

Ni 原子倾斜轰击 Pt(111) 表面低能溅射现象的 分子动力学模拟*

颜超[†] 段军红 何兴道

(南昌航空大学测试与光电学院, 无损检测技术教育部重点实验室, 南昌 330063)

(2010年8月30日收到; 2010年10月26日收到修改稿)

采用嵌入原子方法的原子间相互作用势, 通过分子动力学模拟详细研究了以不同角度入射的低能 Ni 原子与 Pt(111) 基体表面相互作用过程中的低能溅射行为. 结果表明: 随着入射角度从 0° 增加到 80° , 溅射产额 Y_s 和入射原子钉扎系数 S 的变化均可以根据入射角 θ 近似地分为以下三个区域: 当 $\theta \leq 20^\circ$ 时, Y_s 和 S 几乎保持不变, 其值与垂直入射时接近, 溅射原子的发射角分布和能量分布也与垂直入射时的情况类似; 当 $\theta \geq 60^\circ$ 时, $Y_s \approx 0, S \approx 0$; 在 $20^\circ \leq \theta \leq 60^\circ$ 的范围内, 钉扎系数呈现减小的趋势, 溅射产额呈现先增大后减小的趋势, 溅射原子的发射角分布和能量分布均与 $\theta \leq 20^\circ$ 时的情况有一定的差异. 通过对入射原子和被溅射原子运动轨迹的跟踪, 分别给出了不同入射角度范围内的低能溅射机理及入射原子与基体表面的相互作用机理, 斜入射与垂直入射时的低能溅射机理存在一定的差异, 也不同于基于二体碰撞理论得到的溅射模型.

关键词: 分子动力学模拟, 入射角, 低能溅射

PACS: 83.10.Rs, 79.20.Rf, 68.49.Sf

1. 引言

载能沉积技术是有效改善材料和应用部件表面性能的重要手段. 整体或部分沉积粒子能量的提高不仅降低了薄膜制备时基体的温度, 而且显著地改善了薄膜的宏观性能. 但是, 沉积能量的提高也会导致表面缺陷和溅射的产生. 同时, 最新研究结果表明, 粒子束的入射角度对薄膜的表面取向、表面结构及表面粗糙度等均有一定的影响^[1-4]. 因此, 研究不同入射角度下低能粒子与表面的相互作用以及入射角度对低能溅射现象的影响, 不仅对于更深入地探讨低能粒子对薄膜生长模式的影响具有重要的理论意义, 而且对改进和优化薄膜制备工艺、提高薄膜质量具有一定的指导作用.

有关溅射过程的理论研究起始于 20 世纪 60 年代初^[5]. 1969 年, Sigmund^[6] 在前人工作的基础上, 首先建立了基于二体碰撞的线性级联理论模型, 并在 10^3 — 10^6 eV 的能量范围内得到了很好的实验

证. 文献[7]用基于二体碰撞近似的 Monte Carlo 模拟方法研究了离子轰击入射角对溅射参数的影响, 讨论了入射角与溅射产额、溅射粒子能谱、角分布和阈能的关系. 但是, 由于低能粒子与表面相互作用涉及多体碰撞问题, 一直没有形成比较完善的溅射理论. 所以, 基于分子动力学的计算机模拟成为研究低能粒子与表面相互作用以及低能表面溅射现象的主要手段. 近年来, Feil 等^[8]利用分子动力学模拟解释了低能 Ar 离子垂直轰击 Cu 表面时 Ar 离子在 Cu 表面的俘获与发射机理; 文献[9—11]利用分子动力学方法系统地研究了垂直入射的低能粒子与 Pt(111) 表面的相互作用过程, 并根据模拟结果提出了轻原子反射的低能溅射机理, 这一机理可以很好地解释粒子垂直入射时的低能溅射现象, 但是缺乏对倾斜入射时低能溅射现象的研究. 文献[12—14]的分子动力学模拟结果显示, 随着入射角的增大溅射产额呈现先增加后降低的趋势, 钉扎系数也有所变化, 即斜入射与垂直入射时的低能溅射现象存在一定的差异. 此外, 近年来在实验方面也

* 南昌航空大学人才启动基金(批准号:EA200908182)、航空科学基金(批准号:2009ZE56009)和国家自然科学基金(批准号:50962011)资助的课题.

[†] E-mail: enjoyyan80@yahoo.com.cn

有一些关于斜入射时溅射现象的研究. Sekowski 等^[15]通过离子轰击半导体靶的实验研究得到入射角对溅射原子的发射角分布存在一定的影响; Kenmotsu 等^[16]发现,在低能沉积过程中一定角度的倾斜沉积会使得溅射产额和反射系数均有很大的提高,证实了文献[12—14]中分子动力学模拟的结果. 上述这些模拟和实验工作为低能溅射理论的完善提供了必要的基础,但是关于斜入射时的低能溅射行为和机理还需要做进一步的研究.

本文工作主要是通过分子动力学方法模拟以不同角度入射的粒子与基体表面的相互作用,研究入射角对低能溅射现象的影响,并探讨倾斜入射时低能表面溅射现象的物理机理. 实际应用的体系一般比较复杂,复杂的体系可以反映出比较多的物理现象,但是也使得对不同物理现象本质的研究产生难度,反而不利于物理规律的分析,因此选择相对简单的金属体系是比较有利的. 之所以选择 Ni/Pt (111)体系主要原因有以下两方面:一方面,已有大量能比较准确描述 Ni 和 Pt 等面心立方金属的原子间相互作用势的研究工作报告,有利于研究工作的开展;另一方面,作者至今尚未见到有关 Ni 斜入射 Pt 表面的计算机模拟工作的报道,对于拓展低能溅射研究体系具有一定的现实意义.

2. 物理模型和模拟方法

在模拟中选择的体系与文献[9]中的体系类似,选用的基体是一个具有周期性边界、表面取向为(111)平滑表面的计算单胞,如图1所示. 计算单胞体积为 $3\sqrt{6}a_0 \times 5\sqrt{2}a_0 \times 4\sqrt{3}a_0$ ($a_0 = 0.392 \text{ nm}$ 为 Pt 的晶格常数),其中包含有 1440 个原子,360 个晶胞,每层有 12×10 个原子,共分十二层. 由于所关注的是低能原子倾斜入射时所产生的溅射行为,所以入射原子的能量 E_{in} 设定为 100 和 200 eV,入射角度从与表面法向成 0° (垂直入射) 到与表面法向呈 80° ,即入射方向与基体晶格的 $[111]$ 方向成 θ 角,与 $[\bar{1}1\bar{2}]$ 晶向的夹角为 $\left(\frac{\pi}{2} - \theta\right)$,与 $[\bar{1}\bar{1}0]$ 取向保持 90° . 在模拟过程中,基体温度选择为 300 K. 在进行沉积之前,理想表面先经过一个 3 ps 的等温弛豫过程,以保证基体表面的微观状态更接近于真实基体表面的初始状态. 入射原子从基体上方倾斜入射到基体表面,入射点则是在计算单胞表面中心附近最

小周期性面积 ($0.5\sqrt{6}a_0 \times 0.5\sqrt{2}a_0$) 的范围内随机选取的,这个范围包含一个表面原子及其所有的近邻位置. 选择可以忽略入射原子与基体原子间相互作用的位置作为入射原子的初始高度. 原子入射的整个过程为 3 ps,本文的溅射产额 Y_s 、钉扎系数 S 、能量分布等结果是 500 次单个原子沉积结果的统计平均值. 在模拟中,原子间相互作用势采用嵌入原子法的多体势^[17, 18],多原子体系的牛顿方程采用变步长速度 Verlet 算法求解^[19].

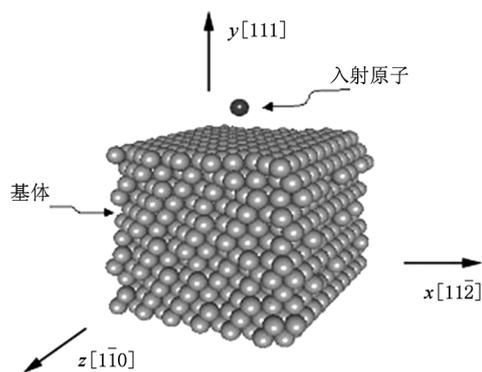


图1 模拟中所采用的晶体模型

3. 结果及分析

3.1. 低能溅射现象

图2给出了基体温度为 300 K 时,入射能量为 100 和 200 eV 的 Ni 原子分别沉积到 Pt (111) 表面所产生的溅射原子产额随入射角的变化. 从图2可以看出:在 $0^\circ \leq \theta \leq 80^\circ$ 的范围内,溅射产额的变化可按入射角近似地划分成 $\theta \leq 20^\circ$, $20^\circ \leq \theta \leq 60^\circ$ 和 $\theta \geq 60^\circ$ 三个区域. 在这三个区域中,入射角对溅射产额的影响各不相同. 当 $\theta \leq 20^\circ$ 时, Ni 原子以不同角度入射时得到的溅射产额均近似等于垂直入射 ($\theta = 0^\circ$) 时的溅射产额,说明此时入射角对低能溅射的影响很小,此时的低能溅射机理与垂直入射时的情况类似;当 $\theta \geq 60^\circ$ 时, $Y_s \approx 0$,即基本没有溅射产生,说明此时的低能沉积过程难以使基体表面原子获得足够的能量而离开基体表面;在 $20^\circ \leq \theta \leq 60^\circ$ 的范围内,随着入射角度的增加,溅射产额呈现先增大后减小的趋势,溅射产额存在一个最大值. 当入射原子的能量 $E_{\text{in}} = 100 \text{ eV}$ 时, Y_s 的最大值出现在 $\theta = 30^\circ$;当入射原子的能量 $E_{\text{in}} =$

200 eV 时, Y_s 的最大值出现在 $\theta = 35.4^\circ$. 这说明, Y_s 的最大值对应的入射角随入射能量的增加呈增大趋势. 已有实验报道^[20], 约 1 keV 的 Ar 离子轰击金属表面时, 在 60° — 80° 的入射角范围内能得到最大的溅射产额, 这与我们模拟的结果是一致的.

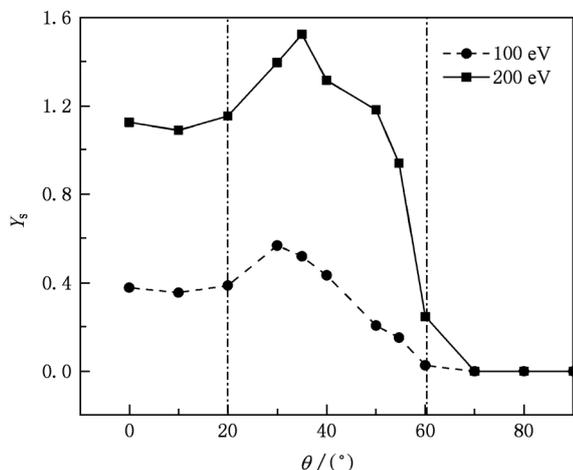


图2 入射能量分别为100和200 eV的Ni原子沉积Pt(111)表面时溅射产额 Y_s 随入射角 θ 的变化

为了进一步理解入射角对低能溅射现象的影响, 我们对不同角度入射时所产生的溅射原子的分布进行了计算. 当 $E_{in} = 200$ eV 的 Ni 原子以不同角度入射时所产生的溅射原子的发射角分布如图3所示. 从图3可以看出: 溅射原子的发射角主要集中在 30° — 70° 的范围内, 在 60° 左右的发射概率最大, 这一结果与大量的溅射实验及理论结果^[21, 22] 是一致的. 随着入射角范围的不同, 发射角的分布也存在着一一定的差异. 当入射角 $\theta \leq 20^\circ$ 时, 发射角的分布范围较宽, 与垂直入射时的情况类似; 当 $\theta \geq 30^\circ$ 时, 发射角的分布与垂直入射时有所不同, 其分布范围随入射角的增加而呈现减小的趋势. Oechsner^[23] 在分析了大量实验结果的基础上总结出溅射原子的发射能量主要集中在低于 20 eV 的范围内. 图4给出了 200 eV 的 Ni 原子沉积到 Pt(111) 表面时, 不同入射角所对应的溅射原子的能量分布. 从图4可以看出, 模拟结果与通过实验总结得出的结果一致. 同时, 在 $\theta \leq 20^\circ$ 时, 溅射原子的能量分布与垂直入射 ($\theta = 0^\circ$) 的情况类似, 即被溅射原子中低能量原子所占的比例较大; 随着 θ 增加到 30° 以上, 被溅射原子中低能量原子所占的比例明显降低. 被溅射原子的发射角分布和能量分布进一步证实了小角度入射时

的溅射机理与垂直入射的情况类似, 而较大角度入射时的溅射机理与垂直入射时的情况有一定的差异.

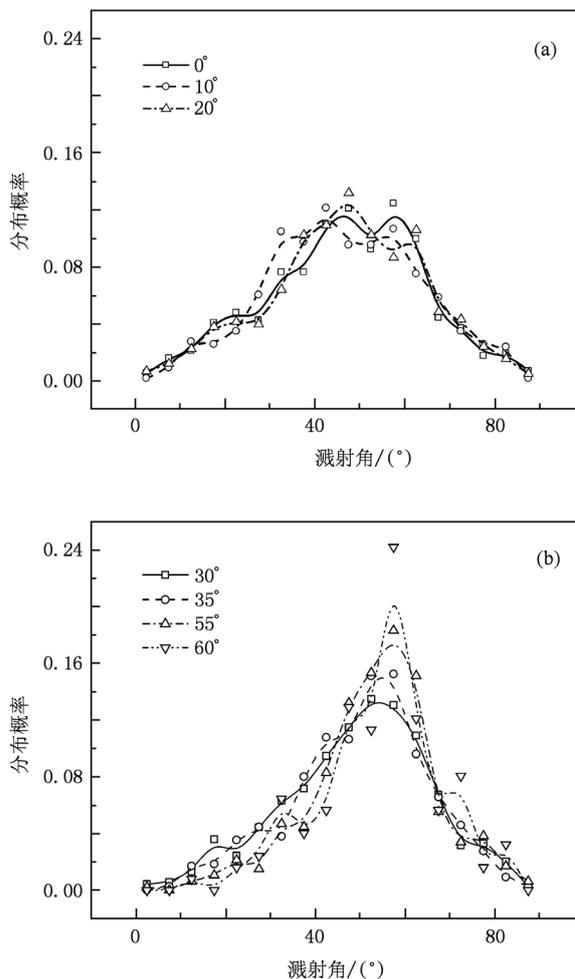


图3 入射能量为 200 eV 的 Ni 原子沉积 Pt(111) 表面时被溅射原子的发射角分布 (a) $\theta \leq 20^\circ$, (b) $30^\circ \leq \theta \leq 60^\circ$

3.2. 低能溅射机理

为了研究斜入射时低能溅射的物理机理, 首先必须了解入射原子在低能沉积过程中的作用. 图5显示了入射原子以不同的角度沉积在基体表面的钉扎系数 S . 钉扎系数定义为

$$\langle S \rangle = \frac{1}{N} \sum_{n=1}^N (1.0 - R_n), \quad (1)$$

其中 R_n 为入射原子的被散射指数, N 为入射原子数. R_n 由计算机模拟确定, 如果入射原子与基体表面相互作用后被反射而脱离基体表面, 则 $R_n = 1$; 反之, $R_n = 0$.

从图5可以看出: 当 $\theta \leq 20^\circ$ 时, $S \approx 0.6$, 入

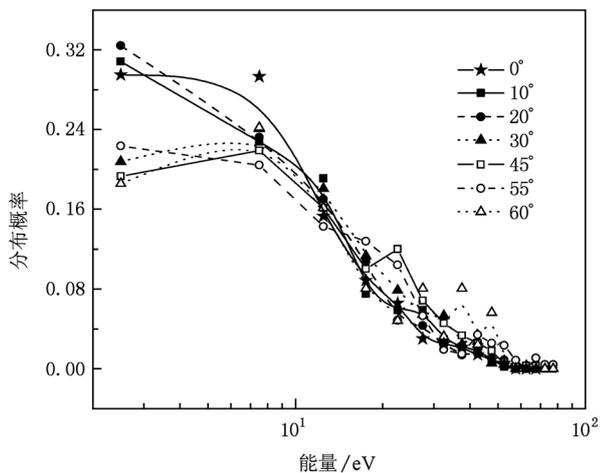


图4 入射能量为 200 eV 的 Ni 原子沉积 Pt (111) 表面时被溅射原子的能量分布

射角的变化对钉扎系数 S 的影响不太明显,此时入射原子与基体表面的相互作用过程和溅射行为均与垂直入射时的情况类似;当 $\theta = 20^\circ - 60^\circ$ 时,随着入射角度的增加,钉扎系数 S 急剧下降,即入射原子被反射离开基体表面的概率增加;当 $\theta \geq 60^\circ$ 时, $S \approx 0$,此时入射原子均被反射离开基体表面.

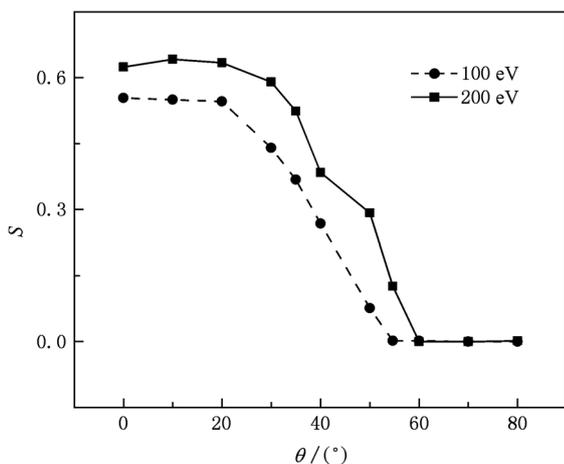


图5 入射能量为 100 和 200 eV 的 Ni 原子入射 Pt (111) 表面时的钉扎系数 S 随入射角 θ 的变化

通过对入射原子运动过程的跟踪,可以更为直接地理解不同入射角时入射原子与基体表面的相互作用过程和低能溅射过程.图 6 所示为不同入射角时入射原子的动能 E_i 和注入深度 D_i 随时间的演化以及被溅射的表层原子相对高度 D_s 随时间的演化.图 6(a) 显示了 100 eV 的 Ni 原子垂直入射时的

情况.从图 6(a) 可以看出,在入射原子穿过表面第一层的过程中,将被溅射的基体表面原子的高度略有下降,当入射原子再次到达表面时,此表面原子将随着入射原子一起离开基体表面而成为被溅射原子.文献[9]中给出的低能溅射机理可以很好地解释这一过程.图 6(b) 显示了 $E_{in} = 200$ eV 的 Ni 原子以与基体表面法向呈 10° 入射时的情况.从图 6(b) 可以看出,入射原子初次到达基体表层时,将被溅射的基体表面原子的高度略高于基体表面,但并没有离开基体表面,即此时该原子获得一部分能量,有离开初始晶格位置的趋势,但所获得的能量还不足以克服表面束缚产生溅射,当入射原子被反射再次与基体表层原子相互作用时,将再次传递一部分能量给表层原子,才导致溅射的产生.这一过程的溅射机理与文献[9]中给出垂直入射时的情况类似,即入射原子的反射导致表面原子的溅射.图 6(c) 显示了 $E_{in} = 200$ eV, $\theta = 40^\circ$ 时的情况,入射原子在穿过表面第一层的过程中,就有原子离开基体表层成为被溅射原子,同时溅射的产生使得基体表层晶格被破坏,入射原子被反射后将容易穿过被破坏的表层晶格而被散射,从而导致入射原子的钉扎系数减小.这一过程说明此时的溅射并不是由入射原子的反射所导致的,即溅射机理与垂直入射时的情况不同.图 6(d) 显示了 $E_{in} = 200$ eV, $\theta = 80^\circ$ 时的情况,入射原子在接近基体表面时直接被反射离开基体表面,因此钉扎系数 $S = 0$,也没有溅射产生.值得注意的是,从图 6 通过对 Ni 原子以不同角度入射时其能量变化和相对深度变化的比较可以看出:当入射原子在接近表层和亚表层时,其能量都会在急剧下降之后有所增加,这一现象正是低能沉积下多体相互作用的体现.当具有一定能量的原子入射到基体表面时,一方面会将部分能量传递给周围原子,使周围的表面原子获得一定的动能,另一方面会将相当一部分能量转变成表面原子的势能,从而引起表面的弹性形变.沉积原子能量的再获得,正是由于表面弹性形变恢复时势能的释放所致.

根据入射原子钉扎系数的变化规律和对原子运动过程的跟踪,图 7—图 9 给出了斜入射时的几种低能溅射机理和入射原子与基体表面相互作用机理.图 7 所示为 $\theta \leq 20^\circ$ 时起主导作用的低能溅射机理,即晶格弹性形变的恢复产生对入射原子的反射是导致溅射的主要原因.图 8 为 $20^\circ \leq \theta \leq 60^\circ$

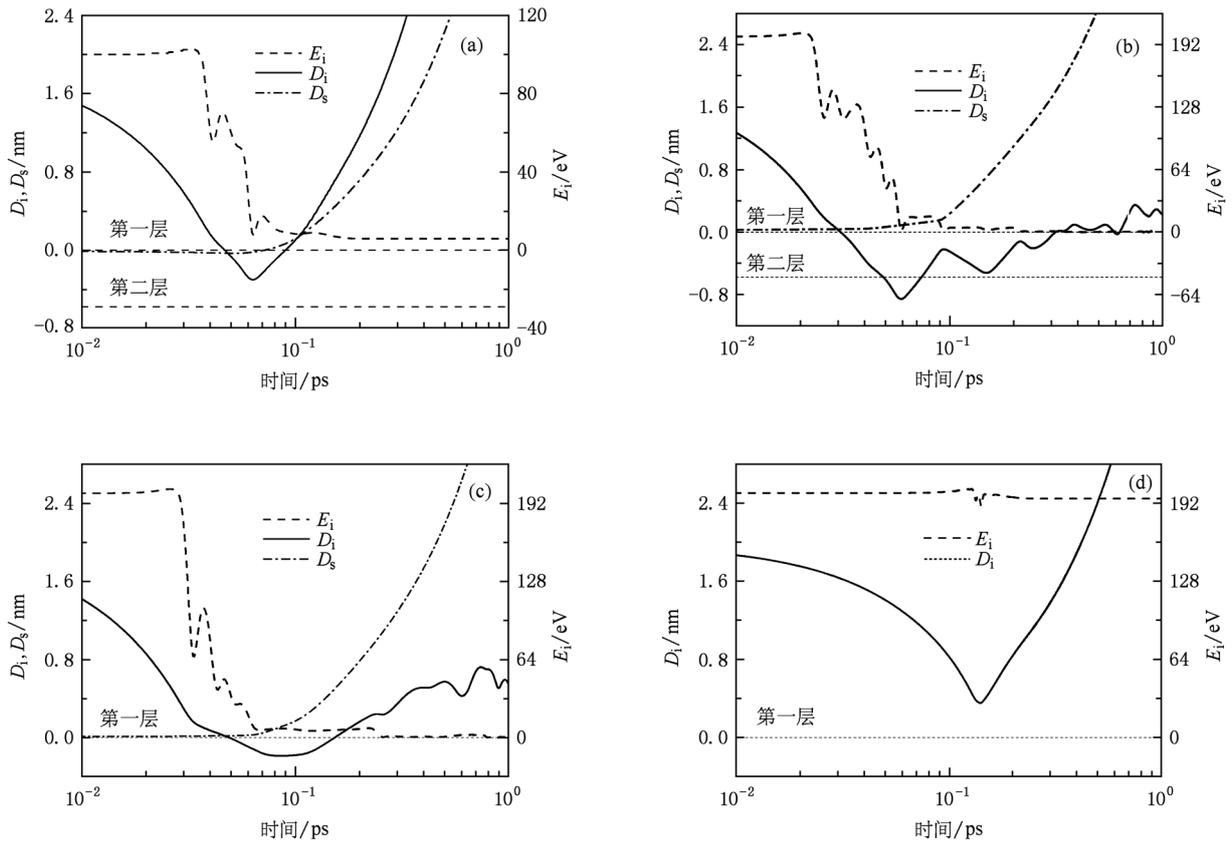


图6 Ni原子以不同角度入射到Pt(111)表面时的动能 E_i 和注入深度 D_i 随时间的演化以及被溅射的表层原子相对高度 D_s 随时间的演化 (a) $E_{in} = 100 \text{ eV}, \theta = 0^\circ$; (b) $E_{in} = 200 \text{ eV}, \theta = 10^\circ$; (c) $E_{in} = 200 \text{ eV}, \theta = 40^\circ$; (d) $E_{in} = 200 \text{ eV}, \theta = 80^\circ$

时起主导作用的溅射机理示意图,此时入射原子在穿过表面第一层的过程中与基体表层原子相互作用,导致表层原子的溅射,这一作用机理可以用二

体碰撞理论来解释,然后入射原子在亚表层由于基体弹性形变的恢复而被反射.当 $\theta \geq 60^\circ$ 时,入射原子不会穿过表层注入到基体内部,仅在基体表层导

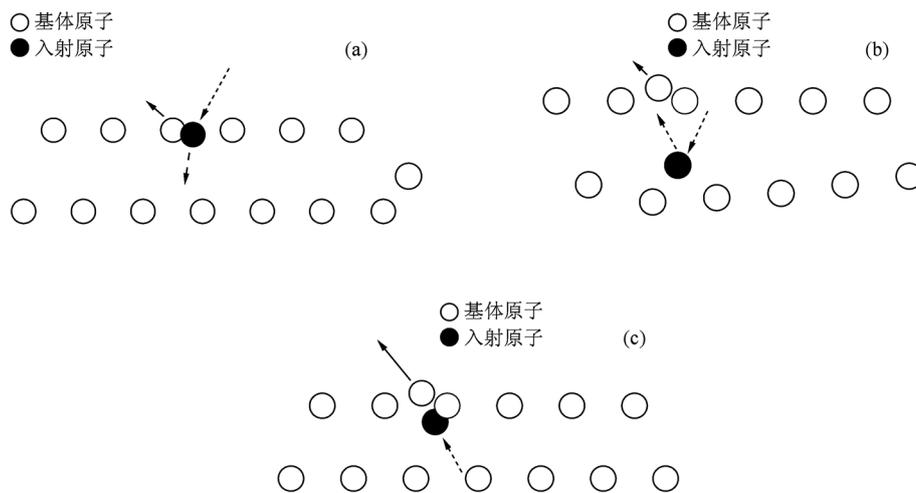


图7 小角度($\theta \leq 20^\circ$)入射时低能溅射机理示意图 (a) 入射原子穿过表面第一层并被表面原子散射,同时将能量传递给表面原子;(b) 表面原子获得一定的能量离开晶格位置,同时入射原子被注入亚表层并使晶格产生形变;(c) 被反射的入射原子与离开初始晶格位置的表面原子相互作用,使该表面原子被溅射出去

致基体晶格的弹性形变,而晶格弹性形变的恢复将使得入射原子直接从基体表层反射出去,因此,此时的溅射产额和钉扎系数均为零.事实上,在相同的人射条件下,入射原子与基体表面的相互作用机理往往不止一种.例如在 $20^\circ \leq \theta \leq 60^\circ$ 的范围内,当入射角增大到一定程度时,图 9 所示的作用机理将会出现,并且随着入射角度的增加这种作用机理出现的概率也随之增加,从而导致溅射产额和钉扎系数的下降.图 7—图 9 所示的低能溅射机理和入

射原子被反射的机理与通过基于 Monte Carlo 模拟的 TRIM. SP 程序^[24]和 MARLOWE 程序^[25]给出的物理描述不同.在文献[24,25]给出的物理模型中,入射原子通过与基体表面原子的一系列连续碰撞被反射.事实上, Monte Carlo 模拟是以二体碰撞模型为基础建立的.因此,对于低能溅射和低能原子与基体表面相互作用这类由多体效应主导的物理现象,无法正确地描述其中的原子间相互作用,而分子动力学模拟却能给出更可靠的结果.

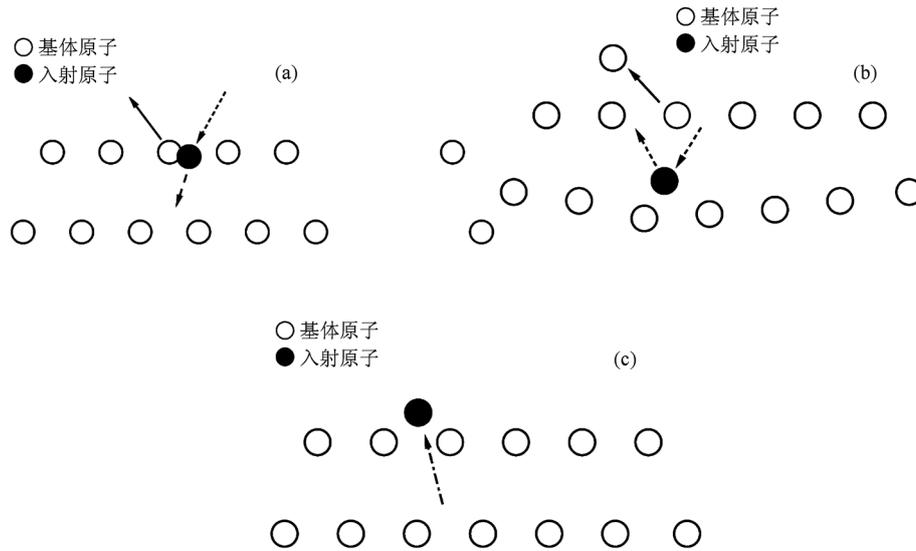


图 8 较大角度($20^\circ \leq \theta \leq 60^\circ$)入射时低能溅射机理示意图 (a)入射原子穿过表面第一层并被表面原子散射,同时将能量传递给表面原子;(b)获得足够能量的表面原子离开基体表面成为被溅射原子,同时入射原子被注入亚表层并使晶格产生形变;(c)入射原子被反射

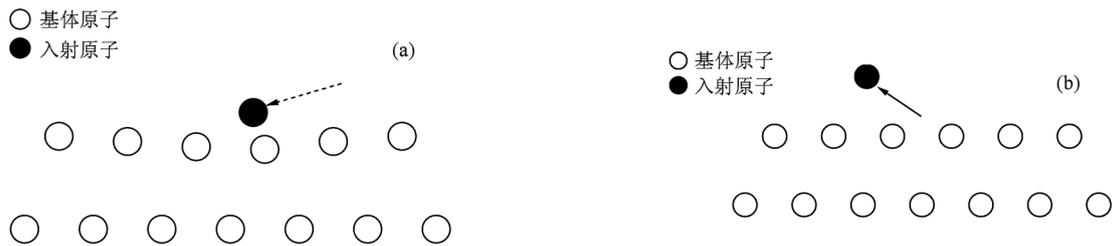


图 9 大角度($\theta \geq 60^\circ$)入射时基体表面对入射原子的作用机理示意图 (a)入射原子到达表面第一层,并使晶格产生形变;(b)入射原子被反射离开基体表面,同时晶格形变恢复

为了进一步证实斜入射时的低能溅射机理,我们对来自表面第一层的溅射原子出现的概率进行了计算,所得结果如图 10 所示.从图 10 可以看出:当 $\theta \geq 30^\circ$ 时,几乎所有溅射原子均来自于表面第一层,这一结果进一步证实入射原子在穿过表面第一层时,将足够的能量传递给表面第一层的原子并使之直接被溅射出去,导致传递给基体表层以下原子的能量较小;

当 $\theta \leq 20^\circ$ 时,并不是所有溅射原子都来自于表面第一层,说明此时入射原子传递给表层以下原子的能量相对较大,因此对基体内部的影响较大.图 11 显示了表面第二层空位产额与表面第一层空位产额之比 r 随入射角度的变化.从图 11 可以看出, $\theta \leq 20^\circ$ 时, r 值均相对较大,同样说明此时入射原子对基体内部的影响较大;当 $\theta \geq 30^\circ$ 后, r 值均降至较低,即入射原

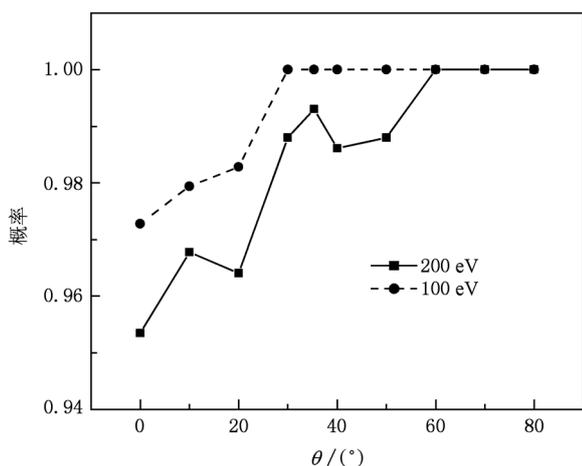


图10 源于表面第一层溅射原子的概率随入射角 θ 的变化

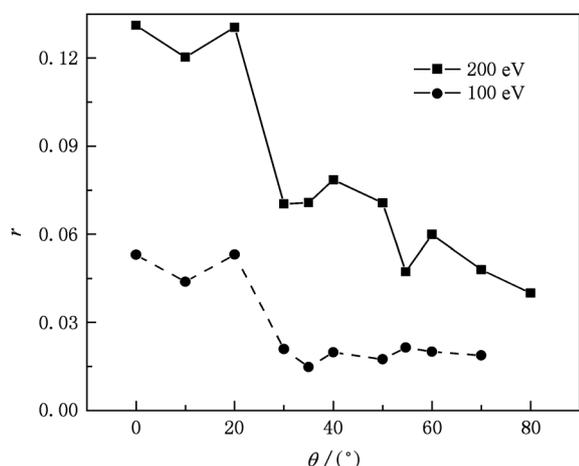


图11 基体表面第二层空位产额与第一层空位产额之比 r 随入射角 θ 的变化

子对基体内部的影响大大降低,其中 $E_{in} = 100 \text{ eV}$, $\theta = 80^{\circ}$ 时,基体表面第一层和第二层空位产额均为零,即此时入射原子对基体表面几乎没有破坏.这一结果进一步证实了图7和图8所给出的不同入射角范围内起主导作用的低能溅射机理以及图9所示大角度入射时入射原子与基体表面的相互作用机理.

4. 结 论

本文采用分子动力学方法结合嵌入原子方法的原子间相互作用势,对不同角度入射的低能Ni原子分别沉积在Pt(111)基体表面时所产生的低能溅射行为进行了计算机模拟研究.结果表明:随着入射角从 0° 增加到 80° ,溅射产额 Y_s 和入射原子钉扎系数 S 的变化均可根据入射角近似地分为以下三个区域:当 $\theta \leq 20^{\circ}$ 时, Y_s 和 S 几乎保持不变,其值与垂直入射时接近,溅射原子的发射角分布和能量分布也与垂直入射时的情况类似;当 $\theta \geq 60^{\circ}$ 时, $Y_s \approx 0, S \approx 0$;在 $20^{\circ} \leq \theta \leq 60^{\circ}$ 的范围内,钉扎系数 S 呈现减小的趋势,溅射产额 Y_s 呈现先增大后减小的趋势,存在一个最大值,溅射原子的发射角分布和能量分布与小角度入射时的情况存在一定的差异.通过对入射原子和被溅射原子运动轨迹的跟踪,分别给出了不同入射角范围内起主导作用的低能溅射机理.得到的分子动力学模拟结果与已报道的实验结果一致,这为进一步的低能溅射实验研究和应用提供了理论依据.

- [1] Sato Y, Yanagisawa K, Oka N, Nakamura S, Shigesato Y 2009 *J. Vac. Sci. Technol. A* **27** 1166
- [2] Dolatshahi-Pirouz A, Hovgaard M B, Rechendorff K, Chevallier J, Foss M, Besenbacher F 2008 *Phys. Rev. B* **77** 115427
- [3] Zhan Q F, Haesendonck C V, Vandezande S, Temst K 2009 *Appl. Phys. Lett.* **94** 042504
- [4] Kai H, Li Y C, Guo D C, Li S, Li Z J 2009 *Acta Phys. Sin.* **58** 4888 (in Chinese) [开花,李运超,郭德成,李双,李之杰 2009 物理学报 **58** 4888]
- [5] Almen O, Bruce G 1961 *Nucl. Instrum. Meth. B* **11** 257
- [6] Sigmund P 1969 *Phys. Rev.* **184** 383
- [7] Shao Q J, Huo Y K, Chen J X, Wu S M, Pan Z Y 1991 *Acta Phys. Sin.* **40** 659 (in Chinese) [邵其璿,霍裕昆,陈建新,吴士明,潘正瑛 1991 物理学报 **40** 659]
- [8] Feil H, Zwol J, Zwart S T, Dieleman J 1991 *Phys. Rev. B* **43** 13695
- [9] Yan C, Lü H F, Zhang C, Zhang Q Y 2006 *Acta Phys. Sin.* **55** 1351 (in Chinese) [颜超,吕海峰,张超,张庆瑜 2006 物理学报 **55** 1351]
- [10] Zhang C, Wang Y L, Yan C, Zhang Q Y 2006 *Acta Phys. Sin.* **55** 2882 (in Chinese) [张超,王永亮,颜超,张庆瑜 2006 物理学报 **55** 2882]
- [11] Zhang C, Lü H F, Zhang Q Y 2002 *Acta Phys. Sin.* **51** 2329 (in Chinese) [张超,吕海峰,张庆瑜 2002 物理学报 **51** 2329]
- [12] Acosta M, Ares O, Sosa V, Acosta C, Peña J L 1999 *J. Vac. Sci. Technol. A* **17** 2879
- [13] Hanson D E, Stephens B C, Saravanan C, Kress J D 2001 *J.*

- Vac. Sci. Technol. A* **19** 820
- [14] Abrams C F, Graves D B 1999 *J. Appl. Phys.* **86** 2263
- [15] Sekowski M, Burenkov A, Hernández-Mangas J, Martínez-Limia A, Ryssel H 2008 *AIP Conf. Proc.* **1066** 236
- [16] Kenmotsu T, Wada M, Hyakutake T, Muramoto T, Nishida M 2010 *Rev. Sci. Instrum.* **81** 02B109
- [17] Daw M S, Baskes M I 1984 *Phys. Rev. B* **29** 6443
- [18] Foiles S M, Baskes M I, Daw M S 1986 *Phys. Rev. B* **33** 7983
- [19] Swope W C, Andersen H C, Berens P H, Wilson K R 1982 *J. Chem. Phys.* **76** 637
- [20] Oechsner H 1973 *J. Phys.* **261** 37
- [21] Whetten T J, Armstead A A, Grzybowski T A, Ruo A L 1984 *J. Vac. Sci. Technol. A* **2** 477
- [22] Oyarzabal E, Yu J H, Doerner R P, Tynan G R 2006 *J. Appl. Phys.* **100** 063301
- [23] Oechsner H 1970 *Phys. Rev. Lett.* **24** 583
- [24] Eckstein W, Roth J, Nagel W, Dohmen R 2004 *J. Nucl. Mater.* **328** 55
- [25] Behrisch R, Maderlechner G, Scherzer B M U, Robinson M T 1979 *Appl. Phys. A* **18** 391

Molecular dynamics simulation of low-energy sputtering of Pt (111) surface by oblique Ni atom bombardment *

Yan Chao[†] Duan Jun-Hong He Xing-Dao

(Key Laboratory of Nondestructive Testing of Ministry of Education, School of Measuring and Optical Engineering, Nanchang Hangkong University, Nanchang 330063, China)

(Received 30 August 2010; revised manuscript received 26 October 2010)

Abstract

The low-energy sputtering on Pt (111) surface by Ni atom at incident angle in a range of 0° — 80° (with respect to the direction normal to the surface) is studied by molecular dynamics simulations. The atomic interaction potential obtained with embedded atom method is used in the simulation. The dependence of sputtering yield, energy and angular distribution of sputtered particles as well as sticking probability of Ni atom on incident angle are discussed. The dependence of sputtering yield on incident angle θ can be divided into three different regions in θ , i. e., $\theta \leq 20^\circ$, $20^\circ \leq \theta \leq 60^\circ$, and $\theta \geq 60^\circ$. Based on sticking probability and movement of incident atom, physical mechanism of low-energy sputtering at oblique particle bombardment is suggested. When the incident angle θ is smaller than 20° , the reflection of incident atom by target atom dominates the sputtering process of surface atom, which is similar to the sputtering mechanism for the case of $\theta = 0^\circ$. While for $20^\circ \leq \theta \leq 60^\circ$, the reflection of incident atom is no longer important for the low-energy sputtering. For the case of $\theta \geq 60^\circ$, there occurs no sputtering.

Keywords: molecular dynamics simulation, incident angle, low-energy sputtering

PACS: 83.10.Rs, 79.20.Rf, 68.49.Sf

* Project supported by the Scientific Research Foundation for Outstanding Scholars of Nanchang Hangkong University, China (Grant No. EA200908182), the Aeronautical Science Foundation of China (Grant No. 2009ZE56009) and the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 50962011).

[†] E-mail: enjoyyan80@yahoo.com.cn