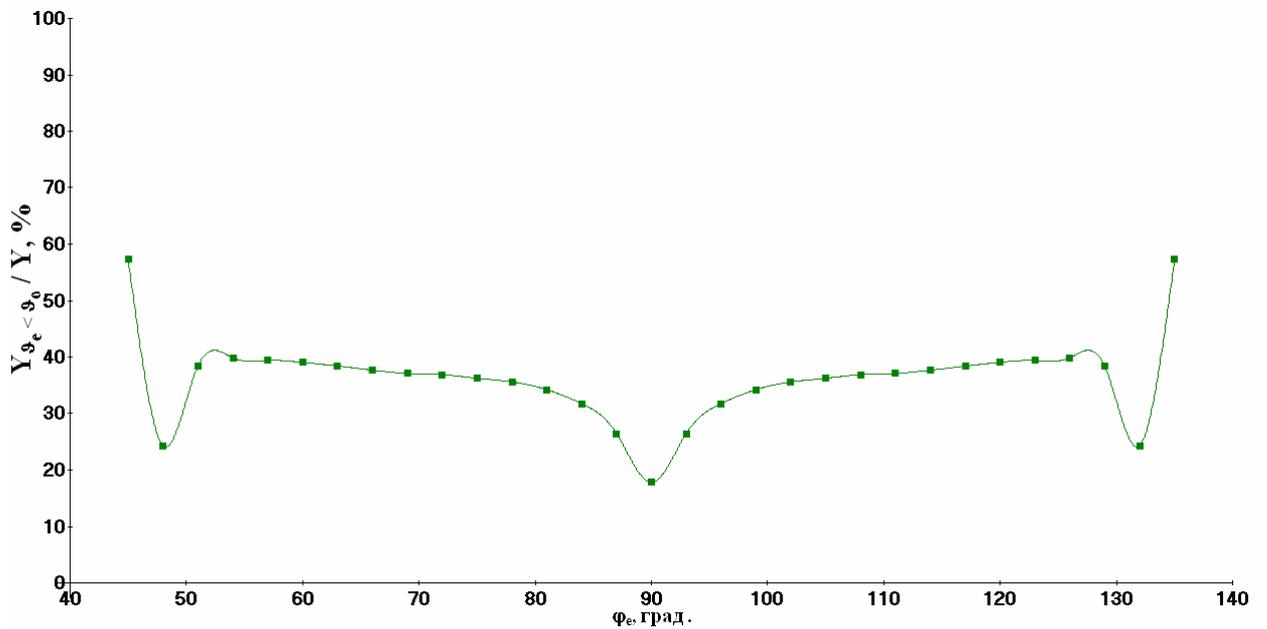


Рис. 23. Распределение вклада сильно заблокированных эмитированных атомов по азимутальному углу наблюдения φ_e для результатов, представленных на рис. 22.

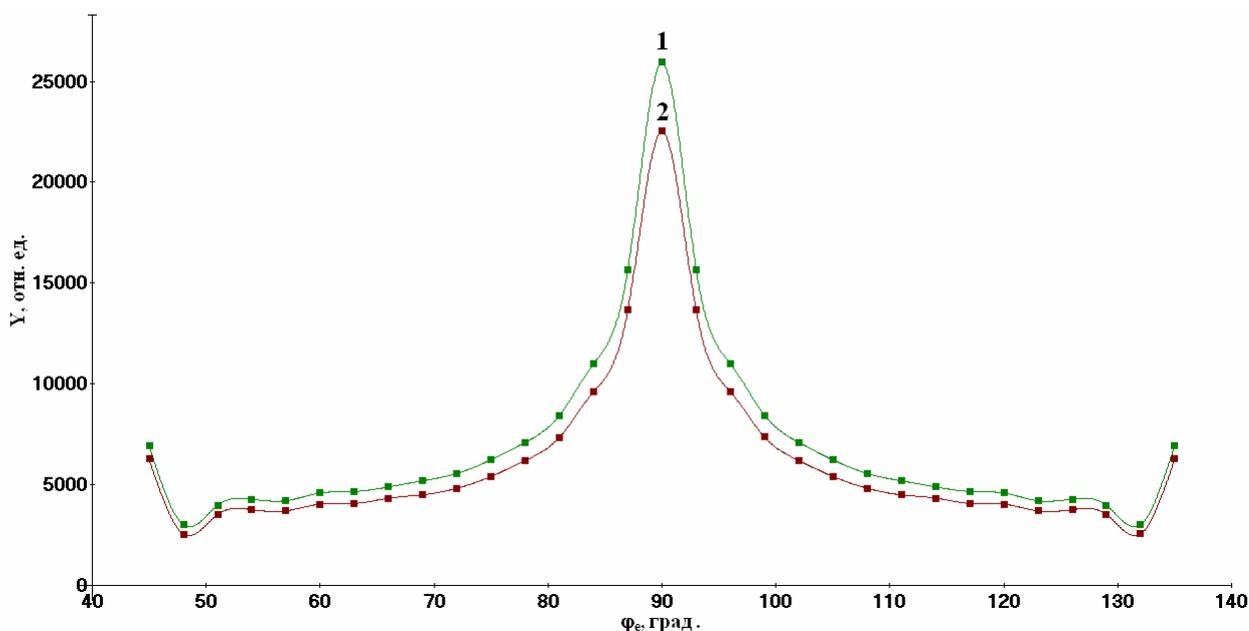


Рис. 24. Интегральные распределения по азимутальному углу φ_e всех эмитированных атомов (1) и только сильно блокированных эмитированных атомов (2) для всех энергий E_e и полярных углов вылета ϑ_e . Расчет для эмиссии атомов с поверхности грани (001) Au. Начальная функция распределения $\cos\vartheta_e/E_0^2$.

наблюдения φ_e , интегральные по всем энергиям E_e и полярным углам ϑ_e , для эмиссии атомов с грани (001) Au с начальной функцией распределения $\cos\vartheta_e/E_0^2$.

На рис. 25 представлено соответствующее распределение вклада сильно блокированных атомов по углу φ_e . Видно, что при всех азимутальных углах φ_e число сильно блокированных атомов практически равно полному числу эмитированных атомов. Таким образом, оказалось, что за формирование максимума на рис. 24, как и всего распределения, ответственны сильно блокированные атомы. Для эмиссии атомов с грани (001) Au максимальный вклад сильно блокированных атомов составляет 90,6% в азимутальном направлении на атом, однако вклад сильно блокированных атомов в других азимутальных направлениях не сильно отличается от этого максимума (86,9% в азимутальном направлении на центр линзы). Такой высокий процент сильно блокированных атомов связан с более жестким потенциалом взаимодействия двух атомов Au.

Результаты, представленные выше, еще раз показывают отличие рассеяния эмитированных атомов “проховой” линзой, состоящей из двух атомов Ni, и жесткой линзы, состоящей из двух атомов Au, а также различие результатов в зависи-

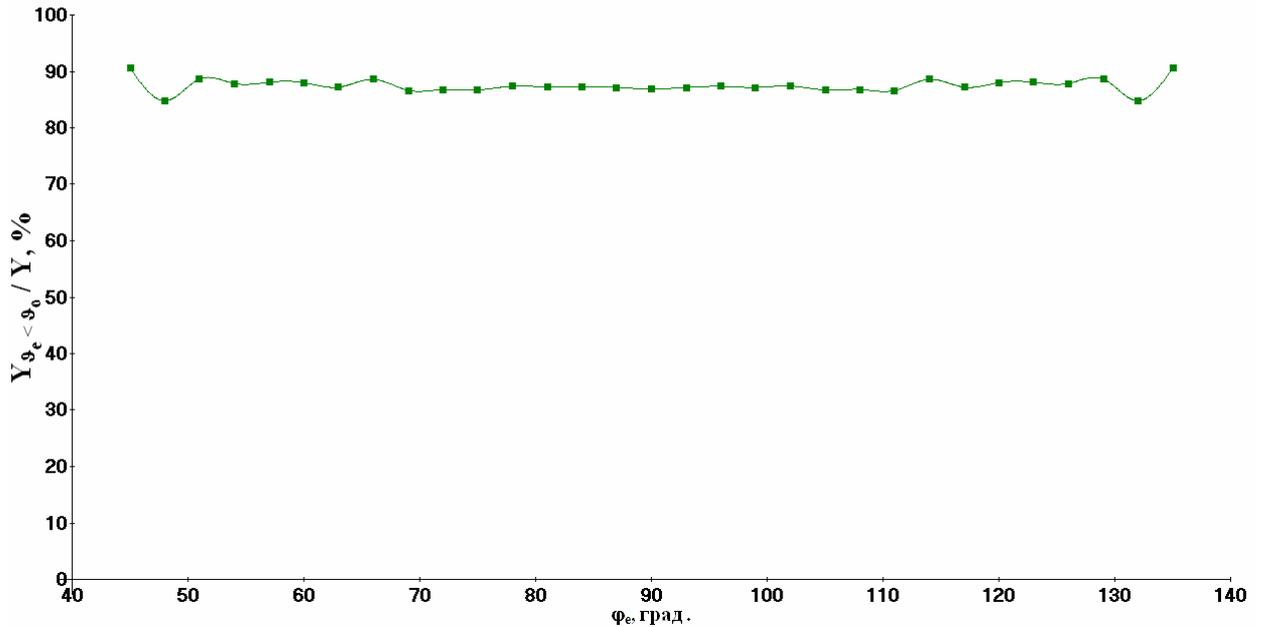


Рис. 25. Распределение вклада сильно заблокированных эмитированных атомов по азимутальному углу наблюдения φ_e для результатов, представленных на рис. 24.

мости от начальной функции распределения, которая, по сути, является лишь весом, на который умножается сигнал [29, 30].

Интересный эффект наблюдается также, если зафиксировать интервал азимутальных углов φ_e . На рис. 26 представлены распределения атомов, эмитированных с грани (001) Ni, наблюдаемых в интервалах углов φ_e [88,5°, 91,5°], [82,5°, 85,5°], [76,5°, 79,5°], по начальному углу вылета φ_0 . Из рисунка видно, какое число “собственных” и “несобственных” по азимутальному углу атомов попало в эти интервалы. Число “собственных” атомов в интервале углов φ_e [82,5°, 85,5°], составляет 3123. Все остальные атомы, попавшие в этот интервал углов φ_e , были эмитированы под другими азимутальными углами φ_0 . Эти “несобственные” по азимутальному углу атомы как раз и сфокусировались (по азимутальному углу) в этот интервал углов наблюдения φ_e . Наблюдается качественное согласие этих результатов с результатами, полученными в работе [12]. Фокусировка “несобственных” атомов в этот интервал наблюдения φ_e происходит с двух сторон. Атомы, эмитированные в этот интервал наблюдения φ_e , рассеянные на ближайшем атоме поверхности, составляют группу сфокусированных атомов, а рассеянные на дальнем атоме линзы – составля-

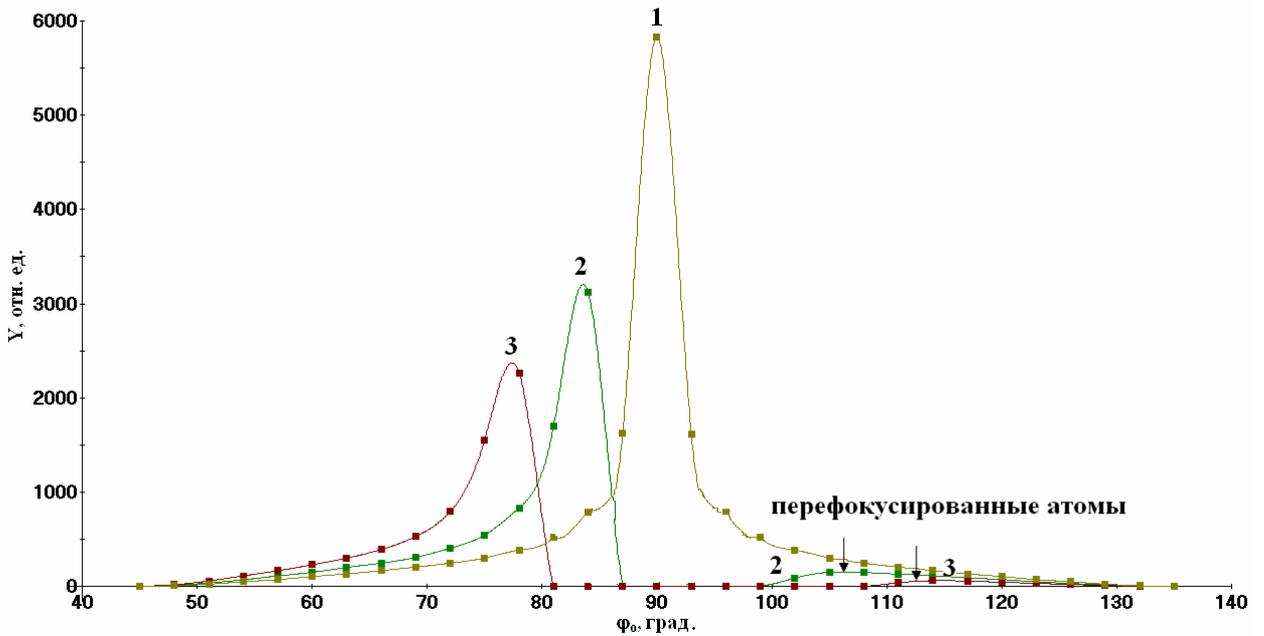


Рис. 26. Распределения атомов, эмитированных с грани (001) Ni, по азимутальному углу φ_0 для всех энергий E_e и полярных углов вылета ϑ_e , наблюдаемых в интервалах углов φ_e $[88,5^\circ, 91,5^\circ]$ (1), $[82,5^\circ, 85,5^\circ]$ (2), $[76,5^\circ, 79,5^\circ]$ (3). Начальная функция распределения $\cos\vartheta_e/E_e^2$. Отчетливо наблюдается перефокусировка атомов через центр линзы.

ют группу перефокусированных атомов. Для азимутального направления на центр линзы, которое соответствует интервалу углов φ_e $[88,5^\circ, 91,5^\circ]$, наблюдается симметричное распределение по начальному углу вылета φ_0 (кривая 1 на рис. 26).

Для сравнения на рис. 27 представлены распределения атомов, эмитированных с грани (001) Au, по азимутальному углу φ_0 для всех энергий E_e и полярных углов вылета ϑ_e , наблюдаемых в интервалах углов φ_e $[88,5^\circ, 91,5^\circ]$ (1), $[82,5^\circ, 85,5^\circ]$ (2), $[76,5^\circ, 79,5^\circ]$ (3), рассчитанные для начальной функции распределения $\cos\vartheta_e/E_e^2$. Отчетливо наблюдается перефокусировка атомов через центр линзы. Видно, что в центральном интервале углов φ_e $[88,5^\circ, 91,5^\circ]$ число атомов, эмитированных под углом $\varphi_0 = 90^\circ$, в распределении атомов, эмитированных с грани (001) Au, значительно выше, чем для эмиссии с грани (001) Ni, т.е. выше число “собственных” по азимутальному углу эмитированных атомов. Это связано с сильной блокировкой атомов, вылетающих под углом $\varphi_0 = 90^\circ$, жесткой линзой, состоящей из двух атомов Au. Однако в интервалах $[82,5^\circ, 85,5^\circ]$ и $[76,5^\circ, 79,5^\circ]$ число “собственных” по азимутальному углу эмитированных атомов меньше, при этом число

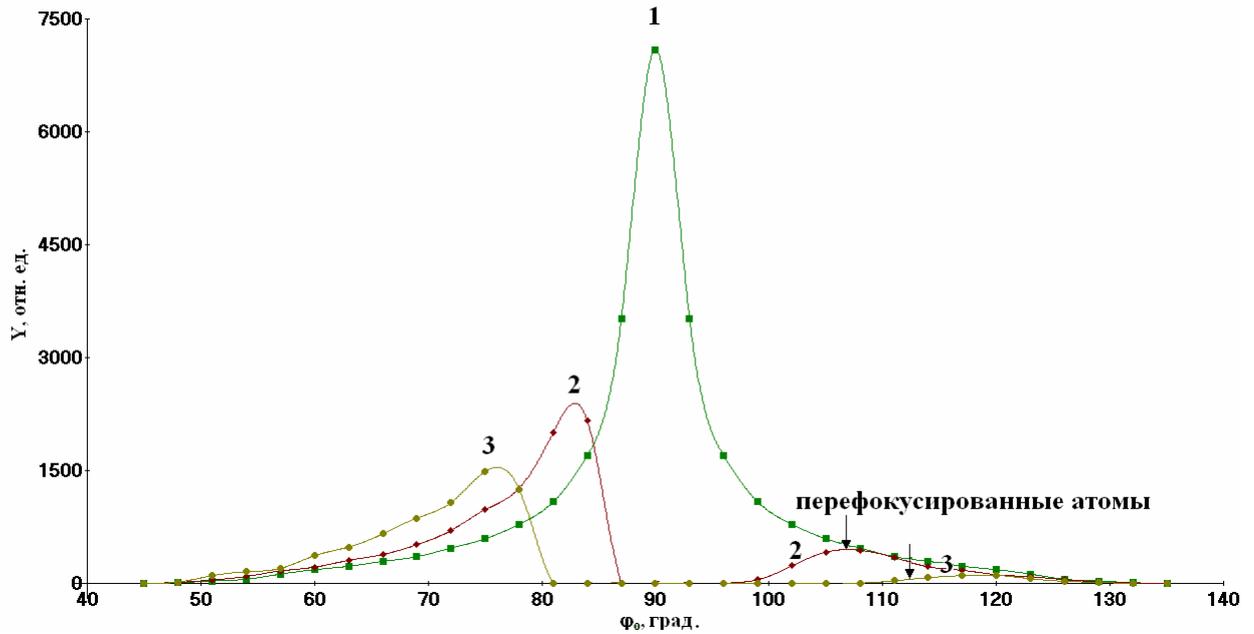


Рис. 27. Распределения атомов, эмитированных с грани (001) Au, по азимутальному углу ϕ_0 для всех энергий E_e и полярных углов вылета ϑ_e , наблюдаемых в интервалах углов φ_e $[88,5^\circ, 91,5^\circ]$ (1), $[82,5^\circ, 85,5^\circ]$ (2), $[76,5^\circ, 79,5^\circ]$ (3). Начальная функция распределения $\cos\vartheta_e/E_e^2$. Отчетливо наблюдается перефокусировка атомов через центр линзы.

перефокусированных атомов Au значительно больше, чем перефокусированных атомов Ni. Это объясняется более жестким потенциалом взаимодействия двух атомов при эмиссии атомов с грани (001) Au. При смещении интервала углов наблюдения φ_e в сторону от центра линзы интервал азимутальных углов ϕ_0 , при которых происходил вылет эмитированных атомов, “перефокусированных” через центр линзы, сдвигается также от центра линзы в азимутальном направлении к дальнему атому линзы, на котором и происходит их рассеяние при вылете атомом линзы.

На рис. 26 и 27 отчетливо наблюдается перефокусировка атомов через центр линзы, обнаруженная в работе [12]. Приведенные на рис. 26 распределения находятся в качественном согласии с распределениями, полученным в работе [12] и представленными на рис. 3 (см. главу 2 настоящей дипломной работы).

Был также рассчитан вклад в эти распределения сильно блокированных атомов. Он оказался весьма значительным. На рис. 28 представлены распределения по начальному азимутальному углу вылета ϕ_0 вклада сильно блокированных атомов Ni для интервалов наблюдения φ_0 $[88,5^\circ, 91,5^\circ]$, $[82,5^\circ, 85,5^\circ]$ и $[76,5^\circ, 79,5^\circ]$. Видно, что вклад сильно блокированных атомов, эмитированных под начальными азиमु-

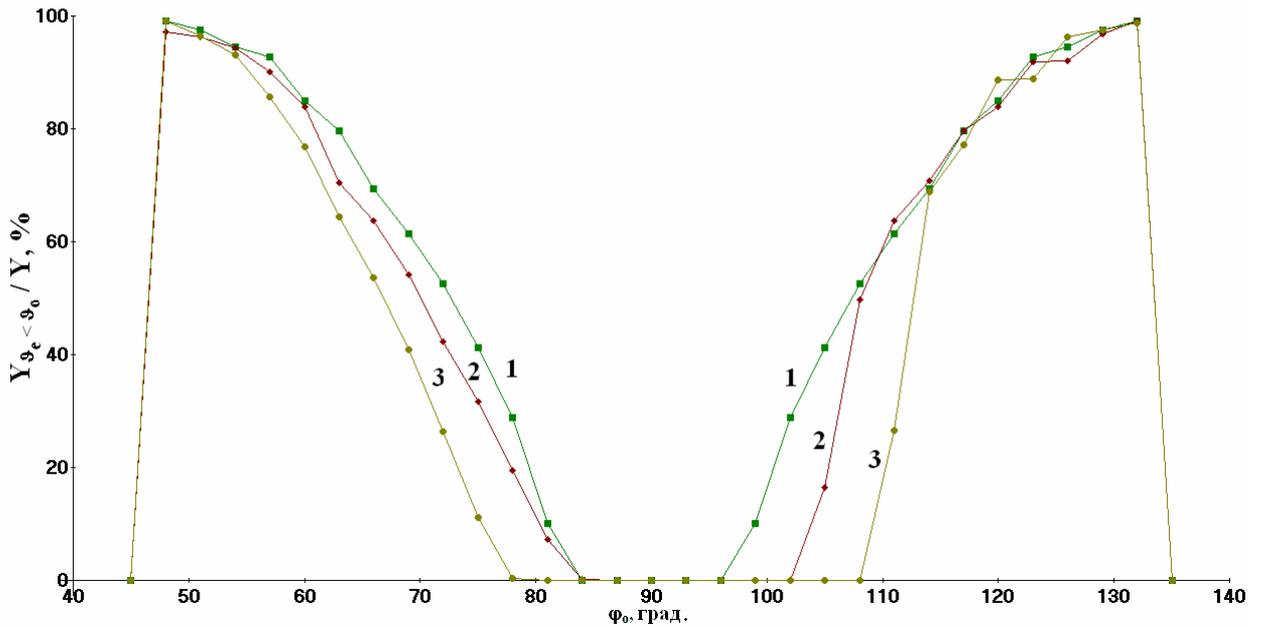


Рис. 28. Распределения вклада сильно заблокированных атомов по начальному азимутальному углу φ_0 для атомов, эмитированных с грани (001) Ni в интервалы азимутального угла вылета φ_e $[88,5^\circ, 91,5^\circ]$ (1), $[82,5^\circ, 85,5^\circ]$ (2) и $[76,5^\circ, 79,5^\circ]$ (3). Начальная функция распределения $\cos\vartheta_0/E_0^2$.

тальными углами φ_0 , близкими к направлению на атом достигает 90-99%. При этом для эмиссии под начальными азимутальными углами φ_0 , близкими к азимутальному направлению на центр линзы, вклад сильно заблокированных атомов равен 0. Слева и справа от азимутального направления на центр линзы наблюдается монотонный рост вклада сильно заблокированных атомов. Заметим, что в интегральном распределении атомов, эмитированных с грани (001) Ni, по азимутальному углу φ_e для всех энергий E_e и полярных углов ϑ_e вклад сильно заблокированных атомов составляет в интервалах φ_e $[76,5^\circ, 80,5^\circ]$ 25,4%, $[82,5^\circ, 86,5^\circ]$ – 22,1% и $[88,5^\circ, 91,5^\circ]$ – 13,2%.

Для эмиссии атомов с грани (001) Au в распределении по начальному азимутальному углу φ_0 вклад сильно заблокированных атомов гораздо выше. Вклад сильно заблокированных атомов, эмитированных под начальными азимутальными углами φ_0 , для эмиссии под начальными азимутальными углами φ_0 , близкими к направлению на атом, достигает 95-100%. В интегральном распределении атомов, эмитированных с грани (001) Ni, по азимутальному углу φ_e для всех энергий E_e и полярных углов ϑ_e вклад сильно заблокированных атомов составляет в интервалах φ_e $[76,5^\circ,$

$80,5^\circ]$ 87,4%, $[82,5^\circ, 86,5^\circ]$ – 87,3% и $[88,5^\circ, 91,5^\circ]$ – 86,9%. Такой высокий вклад сильно блокированных атомов для эмиссии атомов с грани (001) Au обусловлен более жестким потенциалом взаимодействия двух атомов Au.

3.2. Формирование азимутальных распределений эмитированных атомов с разрешением по $\cos\vartheta_e$

Нами также были рассчитаны распределения эмитированных атомов по азимутальному углу φ_e с разрешением по $\cos\vartheta_e$. На рис. 29 представлены распределения эмитированных атомов по углу φ_e для всех энергий E_e и интервалов полярных углов ϑ_e $[59,3^\circ, 60,7^\circ]$, $[56,3^\circ, 57,7^\circ]$, $[53,1^\circ, 54,7^\circ]$, $[49,9^\circ, 51,5^\circ]$, рассчитанные для начальной функции распределения $\cos\vartheta_e/E_e^2$. Обнаружено, что при изменении полярного угла наблюдения ϑ_e , распределение по азимутальному углу φ_e изменяется. Максимум распределения эмитированных атомов Ni в азимутальном направлении на центр линзы, которое соответствует углу $\varphi_e = 90^\circ$, наблюдается при полярных углах наблюдения $\vartheta_e > 56,3^\circ$. При уменьшении полярного угла наблюдения в этом азимутальном направлении появляется минимум, при этом наблюдается два максимума: справа и слева от центра линзы, которые сдвигаются в направлениях от центра линзы (при уменьшении угла наблюдения ϑ_e).

Этот эффект имеет простое объяснение. На рис. 30 схематически представлено распределение эмитированных атомов по φ_e и $\cos\vartheta_e$. Пересекающиеся линии обозначают максимумы дважды дифференциального распределения распыленных атомов. Они формируются в азимутальных направлениях на линзу из двух атомов поверхности вследствие действия эффекта блокировки (рассеяния эмитируемых атомов атомами линзы в направлении нормали к поверхности) и радужного эффекта (т.е. возникновения максимумов функции распределения вследствие многозначности сигнала по начальным энергиям и углам вылета). Из рис. 30 становится понятной причина разделения одного максимума распределения на два при уменьшении полярного угла наблюдения ϑ_e . Видно, что при углах $\vartheta_e = [59,3^\circ, 60,7^\circ]$ и $[56,3^\circ, 57,7^\circ]$ (обозначены номерами 23 и 25) происходит одно пересечение области наблюдения (23 или 25) с максимумом распределения. Для углов $\vartheta_e = [53,1^\circ, 54,7^\circ]$ и $[49,9^\circ, 51,5^\circ]$ (обозначены номерами 27 и 29) пересечение происходит дважды, что

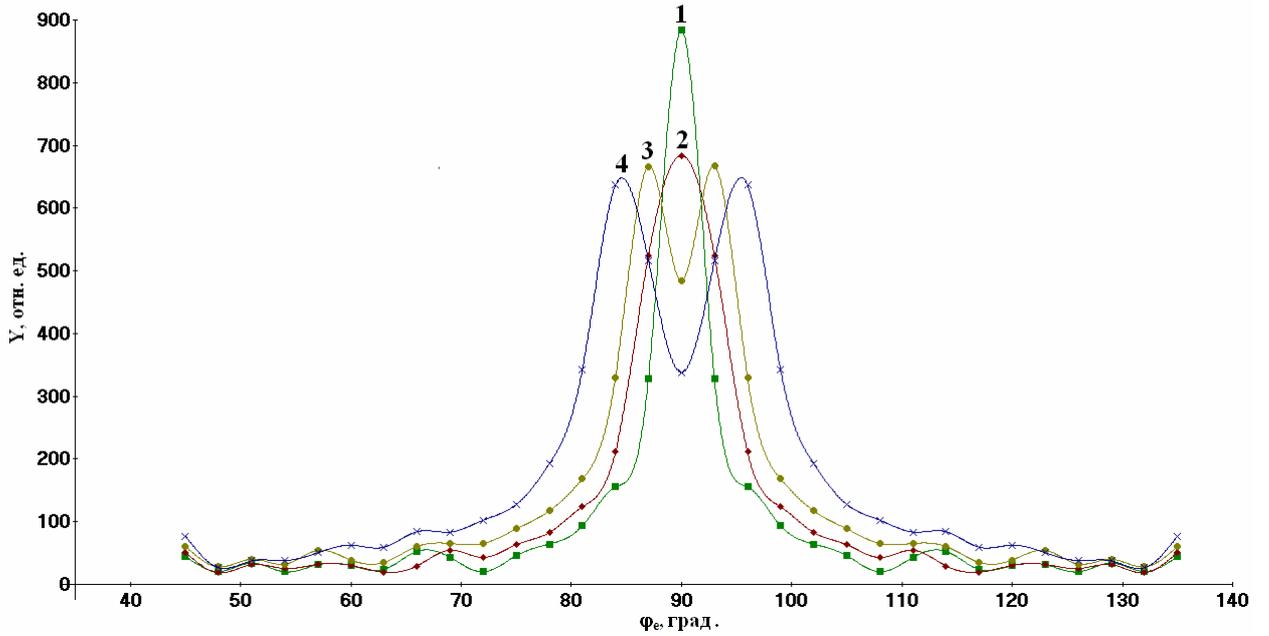


Рис. 29. Распределения эмитированных атомов Ni по азимутальному углу φ_e для всех энергий E_e с разрешением по полярному углу вылета ϑ_e . Полярные углы вылета ϑ_e $[59,3^\circ, 60,7^\circ]$ (1), $[56,3^\circ, 57,8^\circ]$ (2), $[53,1^\circ, 54,7^\circ]$ (3), $[49,9^\circ, 51,5^\circ]$ (4). Начальная функция распределения $\cos\vartheta_e/E_e^2$.

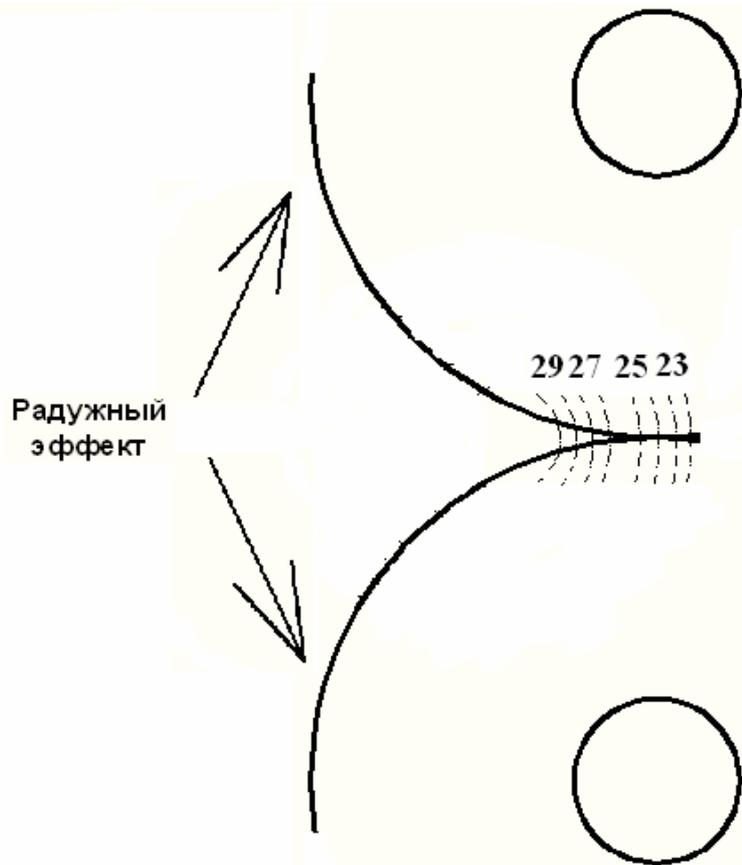


Рис. 30. Схематическое представление максимумов распределения эмитированных атомов по φ_e и $\cos\vartheta_e$. Указаны номера интервалов полярных углов наблюдения ϑ_e .

соответствует формированию двух максимумов в распределениях 3 и 4, представленных на рис. 29.

На рис. 31 представлены распределения по азимутальному углу наблюдения φ_e для эмиссии атомов с грани (001) Au для всех энергий для полярных углов $\vartheta_e = [38,9^\circ, 40,9^\circ], [34,6^\circ, 36,9^\circ], [29,9^\circ, 32,4^\circ], [24,3^\circ, 27,2^\circ]$, рассчитанные для начальной функции распределения $\cos\vartheta_e/E_0^2$. Видно, что для эмиссии атомов Au разделение максимума на два происходит при углах $\vartheta_e < 32,4^\circ$. Разница в полярных углах, при которых происходит разделение одного максимума на два, обусловлена более сильной блокировкой эмитируемых атомов в случае эмиссии с грани (001) Au и соответствующим сдвигом максимума распределения, представленного на рис. 30, в сторону нормали поверхности.

На рис. 32 представлено распределение по азимутальному углу наблюдения φ_e для всех энергий для полярных углов $\vartheta_e = [65,0^\circ, 66,4^\circ], [62,2^\circ, 63,6^\circ], [59,3^\circ, 60,7^\circ], [56,3^\circ, 57,8^\circ]$, рассчитанные для начальной функции распределения $\cos\vartheta_e/E_0^2$. Данные результаты в отличие от результатов, представленных на рис. 29, рассчитаны по более точной статистике (для намного большего числа атомов, эмитируемых из узла с поверхности). В этой статистике шаг по $1-\cos\vartheta_e$ меньше в 10 раз и составляет $1/450$, шаг по углу φ_e уменьшается с 3° до $0,2^\circ$. Интервалы наблюдения по $\cos\vartheta_e$ составляли $1/45$, а по $\varphi_e - 0,6^\circ$. Таким образом, с помощью этой статистики можно более точно определить реальное дважды дифференциальное распределение эмитированных атомов (по φ_e и $1-\cos\vartheta_e$). Максимум распределения эмитированных атомов Ni в азимутальном направлении на центр линзы, которое соответствует углу $\varphi_e = 90^\circ$, наблюдается при полярных углах наблюдения $\vartheta_e > 60,7^\circ$. При уменьшении полярного угла наблюдения в этом азимутальном направлении появляется минимум, при этом наблюдается два максимума: справа и слева от центра линзы, которые сдвигаются в направлениях от центра линзы (при уменьшении угла наблюдения ϑ_e). При дальнейшем уменьшении полярного угла наблюдения минимум в центре становится более выраженным.

Сравнение результатов, представленных на рис. 29 и 32, показывает, что реальные азимутальные распределения распыленных атомов очень узкие (реальные азимутальные распределения ближе к результатам, представленным на рис. 32).

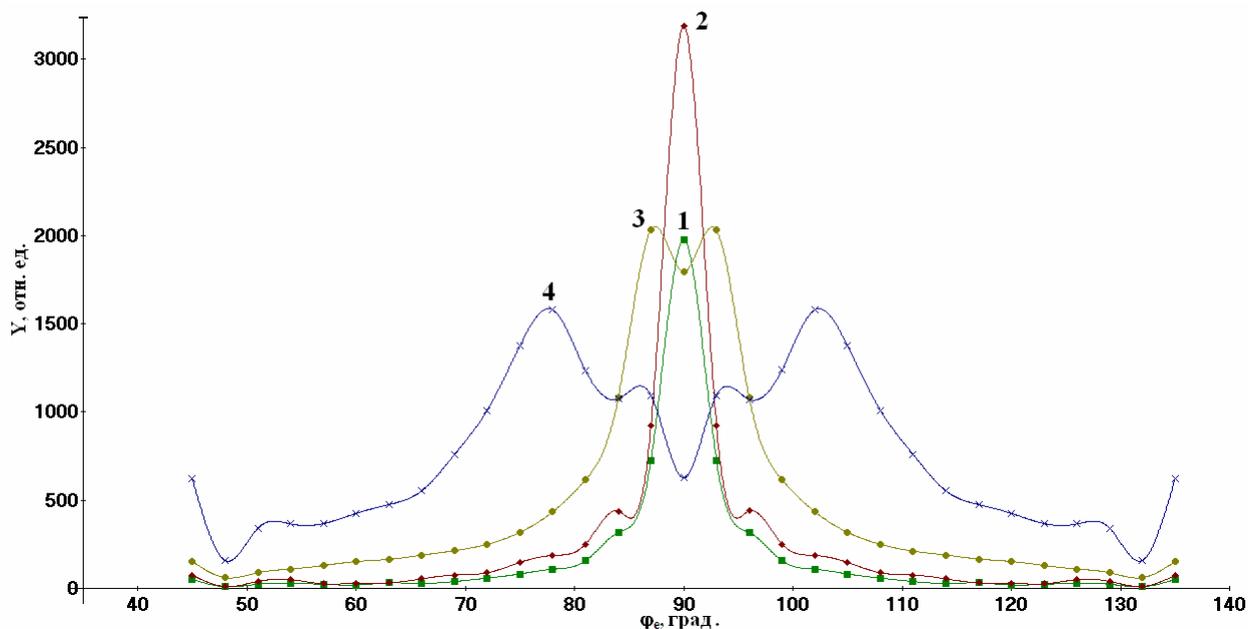


Рис. 31. Распределение эмитированных атомов Au по азимутальному углу ϕ_e для всех энергий E_e . Полярные углы вылета θ_e [38,9°, 40,9°] (1), [34,6°, 36,9°] (2), [29,9°, 32,4°] (3), [24,3°, 27,2°] (4). Начальная функция распределения $\cos\theta_e/E_0^2$.

Аналогичный вывод можно сделать и из анализа азимутальных распределений эмитированных атомов, полученных в работе [15]. Поэтому существенным является сужение угловой апертуры детектора вторичных атомных частиц для наблюдения реальных распределений распыленных атомов по азимутальному углу. Применение детектора с широкой апертурой приводит к тому, что наблюдаемый сигнал является сверткой реального азимутального распределения (со стремящейся к 0 апертурой детектора по азимутальному углу) и аппаратной функции детектора (прямоугольного распределение по ширине детектора $\Delta\phi$) и наблюдаемое распределение оказывается существенно шире реального. При этом применение детектора с широкой апертурой может не передавать особенности реального азимутального распределения, например, возникновение узкого минимума в азимутальном направлении на центр линзы. Последние два фактора обуславливают разницу распределений, представленных на рис. 29 и 32, в частности, наблюдаемых при полярных углах вылета θ_e [59,3°, 60,7°] и [56,3°, 57,8°]. В экспериментах также оказывается необходимо сужать угловую апертуру детектора вторичных атомных частиц, иначе искажения (отличие наблюдаемых распределений от узких реальных распределений) будут значительны.

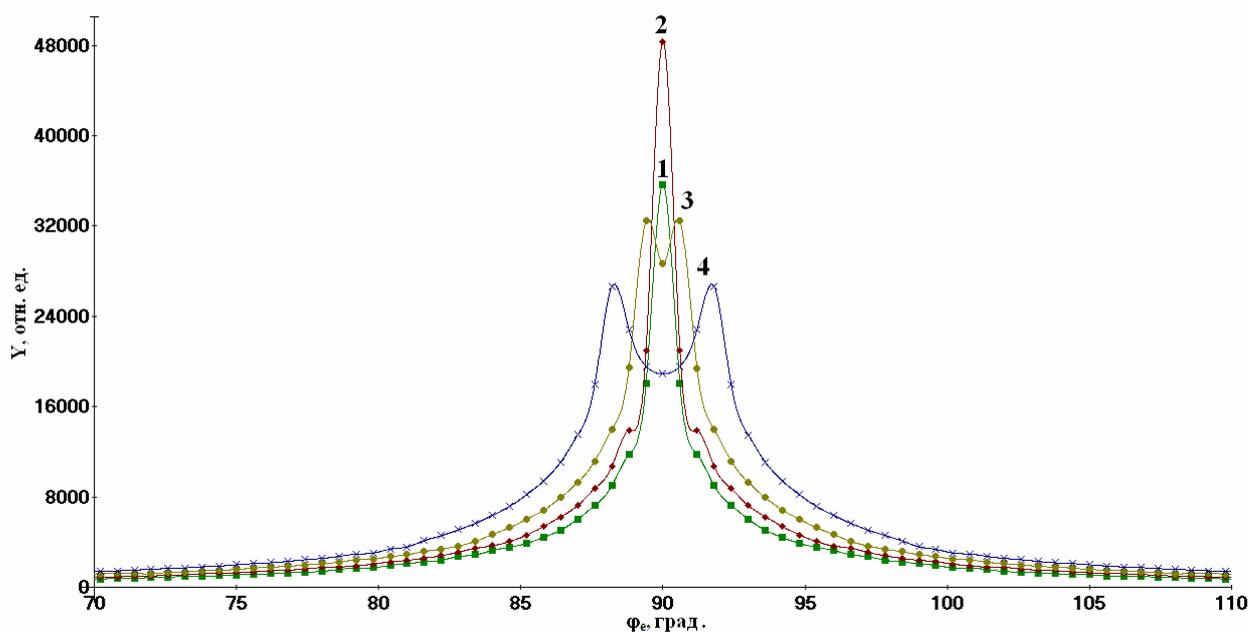


Рис. 32. Распределение эмитированных атомов Ni по азимутальному углу φ_e для всех энергий E_e . Полярные углы вылета ϑ_e $[65,0^\circ, 66,4^\circ]$ (1), $[62,2^\circ, 63,6^\circ]$ (2), $[59,3^\circ, 60,7^\circ]$ (3), $[56,3^\circ, 57,8^\circ]$ (4). Начальная функция распределения $\cos\vartheta_0/E_0^2$. Расчеты с большой статистикой вылета.

3.3. Формирование азимутальных распределений эмитированных атомов с разрешением по энергии E_e

Обнаружено, что наблюдается качественное различие распределений эмитированных атомов по углу вылета φ_0 для эмиссии атомов с граней (001) Ni и (001) Au с разрешением по энергии E_e . На рис. 33 представлены интегральные распределения по азимутальному углу φ_0 атомов, эмитированных с граней (001) Ni и (001) Au, для всех полярных и азимутальных углов вылета для интервала энергий $E_e = 2,0 \pm 0,4$ эВ, рассчитанные для начальной функции распределения $\cos\vartheta_0/E_0^2$. Для низких энергий, в частности, для энергий $E_e = 2,0 \pm 0,4$ эВ при эмиссии атомов с грани (001) Ni в азимутальном направлении на центр линзы наблюдается минимум из-за менее выраженной блокировки атомов, эмитируемых в направлении на центр линзы, в направлении нормали к поверхности по сравнению с вылетом в азимутальном направлении на атом. Однако для той же энергии E_e при эмиссии с грани (001) Au можно видеть, что распределение не имеет минимума в азимутальном на-

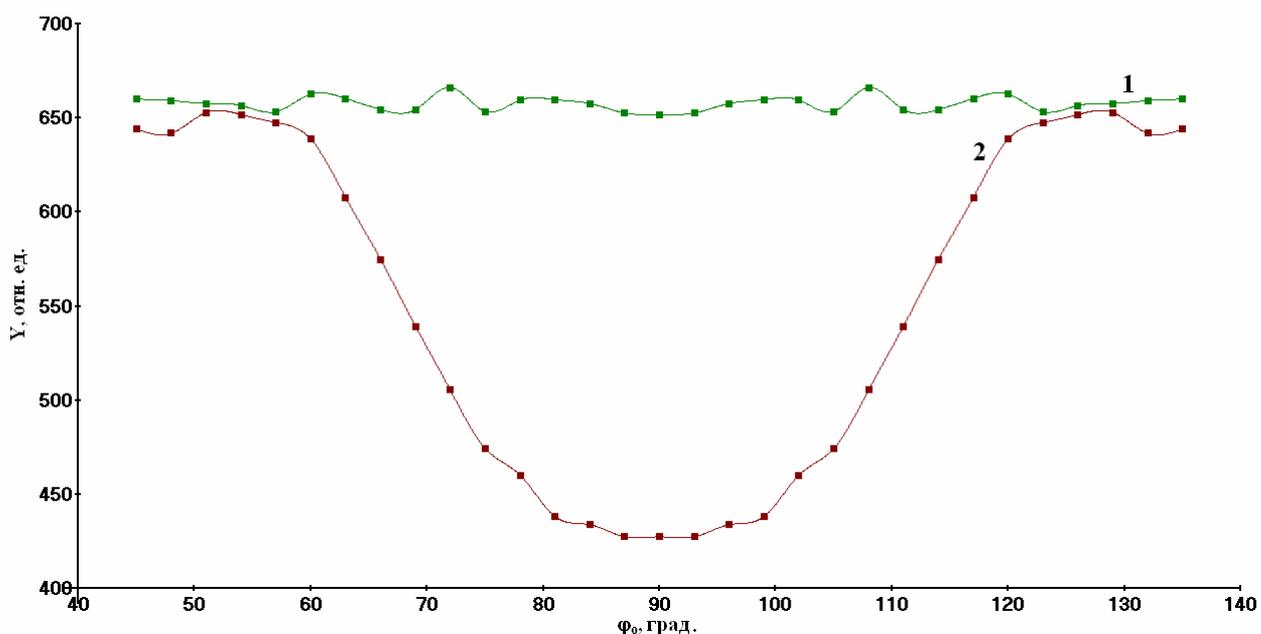


Рис. 33. Интегральные распределения по азимутальному углу ϕ_0 атомов, эмитированных для всех полярных и азимутальных углов вылета, для эмиссии с граней (001) Ni (1) и (001) Au (2) при энергии $E_e = 2,0 \pm 0,4$ эВ. Начальная функция распределения $\cos\vartheta_0/E_0^2$.

правлении на центр линзы в связи с более жестким потенциалом взаимодействия двух атомов Au.

На рис. 34 представлены интегральные распределения по азимутальному углу ϕ_0 атомов, эмитированных с граней (001) Ni и (001) Au, для всех полярных и азимутальных углов вылета для интервала энергий $E_e = 10,0 \pm 0,4$ эВ, рассчитанные для начальной функции распределения $\cos\vartheta_0/E_0^2$. Получено, что как для атомов Ni, так и для атомов Au наблюдается практически ровная зависимость.

При высоких энергиях $E_e = 55,0 \pm 0,4$ эВ для эмиссии атомов с граней (001) Ni и (001) Au наблюдаются примерно одинаковые распределения по начальному азимутальному углу ϕ_0 (рис. 35): есть максимум в азимутальном направлении на линзу из двух атомов поверхности, однако он не выраженный, небольшое отличие наблюдается лишь в числе эмитированных атомов.

Отметим, что в распределении по ϕ_0 , интегральном по энергии вылета E_e для атомов, эмитированных с грани (001) Au, наблюдается максимум в направлении на центр линзы, а для атомов, эмитированных с грани (001) Ni, наблюдается минимум (см. рис. 19).

Для эмиссии атомов с грани (001) Au направление вылета по углу ϕ_0 на

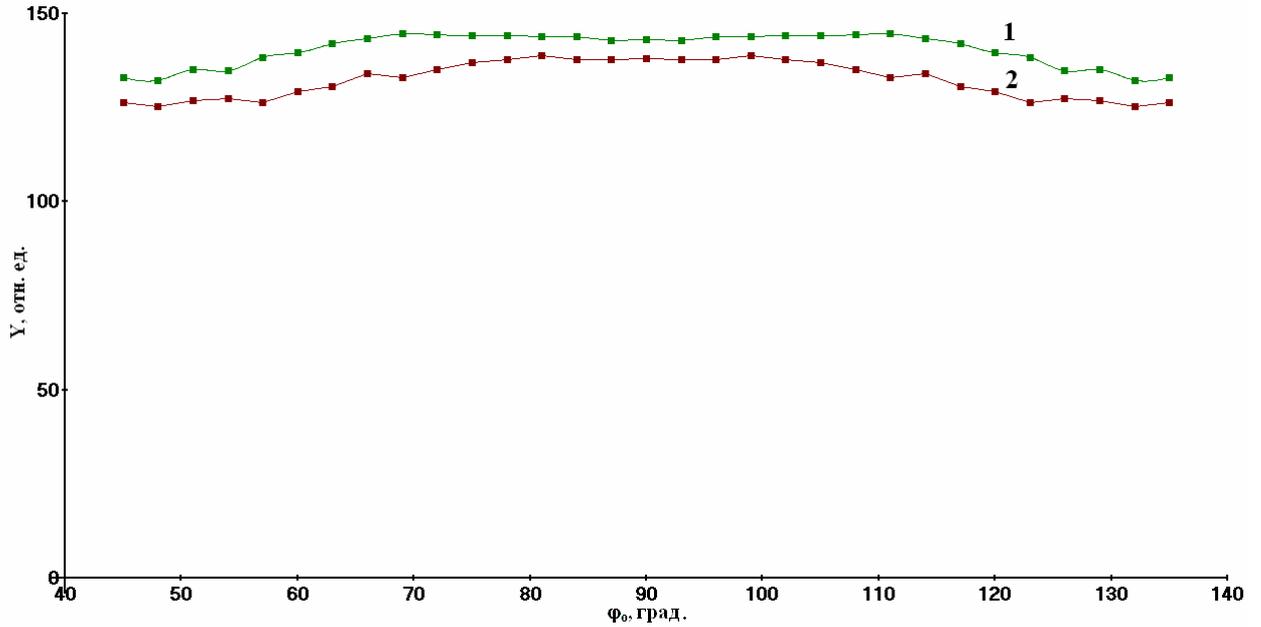


Рис. 34. Интегральные распределения по азимутальному углу ϕ_0 атомов, эмитированных для всех полярных и азимутальных углов вылета, для эмиссии с граней (001) Ni (1) и (001) Au (2) при энергии $E_e = 10,0 \pm 0,4$ эВ. Начальная функция распределения $\cos\vartheta_0/E_0^2$.

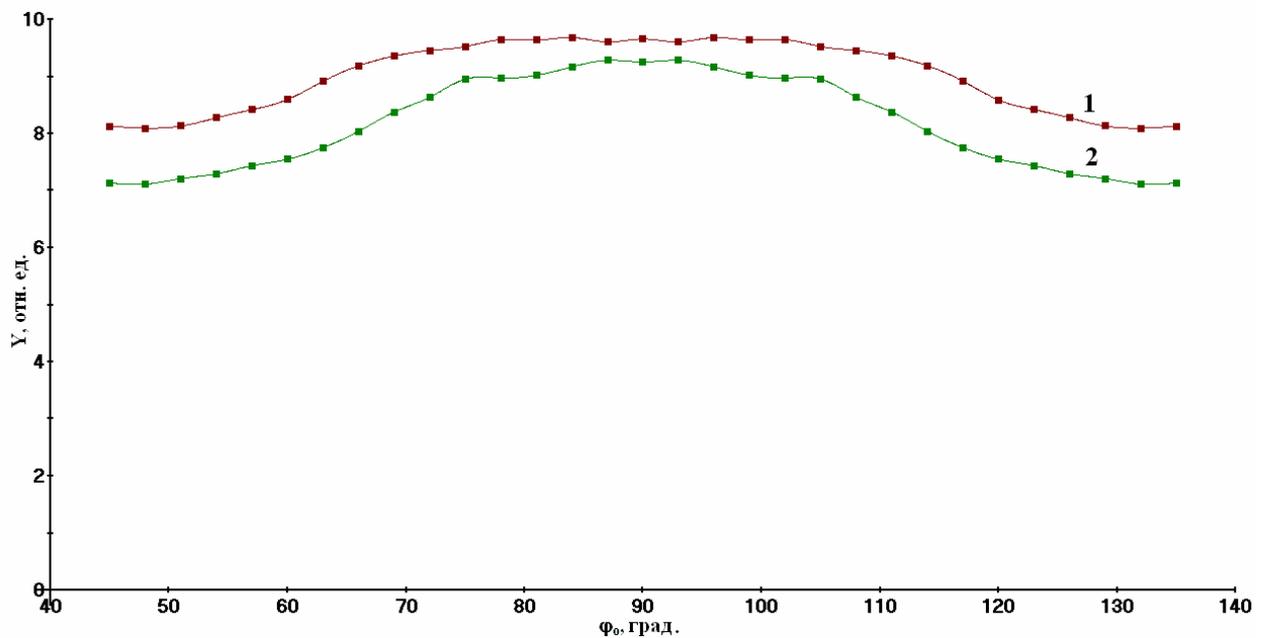


Рис. 35. Интегральные распределения по азимутальному углу ϕ_0 атомов, эмитированных для всех полярных и азимутальных углов вылета, для эмиссии с граней (001) Ni (1) и (001) Au (2) при энергии $E_e = 55,0 \pm 0,4$ эВ. Начальная функция распределения $\cos\vartheta_0/E_0^2$.

линзу ($\varphi_0 = 90^\circ$) аналогично по жесткости блокировки азимутальному направлению вылета на атом. При эмиссии с грани (001) Ni вследствие более мягкого потенциала взаимодействия атом–атом атомы, эмитируемые в азимутальном направлении на центр линзы, отклоняются на меньший угол в направлении нормали к поверхности и для малых энергий E_0 (и, соответственно, малых энергий E_e) у них не хватает энергии, чтобы преодолеть плоский потенциальный барьер (см. рис. 33). При больших энергиях E_e эмиссия атомов с грани (001) Ni в азимутальном направлении на центр линзы оказывается более похожей на эмиссию атомов с грани (001) Au (см. рис. 34 и 35).

Для сравнения на рис. 36–38 приведены интегральные распределения эмитированных атомов по азимутальному углу вылета φ_0 (1) и углу наблюдения φ_e (2) для всех полярных углов вылета для эмиссии атомов с грани (001) Ni при энергиях $E_e = 2,0 \pm 0,4$ эВ, $10,0 \pm 0,4$ эВ и $55,0 \pm 0,4$ эВ соответственно.

Были проведены более детальные исследования для низких энергий. На рис. 39 представлены интегральные по полярному углу ϑ_e распределения эмитированных атомов по азимутальному углу вылета φ_e для эмиссии атомов с грани (001) Ni для энергий $E_e = 0,4 \pm 0,4$ эВ, $0,6 \pm 0,4$ эВ, $0,8 \pm 0,4$ эВ и $1,0 \pm 0,4$ эВ. На рис. 40 представлены интегральные по полярному углу ϑ_e распределения эмитированных атомов по азимутальному углу вылета φ_e эмиссии атомов с грани (001) Ni для энергий $E_e = 2,0 \pm 0,4$ эВ, $3,0 \pm 0,4$ эВ, $4,0 \pm 0,4$ эВ и $5,0 \pm 0,4$ эВ. Видна эволюция распределений при изменении энергии эмитированных атомов. Было обнаружено, что при энергиях $E_e \sim 3\text{--}5$ эВ наблюдается максимум в азимутальном направлении на центр линзы, однако при уменьшении энергии E_e до 1–2 эВ этот максимум разделяется на два максимума, которые при уменьшении энергии сдвигаются в направлениях от центра линзы. Это, по-видимому, объясняется тем, что атомам не хватает энергии, чтобы после взаимодействия с атомами линзы долететь до центрального интервала углов φ_e .

Для сравнения на рис. 41 и 42 приведены интегральные распределения атомов, эмитированных с грани (001) Ni, по азимутальному углу φ_0 для всех полярных углов вылета ϑ_e для тех же низких энергий E_e , что и на рис. 39 и 40. Видно, что в отличие от распределения по φ_e в азимутальном направлении на центр линзы на-

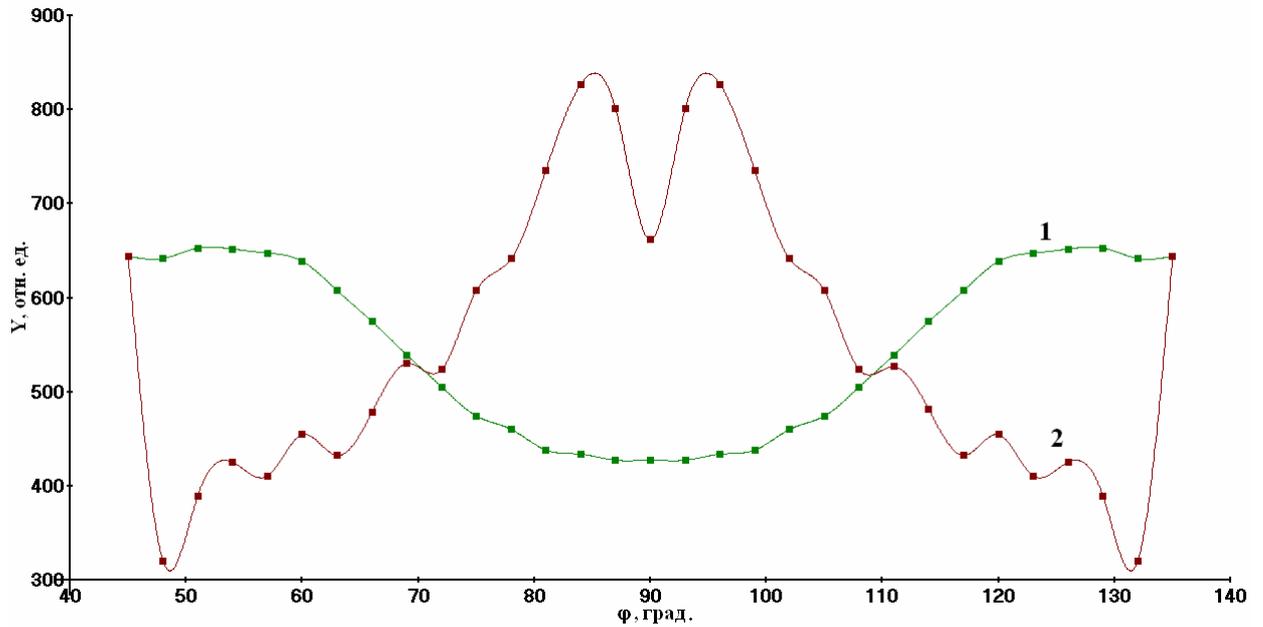


Рис. 36. Интегральные распределения по начальному азимутальному углу вылета ϕ_0 (1) и углу наблюдения ϕ_e (2) эмитированных атомов для всех полярных углов вылета и энергии $E_e = 2,0 \pm 0,4$ эВ для эмиссии атомов с грани (001) Ni. Начальная функция распределения $\cos\vartheta_0/E_0^2$.

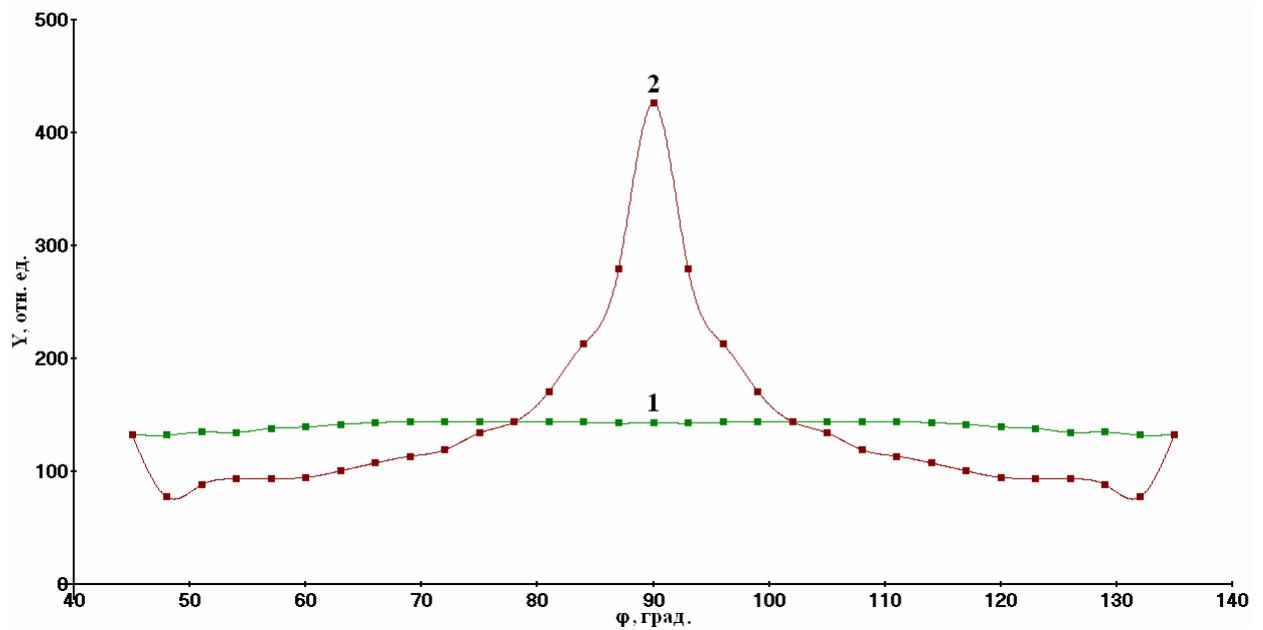


Рис. 37. Интегральные распределения по начальному азимутальному углу вылета ϕ_0 (1) и углу наблюдения ϕ_e (2) эмитированных атомов для всех полярных углов вылета и энергии $E_e = 10,0 \pm 0,4$ эВ для эмиссии атомов с грани (001) Ni. Начальная функция распределения $\cos\vartheta_0/E_0^2$.

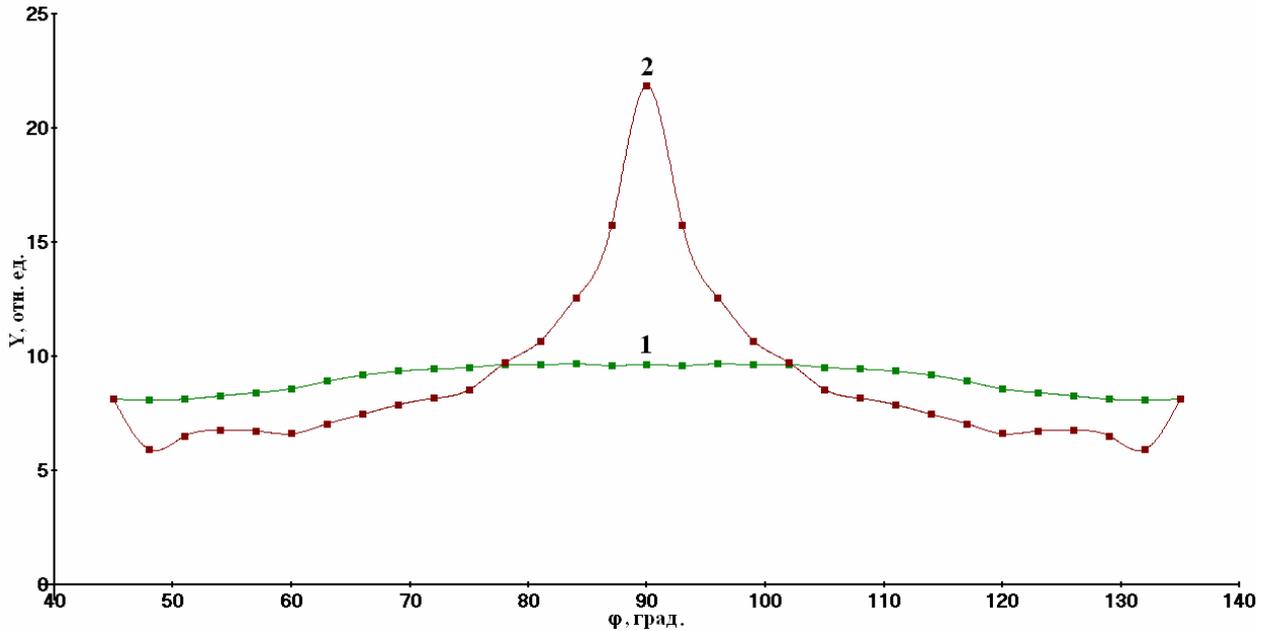


Рис. 38. Интегральные распределения по начальному азимутальному углу вылета ϕ_0 (1) и углу наблюдения ϕ_e (2) эмитированных атомов для всех полярных углов вылета и энергии $E_e = 55,0 \pm 0,4$ эВ для эмиссии атомов с грани (001) Ni. Начальная функция распределения $\cos\vartheta_0/E_0^2$.

блюдается четкий минимум для всех энергий E_e от 0,4 до 5 эВ.

Аналогичные распределения для тех же значений энергии были получены для эмиссии атомов с грани (001) Au. Отметим, что для распределений по азимутальному углу ϕ_e , как и ожидалось, не наблюдается минимума в азимутальном направлении на центр линзы, при всех энергиях от 0,4 до 5 эВ в этом азимутальном направлении наблюдается выраженный максимум. При энергиях от 0,4 до 1 эВ максимум растет, в интервале от 2 до 5 эВ этот максимум уменьшается (см. рис. 43 и 44). Для интегрального распределения по азимутальному углу ϕ_0 также наблюдается отличие от эмиссии атомов с грани (001) Ni: для энергии 0,4 эВ в азимутальном направлении на центр линзы наблюдается ярко выраженный минимум, который при увеличении энергии до 2 эВ выравняется. Далее при увеличении энергии до 5 эВ зависимость становится ровной (см. рис. 45 и 46). (1), $3,0 \pm 0,4$ эВ (2), $4,0 \pm 0,4$ эВ (3) и $5,0 \pm 0,4$ эВ (4). Начальная функция распределения $\cos\vartheta_0/E_0^2$.

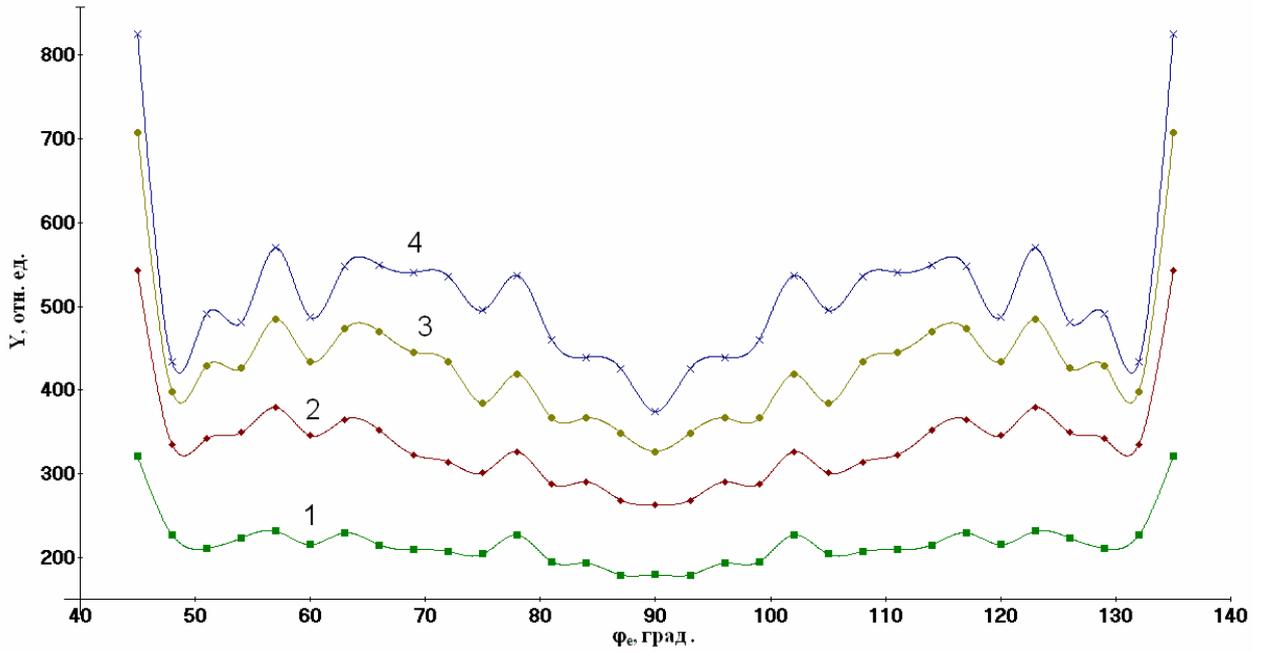


Рис. 39. Интегральные по полярному углу ϑ_e распределения эмитированных атомов по азимутальному углу вылета ϕ_e для эмиссии атомов с грани (001) Ni для энергий $E_e = 0,4 \pm 0,4$ эВ (1), $0,6 \pm 0,4$ эВ (2), $0,8 \pm 0,4$ эВ (3) и $1,0 \pm 0,4$ эВ (4). Начальная функция распределения $\cos\vartheta_0/E_0^2$.

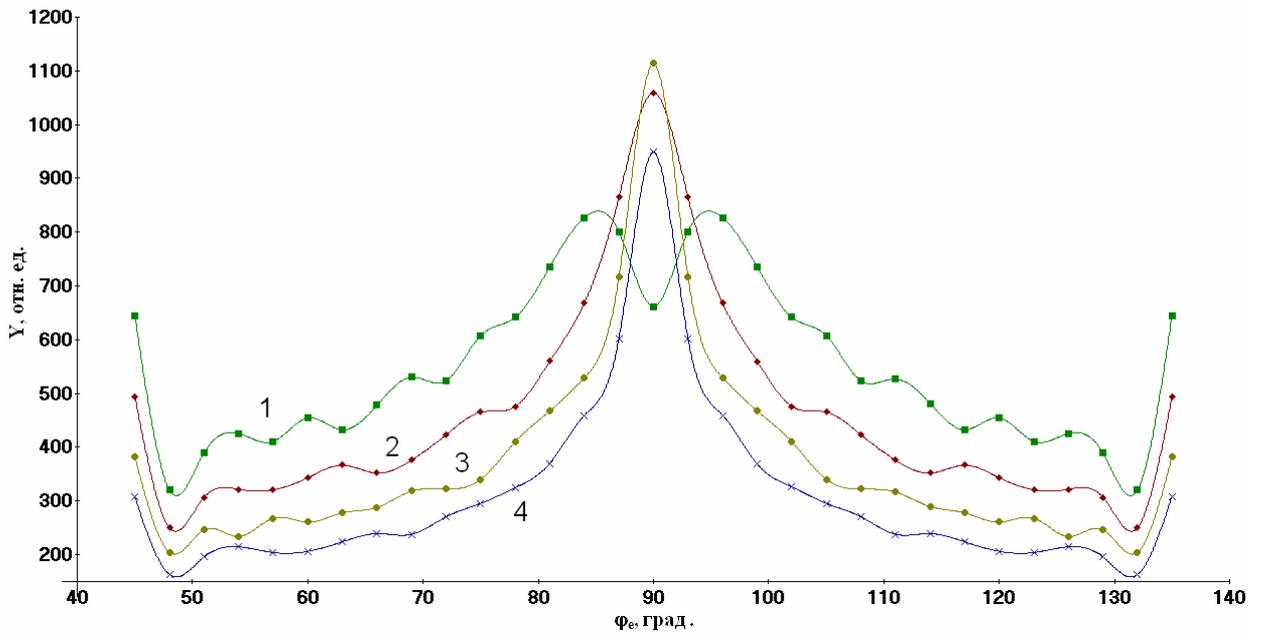


Рис. 40. Интегральные по полярному углу ϑ_e распределения эмитированных атомов по азимутальному углу вылета ϕ_e для эмиссии атомов с грани (001) Ni для энергий $E_e = 2,0 \pm 0,4$ эВ (1), $3,0 \pm 0,4$ эВ (2), $4,0 \pm 0,4$ эВ (3) и $5,0 \pm 0,4$ эВ (4). Начальная функция распределения $\cos\vartheta_0/E_0^2$.

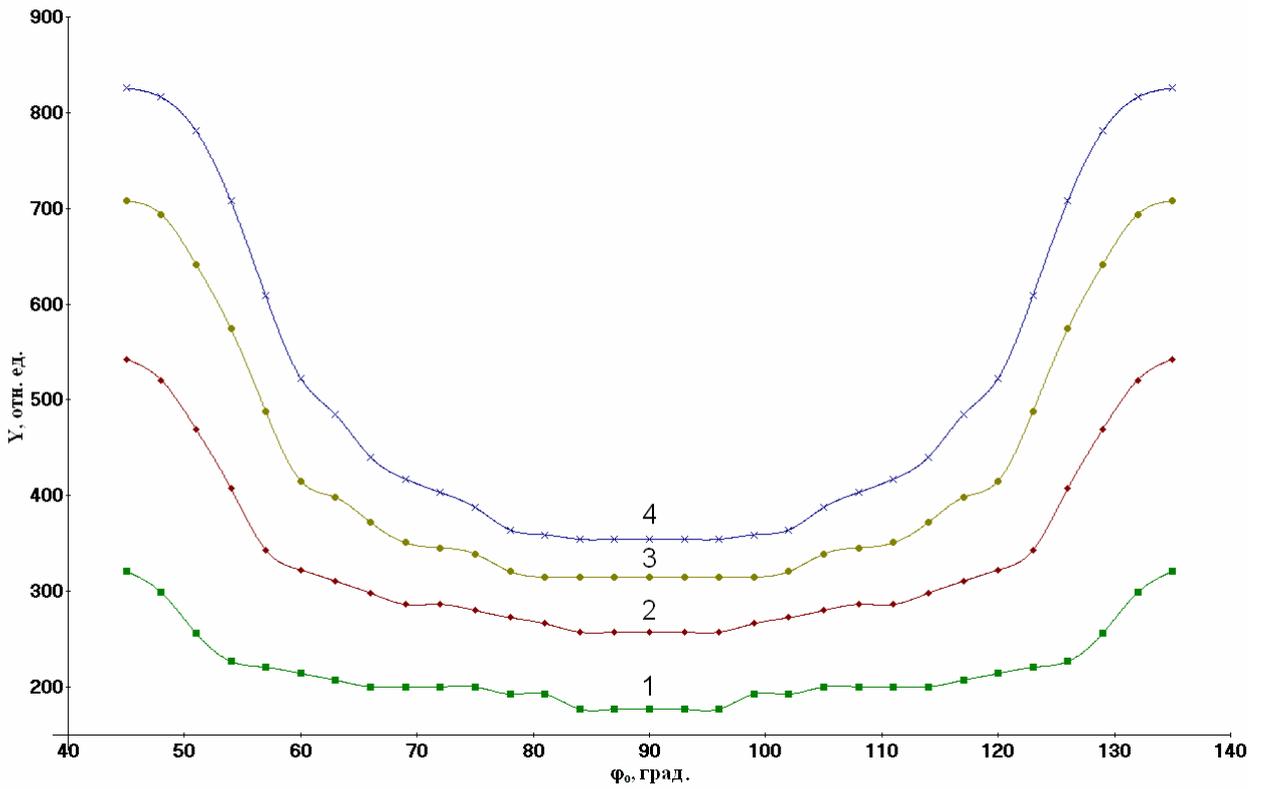


Рис. 41. Интегральные по полярному углу ϑ_e распределения эмитированных атомов по азимутальному углу вылета ϕ_0 для эмиссии атомов с грани (001) Ni для энергий $E_e = 0,4 \pm 0,4$ эВ (1), $0,6 \pm 0,4$ эВ (2), $0,8 \pm 0,4$ эВ (3) и $1,0 \pm 0,4$ эВ (4). Начальная функция распределения $\cos\vartheta_e/E_e^2$.

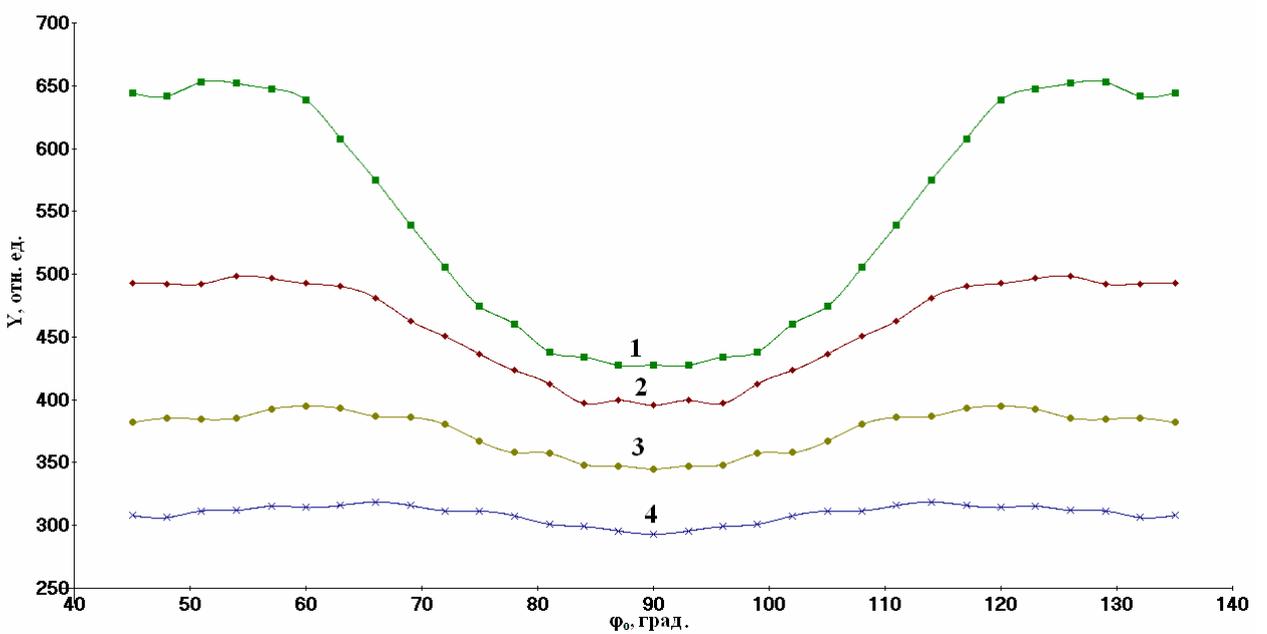


Рис. 42. Интегральные по полярному углу ϑ_e распределения эмитированных атомов по азимутальному углу вылета ϕ_0 для эмиссии с грани (001) Ni для энергий $E_e = 2,0 \pm 0,4$ эВ

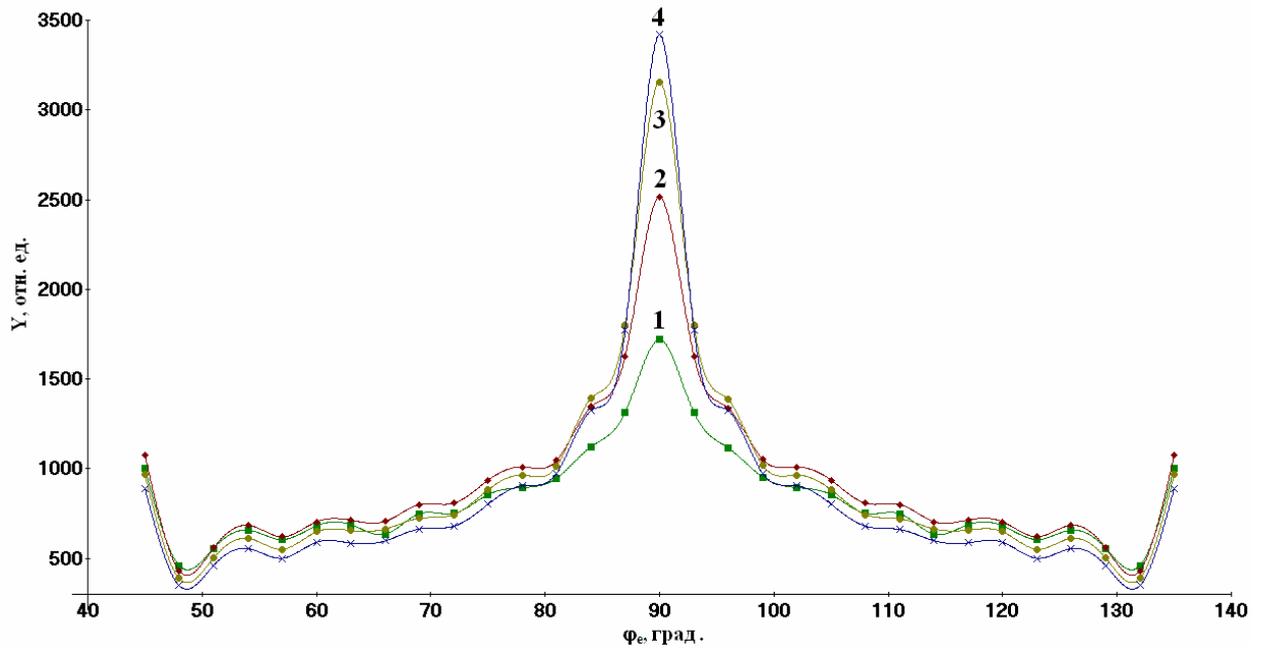


Рис. 43. Интегральные по полярному углу ϑ_e распределения эмитированных атомов по азимутальному углу вылета φ_e для эмиссии атомов с грани (001) Au для энергий $E_e = 0,4 \pm 0,4$ эВ (1), $0,6 \pm 0,4$ эВ (2), $0,8 \pm 0,4$ эВ (3) и $1,0 \pm 0,4$ эВ (4). Начальная функция распределения $\cos\vartheta_0/E_0^2$.

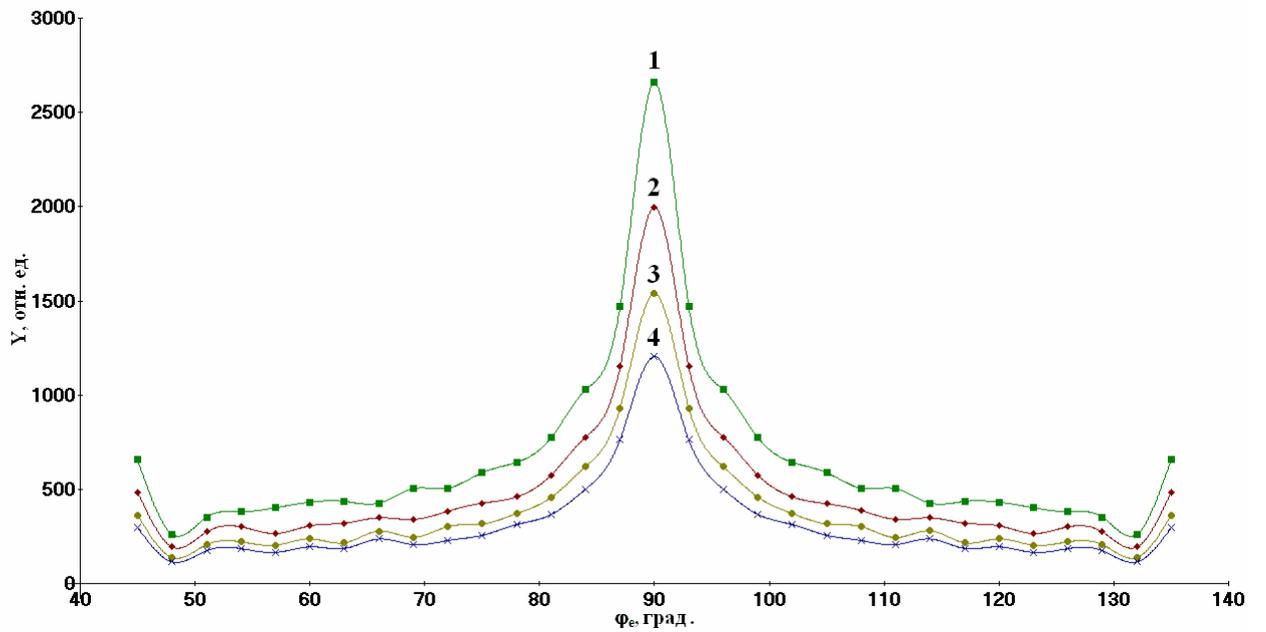


Рис. 44. Интегральные по полярному углу ϑ_e распределения эмитированных атомов по азимутальному углу вылета φ_e для эмиссии атомов с грани (001) Au для энергий $E_e = 2,0 \pm 0,4$ эВ (1), $3,0 \pm 0,4$ эВ (2), $4,0 \pm 0,4$ эВ (3) и $5,0 \pm 0,4$ эВ (4). Начальная функция распределения $\cos\vartheta_0/E_0^2$.

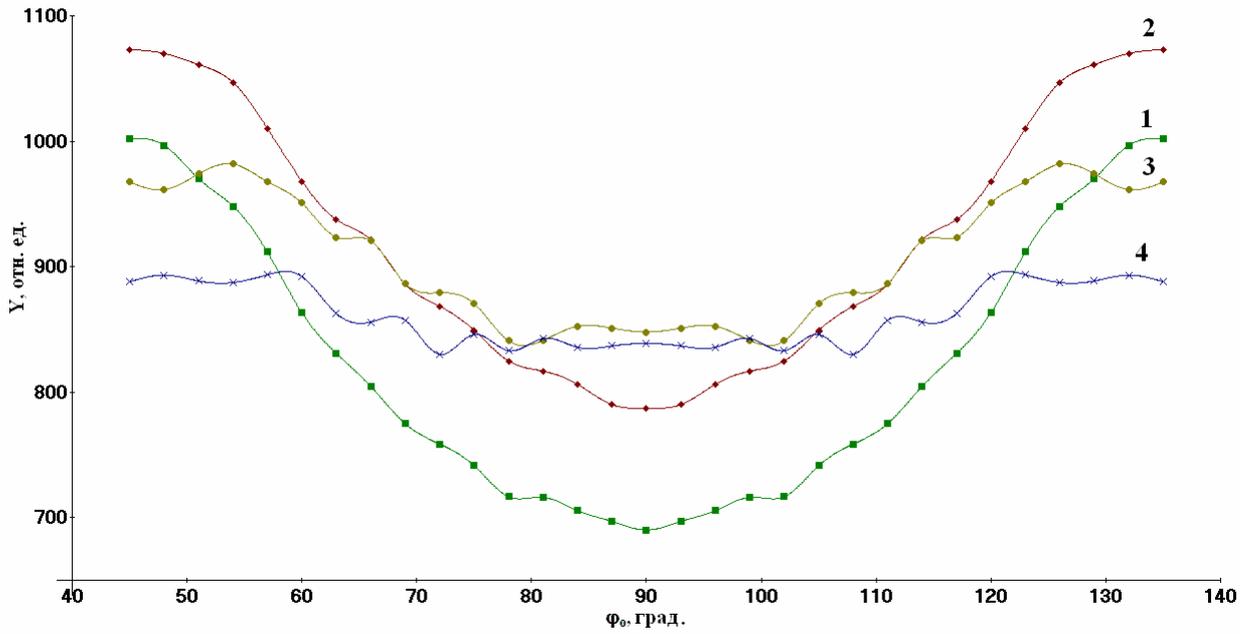


Рис. 45. Интегральные по полярному углу ϑ_e распределения эмитированных атомов по азимутальному углу вылета ϕ_0 для эмиссии атомов с грани (001) Au для энергий $E_e = 0,4 \pm 0,4$ эВ (1), $0,6 \pm 0,4$ эВ (2), $0,8 \pm 0,4$ эВ (3) и $1,0 \pm 0,4$ эВ (4). Начальная функция распределения $\cos\vartheta_0/E_0^2$.

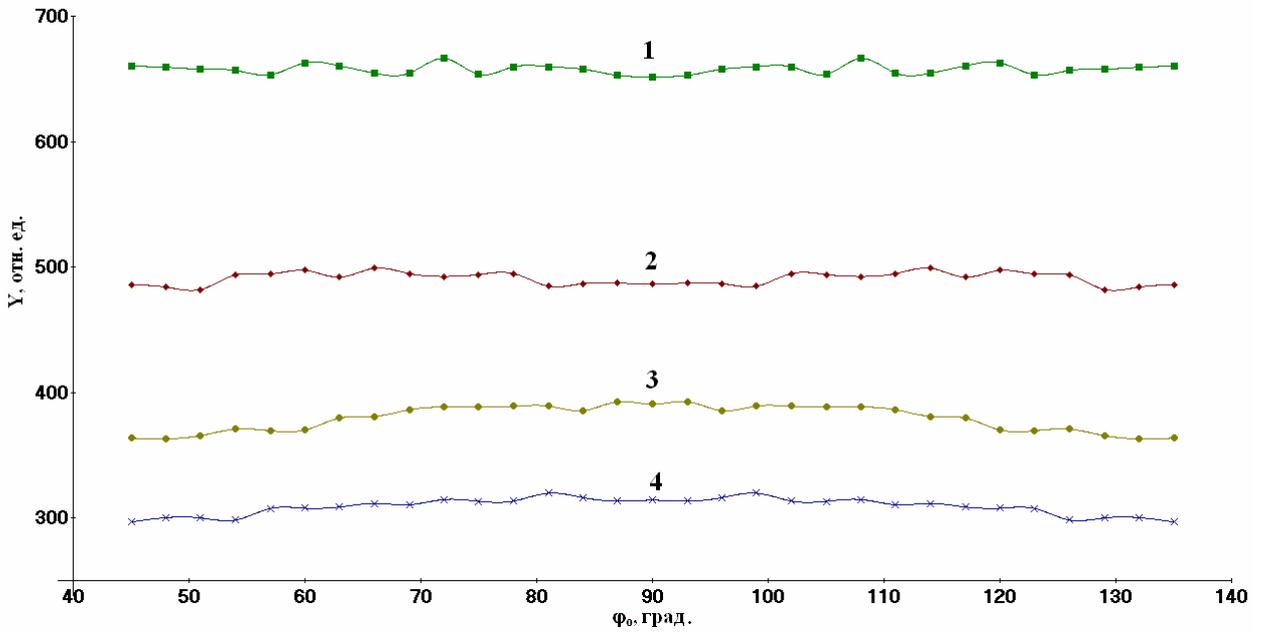


Рис. 46. Интегральные по полярному углу ϑ_e распределения эмитированных атомов по азимутальному углу вылета ϕ_0 для эмиссии атомов с грани (001) Au для энергий $E_e = 2,0 \pm 0,4$ эВ (1), $3,0 \pm 0,4$ эВ (2), $4,0 \pm 0,4$ эВ (3) и $5,0 \pm 0,4$ эВ (4). Начальная функция распределения $\cos\vartheta_0/E_0^2$.

3.4 Азимутальные распределения эмитированных атомов с разрешением по $\cos\vartheta_e$ и энергии E_e

Вклад атомов, перефокусированных через центр линзы, наблюдается также в формировании трижды дифференциальной функции распределения, т.е. азимутальных распределений эмитированных атомов с одновременным разрешением по $\cos\vartheta_e$ и энергии E_e . Обнаружены области полярного и азимутального углов вылета ϑ_e и φ_e и энергии E_e для трижды дифференциальной функции распределения эмитированных атомов, для которых сигнал распыленных атомов на 100% формируется за счет эмитированных атомов, перефокусированных через центр линзы, состоящей из двух атомов - ближайших к эмитируемому атому соседей в плоскости поверхности. Например, если зафиксировать полярный угол ϑ_e $[56,3^\circ, 57,8^\circ]$, азимутальный угол φ_e $[82,5^\circ, 85,5^\circ]$ и энергию $E_e = 10,0 \pm 0,4$ эВ, то все наблюдаемые распыленные атомы эмитировались под начальным азимутальным углом $\varphi_0 = 114^\circ$ (рис. 47).

Моделирование с такими же параметрами было проведено для большой, более точной статистики. На рис. 48 видно, что атомы, эмитированные под начальными азимутальными углами φ_0 от $112,8^\circ$ до $116,4^\circ$, наблюдаются в интервале углов φ_e $[82,5^\circ, 85,5^\circ]$. Полное число атомов, эмитированных под углами φ_0 , и атомов, наблюдаемых под углами φ_e , одинаково, поэтому площади под кривыми 1 и 2 на рис. 51 равны. Распределения, представленные на рис. 48, являются более точными по сравнению с распределениями, представленными на рис. 47, из-за большей статистики эмитируемых атомов и меньшей апертуры детектора по азимутальному углу φ_e . Дополнительный анализ показал, что все перефокусированные атомы являются сильно блокированными.

Отметим, что перефокусировка наблюдалась нами также и для других интервалов полярного угла ϑ_e и энергии E_e . Для тех же интервалов полярного и азимутального углов наблюдения для энергии $E_e = 55,0 \pm 0,4$ эВ сигнал состоит из суммы вкладов фокусированных атомов (рассеянных ближайшим к интервалу азимутальных углов наблюдения атомом линзы) и перефокусированных атомов (рассеянных дальним по отношению к азимутальному углу наблюдения атомом линзы). Таким образом, сигнал распыленных атомов при высоких энергиях E_e уже не пол-

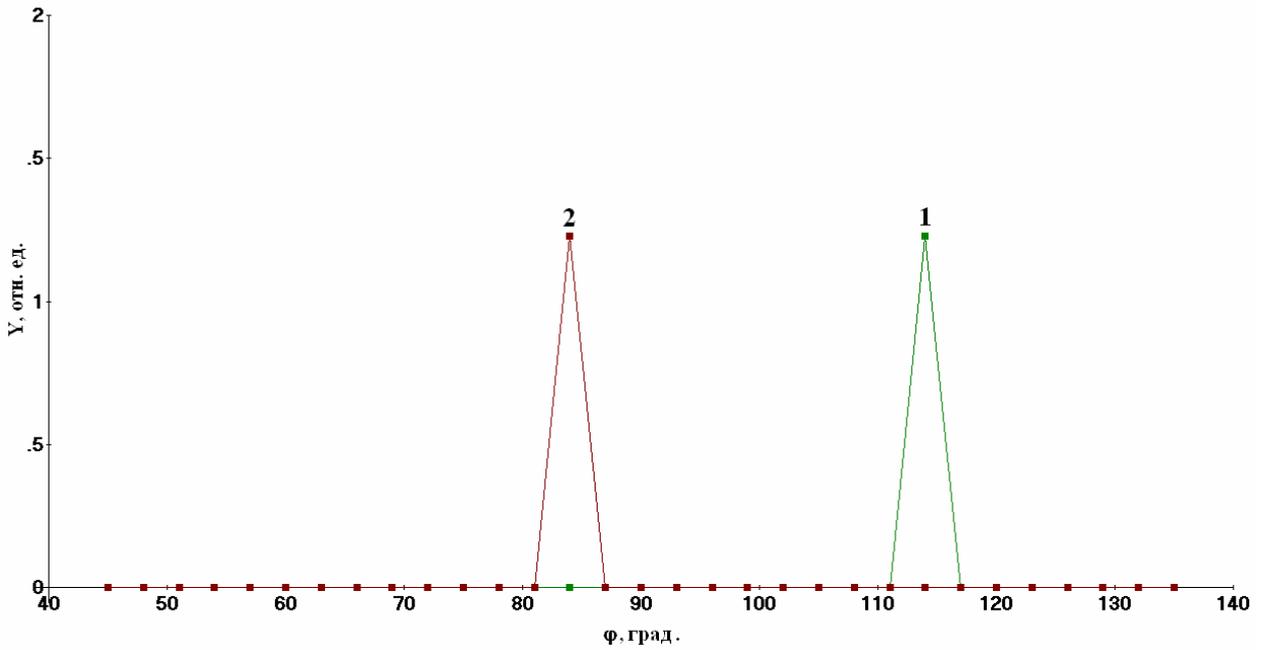


Рис. 47. Дифференциальные по начальному азимутальному углу ϕ_0 (1) и азимутальному углу наблюдения ϕ_e (2) распределения эмитированных атомов при эмиссии с грани (001) Ni для энергии $E_e 10,0 \pm 0,4$ эВ и полярного угла вылета $\vartheta_e [56,3^\circ, 57,8^\circ]$, наблюдаемых в интервале углов $\phi_e [82,5^\circ, 85,5^\circ]$. Начальная функция распределения $\cos\vartheta_0/E_0^2$. Результаты получены для маленькой статистики.

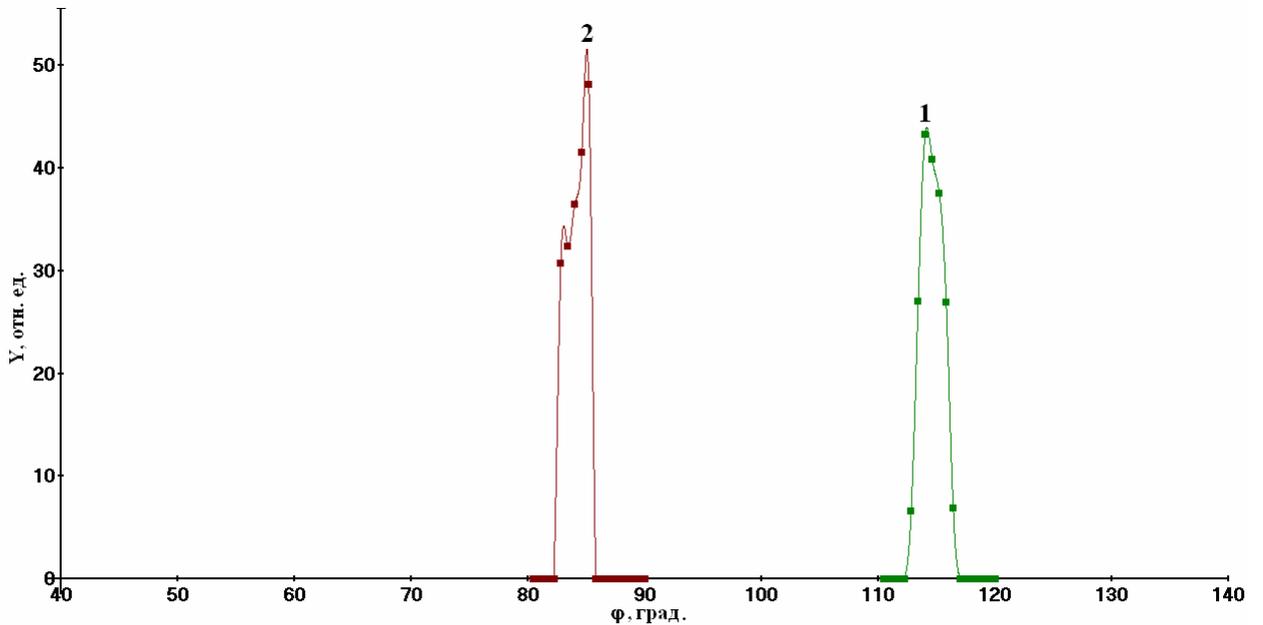


Рис. 48. Дифференциальные по начальному азимутальному углу ϕ_0 (1) и азимутальному углу наблюдения ϕ_e (2) распределения эмитированных атомов при эмиссии с грани (001) Ni для энергии $E_e 10,0 \pm 0,4$ эВ и полярного угла вылета $\vartheta_e [56,3^\circ, 57,8^\circ]$, наблюдаемых в интервале углов $\phi_e [82,5^\circ, 85,5^\circ]$. Начальная функция распределения $\cos\vartheta_0/E_0^2$. Результаты получены для большой статистики.

ностью формируется только за счет перефокусированных атомов.

Обнаружено, что для энергий E_e от $9,0 \pm 0,4$ эВ до и $25,0 \pm 0,4$ эВ все перефокусированные атомы являются сильно блокированными при ϑ_e [$56,3^\circ$, $57,8^\circ$] и φ_e [$82,5^\circ$, $85,5^\circ$]. Обратное для этих энергий E_e также верно: все сильно блокированные атомы являются перефокусированными через центр линзы. Они на 100% формируют наблюдаемый сигнал. Для энергии E_e от $55,0 \pm 0,4$ эВ и тех же углов наблюдения все перефокусированные атомы являются сильно блокированными, но обратное утверждение неверно, т.е. не все сильно блокированные атомы являются перефокусированными через центр линзы.

Для низких энергий, например, для E_e $1,0 \pm 0,4$ эВ также все перефокусированные атомы являются сильно блокированными. Таким образом, сильная блокировка эмитированных атомов (сильное отклонение эмитированных атомов в направлении нормали к поверхности) обеспечивает перефокусировку через центр линзы. Однако эти результаты становятся неверными при рассмотрении интервала полярных углов $\vartheta_e = [49,8^\circ, 51,5^\circ]$.

При эмиссии атомов с грани (001) Ni в распределении эмитированных атомов по начальному азимутальному углу φ_0 для атомов, наблюдаемых в интервале углов ϑ_e [$56,3^\circ$, $57,8^\circ$] и φ_e [$82,5^\circ$, $85,5^\circ$] при низких энергиях $E_e \sim 1$ эВ, наблюдаются как собственные, так и несобственные атомы, вылетающие с двух сторон относительно центра линзы. Для высоких энергий, например $E_e = 55 \pm 0,4$ эВ, атомы фокусируются со стороны ближайшего атома линзы, все они являются сильно блокированными. Если изучить механизм формирования трижды дифференциальной функции распределения $F_e(\cos\vartheta_e, \varphi_e, E_e)$, т.е. выяснить, под какими начальными азимутальными углами φ_0 происходит вылет атомов, то можно сделать вывод, что все перефокусированные атомы являются сильно блокированными на 100%. Этот вывод оказывается верным также и для других интервалов полярного угла наблюдения, например, ϑ_e [$59,3^\circ$, $60,7^\circ$].

4. Выводы

1. С помощью модели молекулярной динамики исследованы особенности фокусировки атомов, эмитированных с поверхности граней (001) Ni и (001) Au, по азимутальному углу, как при формировании интегрального азимутального распределения распыленных атомов, так и азимутальных распределений эмитированных атомов с разрешением по полярному углу и энергии. Исследованы механизмы формирования наблюдаемых особенностей этих распределений.
2. Показано, что степень анизотропии интегрального распределения по азимутальному углу φ_e атомов, распыленных с поверхности грани (001) Au, больше, чем с грани (001) Ni. Это связано с более жестким потенциалом взаимодействия двух атомов Au.
3. Рассчитаны распределения эмитированных атомов по начальному азимутальному углу φ_0 , в том числе для фиксированных интервалов углов наблюдения φ_e . Выявлена роль перефокусировки атомов через центр линзы и сильно заблокированных атомов в формировании особенностей этих распределений. Показано, что особенности распределений эмитированных атомов по азимутальным углам φ_e и φ_0 сильно зависят от энергии E_e .
4. Обнаружены области полярного и азимутального углов вылета и энергии для трижды дифференциальной функции распределения эмитированных атомов, для которых сигнал распыленных атомов на 100% формируется за счет эмитированных атомов, перефокусированных через центр линзы, состоящей из двух атомов – ближайших к эмитируемому атому соседей в плоскости поверхности.
5. В расчетах с разрешением по полярному углу наблюдения ϑ_e и энергии E_e обнаружено, что перефокусировка атомов через центр линзы осуществляется сильно заблокированными атомами. Обнаружено, что вклад сильно заблокированных атомов Au значительно выше, чем атомов Ni.
6. Показано, что в распределениях по φ_e при уменьшении полярного угла наблюдения наблюдается разделение максимума на два, и исследованы особенности радужного эффекта, лежащего в основе формирования этой особенности.
7. Рассчитан вклад в формирование трижды дифференциальной функции распределения эмитированных атомов собственных и несобственных по азимутально-

му углу атомов. Исследован вклад несобственных атомов, вылетавших первоначально с двух сторон относительно интервала наблюдения φ_e .

Литература

1. Wehner G.K. Sputtering of metal single crystals by ion bombardment // J. Appl. Phys. 1955. V. 26. No. 8. P. 1056-1057.
2. Silsbee R.H. Focusing in collision problems in solids // J. Appl. Phys. 1957. V. 28. No. 11. P. 1246-1250.
3. Lehmann Chr., Sigmund P. On the mechanism of sputtering // Phys. Stat. Sol. 1966. V. 16. No. 2. P. 507-511.
4. Harrison D.E., Johnson J.P., Levy N.S. Spot patterns and Silsbee chains of a Cu single crystal // Appl. Phys. Lett. 1966. V. 8. No. 2. P. 33-36.
5. Nelson R.S., Thompson M.W. Atomic collision sequences in crystals of copper, silver and gold revealed by sputtering in energetic ion beams // Proc. Roy. Soc. 1961. V. A259. No. 1299. P. 458-479.
6. Робинсон М. Теоретические вопросы распыления монокристаллов // Распыление твердых тел ионной бомбардировкой / под ред. Р. Бериша. М.: Мир. 1984. С. 99-193.
7. Rosencrance S.W., Burnham J.S., Sanders D.E., He C., Garrison B.J., Winograd N., Postawa Z., DePristo A.E. Mechanistic study of atomic desorption resulting from the keV-ion bombardment of fcc {001} single-crystal metals // Phys. Rev. 1995. V. B52. No. 8. P. 6006-6014.
8. Самойлов В.Н. К вопросу о корректности описания углового распределения распыленных атомов в рамках аналитических моделей распыления аморфных мишеней // Изв. АН СССР. Сер. физ. 1990. Т. 54. № 7. С. 1283-1287.
9. Samoilov V.N., Korsakova O.S., Rodionova E.L. Nikitin A.M., Bachurin V.I. Mechanisms of focusing in sputtering: molecular dynamics computer simulation study // Proc. 9th Int. Conf. on Ion Beam Modification of Materials, Canberra, Australia, 5-10 February 1995 / Eds. J.S. Williams, R.G. Elliman, M.C. Ridgway, Amsterdam, Netherlands: Elsevier Science B.V., 1996. P. 710-714.

10. Самойлов В.Н., Корсакова О.С., Елесин В.А. Механизмы образования угловых распределений атомов, распыленных с граней (001) и (111) Ni // Изв. АН. Сер. физ. 2000. Т. 64. № 4. С. 821-826.
11. Шульга В.И. Фокусировка частиц атомными линзами в кристаллах. // Вестник Моск. университета. Серия 3. Физика. Астрономия. 2002. № 3. С. 47-50.
12. Корсакова О.С., Алешкевич В.А., Самойлов В.Н., Никитин А.М. Исследование поверхностного механизма фокусировки атомов, эмитируемых с поверхности грани (001) Ni, методом молекулярной динамики // Поверхность. Рентг., синхр. и нейтр. исслед. 1997. № 2. С. 77-92.
13. Самойлов В.Н. О высокой эффективности фокусировки распыленных атомов по поверхностному механизму // Изв. АН, Сер. физ. 1992. Т. 56. № 6. С. 38-45.
14. Samoylov V.N. Peculiarities of atom ejection from the surface atomic layer of a single crystal. Computer simulation study // Глава в книге "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.
15. Шпиньков В.И., Самойлов В.Н. О фокусировке атомов, распыленных с грани (001) Ni в случае гауссовых пучков эмитируемых атомов // Поверхность. Рентг., синхр. и нейтр. исслед. 2009. № 3. С. 73-79.
16. Boubetra Dj., Selmani L. Comparison of the Wehner spots with angle distribution sputtered atoms materials // Researcher. 2009. V. 1. No. 1. P.41-45.
17. Samoilov V.N., Tatur A.E., Yastrzhembsky V.I. Computer simulation studies of preferential sputtering of Ni₄Mo (001) single crystal // Radiation Effects and Defects in Solids. 1997. V. 142. No. 1. P. 323-336.
18. Williams G.J. A molecular dynamics study of the sputtering of zirconium. Ph.D. Thesis, University of Newcastle, Newcastle, Australia, 1998. 326 P.
19. Williams G.J., King B.V. Single collision focusing and the angular distribution of sputtering from Zr (0001) // Nucl. Instr. and Meth. in Phys. Res. 1999. V. B153. No. 1-4. P. 314-318.
20. Chang C. Energy dependence of angular distributions of sputtered particles from the Ag (111) surface // Phys. Rev. 1993. V. B48. No. 17. P. 12399-12405.

21. Rubesame D., Niedrig H. Angular atomic emission distribution of Ni bombarded by 23 keV Ar ions above and below the Curie temperature // *Radiation Effects and Defects in Solids*. 1996. V. 138. No. 1. P. 49-56.
22. Thompson M.W. The energy spectrum of ejected atoms during the high energy sputtering of gold // *Phil. Mag.* 1968. V. 18. No. 152. P. 377-414.
23. Sigmund P. Theory of sputtering. I. Sputtering yield of amorphous and polycrystalline targets // *Phys. Rev.* 1969. V. 184. No. 2. P. 383-416.
24. Vicanek M, Jimenez Rodrigues J.J., Sigmund P. Depth of origin and angular spectrum of sputtered atoms // *Nucl. Instr. and Meth. in Phys. Res.* 1989. V. B36. No 2. P. 124-136.
25. Shulga V.I. Ejection of fast recoils under ion bombardment of crystals // *Radiation Effects and Defects in Solids*. 1980. V. 51. No. 1. P. 1-10.
26. Shapiro M. H. Kinetic energy loss in sputtering // *Nucl. Instr. and Meth. in Phys. Res.* 1989. V. B42. No. 2. P. 290-292.
27. Chakarov I.R., Cherepin V.T., Karpuzov D.S., Kosyachkov A.A., Vichev R.G. Angle and energy distributions of sputtered particles from molybdenum (110) surfaces // *Nucl. Instr. and Meth. in Phys. Res.* 1989. V. B39. No. 1-4. P. 81-85.
28. 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. Рентг., синхр. и нейтр. исслед.* 2011. № 4. С. 34-46.
29. Korsakova O.S., Samoilo V.N., Dekhtyar K.V., Gurko I.B. The surface mechanism of preferential sputtering of isotopes under ion bombardment for ion beam analysis of surface composition in low dose regime // *Proc. 7th Eur. Conf. on Applications of Surface and Interface Analysis*. Goteborg, Sweden / John Wiley and Sons Publ., 1997. P. 860-863.
30. Корсакова О.С. Механизмы формирования угловых и энергетических распределений атомов, распыленных с поверхности кристаллов при ионной бомбардировке. Дис. канд. физ.-мат. наук. М.: МГУ, 1997. 183 С.