

Научная статья

УДК 538.913

DOI: 10.18384/2949-5067-2025-2-27-46

МОДЕЛИРОВАНИЕ АТОМНОГО БЛОКА (001) Ni ДЛЯ ЗАДАЧ ИОННОГО РАСПЫЛЕНИЯ: РЕЛАКСАЦИЯ И ОСНОВНЫЕ ПАРАМЕТРЫ

Мусин А. И.

Московский государственный технологический университет «СТАНКИН», г. Москва, Российская Федерация

*Вятский государственный университет, г. Киров, Российская Федерация
e-mail: ai.musin@physics.msu.ru*

Поступила в редакцию 19.05.2025

Принята к публикации 23.05.2025

Аннотация

Цель: создать молекулярно-динамическую модель атомного блока (001) Ni, которую можно использовать при исследовании распыления.

Процедура и методы. Используется метод молекулярной динамики, метод Бокса-Мюллера для генерации случайных величин из нормального распределения, метод погруженного атома, метод сопряжённых градиентов Флетчера-Ривса, метод аппроксимации параболой и метод золотого сечения для поиска минимума функции, метод Верле для скоростей.

Результаты. Создана программа для молекулярно-динамического моделирования с предварительной релаксацией атомного блока. Для блоков разных размеров рассчитаны постоянная решётки и поверхностная энергия связи. Показана корректность модели.

Теоретическая и практическая значимость. Результаты могут быть использованы другими исследователями при разработке похожих моделей. Кроме того, созданная в работе модель будет нами использоваться на практике в будущих работах для исследования эмиссии атомов при распылении с грани (001) Ni.

Ключевые слова: молекулярная динамика, релаксация системы, метод сопряжённых градиентов, многочастичный потенциал, постоянная решётки, поверхностная энергия связи

Благодарности и источники финансирования. Работа выполнена с использованием оборудования Центра коллективного пользования сверхвысокопроизводительными вычислительными ресурсами МГУ имени М. В. Ломоносова. Автор выражает благодарность доценту В. Н. Самойлову за полезные советы и обсуждение.

Для цитирования.

Мусин А. И. Моделирование атомного блока (001) Ni для задач ионного распыления: релаксация и основные параметры // Вестник Государственного университета просвещения. Серия: Физика-математика. 2025. № 2. С.27–46. <https://doi.org/10.18384/2949-5067-2025-2-27-46>

Original research article

SIMULATION OF ATOMIC BLOCK (001) Ni FOR ION SPUTTERING PROBLEMS: RELAXATION AND MAIN PARAMETERS

A. Musin

Moscow State University of Technology "STANKIN", Moscow, Russian Federation

Vyatka State University, Kirov, Russian Federation

e-mail: ai.musin@physics.msu.ru

Received by the editorial office 19.05.2025

Accepted for publication 23.05.2025

Abstract

Aim is to create a molecular dynamics model of the (001) Ni atomic block that can be used to study sputtering.

Methodology. The molecular dynamics method, the Box-Muller method to generate random numbers from normal distribution, the embedded atom method, the Fletcher-Reeves conjugate gradient method, the parabola approximation and the golden section methods to find the minimum of a function, and the Velocity Verlet method are used.

Results. A program for molecular dynamics modeling with preliminary relaxation of the atomic block has been created. The lattice constant and surface binding energy were calculated for blocks of different sizes. The correctness of the model has been shown.

Research implications. The results can be used by other researchers in developing similar models. In addition, the model created in the work will be used in practice in our future works to study the ejection of atoms during sputtering from the (001) Ni face.

Keywords: molecular dynamics, system relaxation, conjugate gradient method, many-body potential, lattice constant, surface binding energy

Acknowledgements. The research is carried out using the equipment of the shared research facilities of HPC computing resources at Lomonosov Moscow State University. The author is grateful to Associate Professor V. N. Samoilov for useful advices and discussion.

For citation.

Musin, A. I. (2025). Simulation of atomic block (001) Ni for ion sputtering problems: relaxation and main parameters. In: *Bulletin of Federal State University of Education. Series: Physics and Mathematics*, 2, pp.27–46. <https://doi.org/10.18384/2949-5067-2025-2-27-46>

Введение

Сразу в нескольких разделах физики, таких как физика конденсированного состояния, физическая электроника, математическая физика и других, уделяется внимание теме взаимодействия ускоренного пучка ионов с поверхностью твёрдого тела. В процессе такого взаимодействия часть частиц бомбардируемой мишени покидает поверхность в виде нейтральных атомов (*ионное распыление*) или вторичных ионов (*вторичная ионная эмиссия*). Эти явления представляют большой интерес для методов элементного и структурного анализа поверхности (например, метода вторичной ионной масс-спектрометрии [1]), для

модификации поверхности [2] и травления [3], напыления тонких плёнок [4] и даже астрофизических исследований [5].

Математическое моделирование играет важную роль для изучения ионного распыления, ведь развитие аналитического подхода сталкивается с трудностью решения задачи многих тел. В некоторых статьях и программных пакетах (например, TrimSP) используется *приближение парных столкновений* (англ. BCA – Binary Collision Approximation). Тем не менее более корректно описывать систему с множеством атомных взаимодействий *методом молекулярной динамики* (МД).

Особый интерес вызывают работы, в которых не просто рассчитываются те или иные параметры, например, коэффициент распыления, а делается попытка выявить физические механизмы формирования особенностей распределения распылённых атомов по углам и энергии. Так, в работах [6; 7] рассматривалось действие *поверхностных механизмов* на финальной стадии распыления монокристалла, то есть *эмиссии с поверхности*.

Общая идея такова, что весь монокристалл заменяется на несколько атомов верхнего слоя, для грани (001) минимальный фрагмент поверхности – это эмитируемый атом и 4 атома ближайшего окружения. После этого эмитируемому атому задаются различные начальные энергии E_0 и начальные направления вылета, характеризующиеся полярным углом ϑ_0 и азимутальным углом φ_0 в соответствии с начальной функцией распределения $F_0(E_0, \cos \vartheta_0)$, в классической теории распыления П. Зигмунда $F_0 \sim \cos \vartheta_0 / E_0^2$ [8; 9]. Далее выполняется численное интегрирование уравнений движения с парным потенциалом Борна-Майера $U(r) = A \cdot \exp(-r/b)$, а затем учитывается поверхностная энергия связи E_b при прохождении плоского потенциального барьера.

Несмотря на то, что такая модель очень проста, она воспроизводит экспериментальные особенности распределений распылённых атомов, такие как *пятна Венеры* (максимумы в угловом распределении распылённых атомов), немонотонный сдвиг максимума полярного углового распределения распылённых атомов с увеличением энергии наблюдения и некоторые другие. В [6; 7] и других работах показывается, что вклад надповерхностного рассеяния атома при эмиссии с поверхности монокристалла является определяющим для формирования особенностей распределений распылённых атомов.

Тем не менее для полноценного анализа поверхностных механизмов желательно сравнение результатов, полученных в рамках упрощённой модели, с результатами молекулярно-динамического моделирования, приближенными к реальному эксперименту. Отчасти это было сделано в недавних работах [10; 11], в которых использовалась МД-модель Г. В. Корнича и Г. Бетца [12] с падением ионов Ag (энергия 200 эВ) на поверхность атомного блока (001) Ni. В рамках этой модели взаимодействие Ni-Ni описывается не парными потенциалами, а многочастичным потенциалом Аккланда [13] в рамках *метода погруженного атома* (англ. EAM – Embedding Atom Method).

В настоящей работе было решено создать собственную МД-модель для проверки и сравнительного анализа эффектов, найденных в предыдущих работах, в том числе [6; 7; 10; 11]. В статье мы опишем первую часть – релаксацию и моделирование динамики самого атомного блока (001) Ni, обоснуем применяемые подходы и представим полученные результаты.

Модель расчёта

Инструментарий. Для моделирования атомного блока (001) Ni была создана программа на языке Fortran, который считается оптимальным для научных вычислений. Код был создан автором самостоятельно. В процессе разработки использовалась большая языковая модель (LLM) DeepSeek-V3 для написания отдельных частей кода в качестве «черновых заготовок» и частично – для поиска и исправления ошибок (в режиме DeepThink).

Для расчётов использовались ресурсы как локального компьютера, так и суперкомпьютера «Ломоносов-2» Московского государственного университета [14]. Траектории атомов записывались в файл формата XYZ и визуализировались в программе VMD [15].

Инициализация атомной системы. Кристаллический никель имеет ГЦК-решётку, которая состоит из элементарных ячеек в форме куба, атомы располагаются в вершинах куба и в центрах граней. Из этого следует, что на одну ячейку приходится 8 атомов с весом $1/8$ и 6 атомов с весом $1/2$, то есть всего 4 атома. Поэтому возьмём внутри куба со стороной 1 атомы с координатами $(0, 0, 0)$, $(0.5, 0.5, 0)$, $(0.5, 0, 0.5)$ и $(0, 0.5, 0.5)$ и транслируем по трём осям в количестве N_x, N_y, N_z с последующим умножением координат на размерную постоянную a (константа решётки). Тогда полное количество атомов в блоке $N = 4N_xN_yN_z$. Начальное значение постоянной решётки бралось равным 3.5 \AA .

Ось Oz направляется от поверхности (которой соответствует плоскость вблизи $z = 0$) вглубь кристаллического блока, и если какой-то атом будет вылетать с поверхности, он будет двигаться в сторону, противоположную оси Oz . Атомы, находящиеся в элементарных ячейках вблизи плоскости $z = N_z a$ («дно»), получают статус «фиксированных». Фиксация нижних атомных слоёв позволяет компенсировать отсутствие более глубоких слоёв кристалла, предотвращая нефизичные смещения всей системы и артефакты, связанные со свободной поверхностью (неконтролируемое расширение или сжатие).

По бокам (оси Ox, Oy) применялись периодические граничные условия, которые на языке Fortran очень просто реализуются с помощью функции *modulo*. Так, после сдвига атома и расчёта его новых координат x и y , которые могут выйти за пределы моделируемого блока, то есть интервалы $0 < x < N_x a, 0 < y < N_y a$, выполняются операторы присваивания

$$x = \text{modulo}(x, N_x a),$$

$$y = \text{modulo}(y, N_y a),$$

«перебрасывающие» атом с одной грани блока на другую.

Начальные проекции скоростей атомов (исключая фиксированные) на координатные оси выбирались исходя из заданной температуры T , их распределение считалось максвелловским, т. е. нормальным с нулевым средним и дисперсией

$$\sigma^2 = k_B T / m.$$

Генерация таких случайных величин осуществлялась с помощью метода Бокса-Мюллера, в рамках которого генерируются псевдослучайные числа r и φ из равномерного распределения $\sim U(0; 1)$, а потом вычисляется число $u \sim N(0; 1)$:

$$u = \cos(2\pi\varphi) \sqrt{-2 \ln r}.$$

Для получения проекции скорости число u нужно домножить на σ . При таком подходе скорость центра масс – также случайная величина, поэтому после генерации скоростей их нужно скорректировать на эту величину, для предотвращения дрейфа системы.

Все атомы системы рассортировываются по кубическим ячейкам размера $(r_{\text{cut}} + r_{\text{skin}})$, где $r_{\text{cut}} = 6 \text{ \AA}$ – радиус обрезания потенциала, $r_{\text{skin}} = 1 \text{ \AA}$ – размер буферной зоны. Номера атомов, попавших в одну ячейку, располагаются в связанном списке. При смещении атома более чем на r_{skin} списки обновляются. Это позволяет оптимизировать расчёты и снизить сложность вычислений.

В программе используется следующая система единиц измерения: ангстрем (\AA) для измерения расстояний, электронвольт (эВ) для энергий и атомные единицы (а.е.м.) для масс атомов. В такой системе единичное время составляет 7.2 фс.

Потенциал взаимодействия. Для современных молекулярно-динамических расчётов металлов обычно используются многочастичные потенциалы. Особенно популярен метод погруженного атома (EAM), упомянутый выше. В рамках этого метода считается, что потенциальная энергия атома i равна

$$U_i = F(\rho_i) + \sum_{j \neq i} \phi(r_{ij}),$$

где F – функция погружения, ϕ – парный потенциал взаимодействия, r_{ij} – расстояние между атомами i и j , а электронная плотность рассчитывается по формуле

$$\rho_i = \sum_{j \neq i} f(r_{ij}).$$

Первое слагаемое в потенциальной энергии как раз отвечает за многочастичное взаимодействие, вклад которого в металлах довольно ощутим.

Разными авторами предлагаются различные выражения для функций F , f и ϕ . В потенциале Аккланда, который использовался нами ранее в готовой модели [10; 11], функция погружения $F(\rho) = -\rho^{1/2}$, а f и ϕ задаются кубическими сплайнами. В настоящей работе мы решили выбрать более современный потенциал Чжоу-Джонсона-Уодли [16], в котором

$$\phi(r) = \frac{A \exp[-\alpha(r/r_e - 1)]}{1 + (r/r_e - \kappa)^{20}} - \frac{B \exp[-\beta(r/r_e - 1)]}{1 + (r/r_e - \lambda)^{20}},$$

$$f(r) = \frac{f_e \exp[-\beta(r/r_e - 1)]}{1 + (r/r_e - \lambda)^{20}},$$

$$F(\rho) = \begin{cases} \sum_{i=0}^3 F_{ni} \left(\frac{\rho}{\rho_n} - 1\right)^i, & \rho < \rho_n = 0.85\rho_e \\ \sum_{i=0}^3 F_i \left(\frac{\rho}{\rho_n} - 1\right)^i, & \rho_n \leq \rho < \rho_0 \\ F_e \left[1 - \ln\left(\frac{\rho}{\rho_s}\right)\right] \left(\frac{\rho}{\rho_s}\right)^\eta, & \rho \geq \rho_0 \end{cases}.$$

Продифференцируем потенциальную энергию и получим выражение для силы, действующей на атом i со стороны атома j :

$$\mathbf{F}_{ij} = -\{[F'(\rho_i) + F'(\rho_j)]f'(r_{ij}) + \phi'(r_{ij})\} \frac{\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j}{r_{ij}}$$

При $r > r_{\text{cut}}$ значение парного потенциала $\phi(r)$ очень мало, однако для корректности интегрирования и отсутствия артефактов необходимо сделать плавное обрезание. В нашем случае потенциал $\phi(r)$ просто домножался на сглаживающую функцию

$$S(r) = \begin{cases} 1, & r < r_{\text{cut}0} \\ \frac{1}{2} \left[1 + \cos \frac{\pi(r - r_{\text{cut}0})}{r_{\text{cut}} - r_{\text{cut}0}} \right], & r_{\text{cut}0} \leq r < r_{\text{cut}} \\ 0, & r \geq r_{\text{cut}} \end{cases}$$

Радиус начала обрезания выбирался равным $r_{\text{cut}0} = 5.5 \text{ \AA}$. Такой подход позволяет сохранить непрерывность потенциала и его производной.

Известно, что для описания рассеяния атомов друг на друге ЕАМ потенциалы не подходят – они создавались для моделирования объёмных свойств металлов путём калибровки под равновесные параметры (энергии связи, параметры решётки, упругие константы и так далее). Сильные сближения атомов ($r < 1 \text{ \AA}$) очень далеки от равновесных состояний, при таких расстояниях электронные облака перекрываются, и энергия парного взаимодействия описывается некорректно.

Для решения проблемы на малых расстояниях, как и в [10; 11], мы воспользовались универсальным потенциалом Зиглера-Бирсака-Литтмарка (ZBL) [17]:

$$\phi_{\text{ZBL}}(r) = \alpha_e \hbar c \frac{Z^2}{r} \chi\left(\frac{r}{a_s}\right),$$

где $\alpha_e = 1/137$ – постоянная тонкой структуры, $\hbar c = 1973.27 \text{ эВ}\cdot\text{\AA}$, функция и радиус экранирования задаются выражениями

$$\chi(z) = 0.1818e^{-3.2000z} + 0.5099e^{-0.9423z} + 0.2802e^{-0.4029z} + 0.02817e^{-0.2016z},$$

$$a_s = \frac{0.88534a_B}{2Z^{0.23}},$$

a_B – первый борковский радиус. Для сшивки потенциала ZBL и парной части ЕАМ на участке от $r_{sp1} = 0.5 \text{ \AA}$ до $r_{sp2} = 1.5 \text{ \AA}$ мы использовали экспоненциально-кубический сплайн

$$\phi_{sp}(r) = \exp \left[B_0 + B_1(r - r_{sp1}) + B_2(r - r_{sp1})^2 + B_3(r - r_{sp1})^3 \right],$$

который эквивалентен сплайну из [10], но более удобен из практических соображений – легче решаются уравнения на коэффициенты B , которые получаются из условий непрерывности потенциала и его производной.

Релаксация блока. Для получения стабильных и физически осмысленных результатов заданный блок нужно отрелаксировать, чтобы убрать артефакты начальной конфигурации, иначе в решётке могут возникнуть скачки энергии и неустойчивые состояния с напряжениями.

Для минимизации потенциальной энергии $U(q)$ как функции вектора координат всех подвижных атомов q , размерность которого равна числу степеней свободы s , применялся очень распространённый метод сопряжённых градиентов Флетчера-Ривса [18], в котором циклически выполняются следующие шаги.

1. *Первоначальное направление спуска* (шаг $n = 0$). В качестве такового берётся антиградиент $g_0 = -\nabla U(q_0)$, или, что то же самое, s -мерный вектор сил, где q_0 задаёт начальную конфигурацию.
2. *Линейный поиск.* Решается задача линейного поиска для вычисления шага α_n в выбранном направлении, то есть ищется минимум функции $U(q_n + \alpha_n g_n)$ по α_n , где q_n – конфигурация атомов на n -ом шаге, g_n – направление спуска на n -ом шаге.
3. *Шаг спуска.* Вычисляется новая конфигурация: $q_{n+1} = q_n + \alpha_n g_n$.
4. *Новое направление спуска:* $g_{n+1} = -\nabla U(q_{n+1}) + \beta_n g_n$, где коэффициент вычисляется по формуле $\beta_n = \|\nabla U(q_{n+1})\|^2 / \|\nabla U(q_n)\|^2$, $\|\cdot\|$ обозначает евклидову норму s -мерного вектора. Затем возвращаемся к п. 2 до тех пор, пока не будет достигнута требуемая точность.

При реализации «дно» блока из фиксированных атомов остаётся на месте, что приводит к неустойчивости найденного равновесия. Эта неустойчивость связана с неточным заданием постоянной решётки a как масштабного параметра системы. Значение a зависит от типа потенциала, размеров блока и от расстояния до поверхности. Поэтому дополнительно необходимо провести оптимизацию по отношению к сжатию-растяжению всей системы в целом, то есть искать минимум функции $U(aq^*)$ по параметру решётки a , где q^* – безразмерные координаты всех атомов (в единицах a), с учётом закреплённых.

Результаты и обсуждение

Поиск энергетического равновесия. Мы запускали релаксацию для 11 атомных блоков различных размеров. Оказалось, что метод Флетчера-Ривса для поиска минимума энергии очень эффективен: количество шагов для достижения

минимума с заданной точностью обычно не превышает 50. Сравнение с методом обычного градиентного спуска (в котором, фактически, $\beta_n \equiv 0$) показало, что там, где метод Флетчера-Ривса достигал минимума с точностью до 10^{-5} эВ/Å (то есть максимальная из всех сил, действующих на атомы, $< 10^{-5}$ эВ/Å) менее чем за 50 шагов, метод градиентного спуска не достигает минимума с такой же точностью и за 200 шагов, при этом максимальная сила в системе через 50–60 шагов составляет $\sim 10^{-3}$ эВ/Å.

Быстроту поиска минимума потенциальной энергии удалось получить не только за счёт выбора удачного метода спуска, но и за счёт комбинированного метода решения задачи линейного поиска из п. 2. Для поиска минимума α_n вдоль направления спуска g_n существует множество алгоритмов, из которых были выбраны два: 1) *метод аппроксимации параболой*; 2) *метод золотого сечения*.

В первом методе исследуемая функция потенциальной энергии как аргумента α приближается квадратичной, и в качестве минимума выбирается вершина параболы. Этот метод обладает хорошей сходимостью, однако является неустойчивым, поскольку очередное приближение точки минимума может выпасть из исследуемого отрезка. Во втором методе отрезок делится двумя точками в пропорциях золотого сечения и выбирается та точка, в которой энергия системы меньше. Этот метод сходится медленнее, но зато является более надёжным.

В нашем случае для поиска минимума функции вдоль направления использовался комбинированный метод: исследуемый отрезок $[\alpha_1; \alpha_4]$ разбивался на три части двумя точками:

$$\begin{aligned}\alpha_2 &= \alpha_4 - (\alpha_4 - \alpha_1)\Phi, \\ \alpha_3 &= \alpha_1 + (\alpha_4 - \alpha_1)\Phi,\end{aligned}$$

где $\Phi = (\sqrt{5} - 1) / 2$ – золотое сечение (рис. 1). Потенциальная энергия системы U вычислялась для значений шага α_2 , α_3 и α_4 , далее по этим трём опорным точкам (показаны белыми кружками на рис. 1) U как функция α приближалась квадратным трёхчленом $A\alpha^2 + B\alpha + C$. Если ветви параболы направлены вверх ($A > 0$) и точка минимума $\alpha_{\text{par}} = -B/(2A)$ лежит на отрезке $[\alpha_1; \alpha_4]$ (рис. 1а), то первым приближением искомого α берётся α_{par} , а отрезок сужается до отрезка $[\alpha_1; \alpha_2]$, $[\alpha_2; \alpha_3]$ или $[\alpha_3; \alpha_4]$ в зависимости от того, на какой из них попала точка α_{par} .

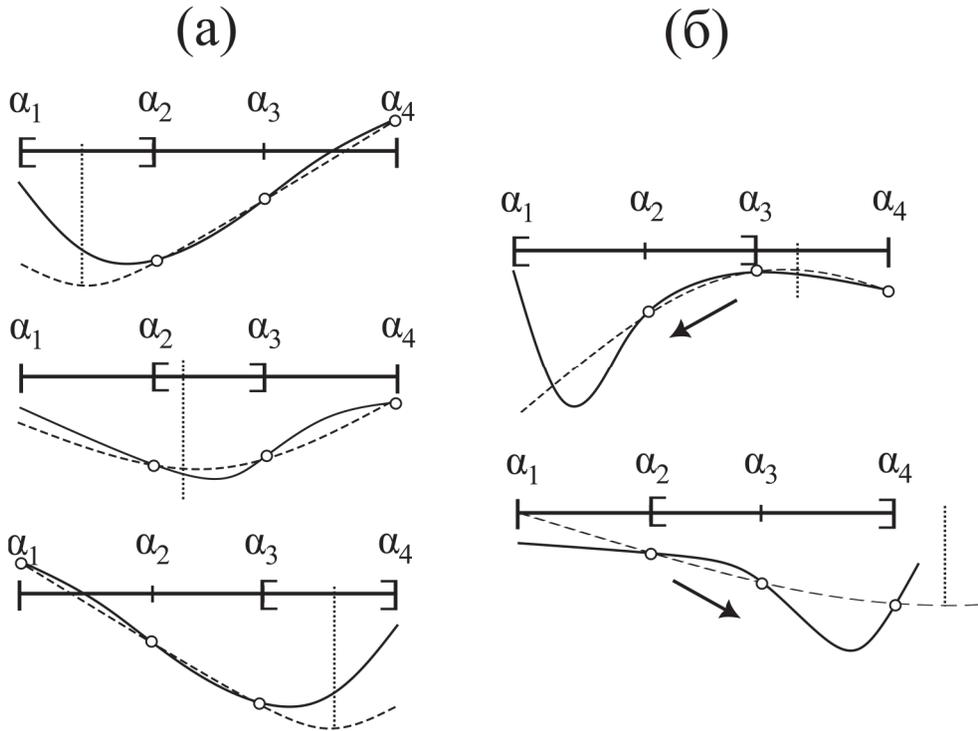


Рис. 1 / Fig. 1. Поиск минимума функции (сплошная линия) на отрезке $[\alpha_1; \alpha_4]$, поделённом точками α_2 и α_3 в золотом сечении, в случае, если аппроксимация параболой (пунктир) корректна (а) либо некорректна (б) / Minimum search for a function (solid line) on the segment $[\alpha_1; \alpha_4]$ divided by points α_2 and α_3 in the golden section, in the case when the approximation by a parabola (dotted line) is correct (a) or incorrect (б)

Источник: подготовлено автором.

В иных случаях, когда метод аппроксимации параболой даёт некорректный результат ($A \leq 0$ – максимум вместо минимума; $\alpha_{\text{par}} < \alpha_1$ или $\alpha_{\text{par}} > \alpha_4$ – выпадение точки минимума за пределы отрезка из-за неудачного расположения опорных точек), то сравниваются значения энергии U в точках α_2 и α_3 , из них выбирается наименьшее. Затем, в зависимости от выбора, исходный отрезок сужается до $[\alpha_1; \alpha_3]$ или $[\alpha_2; \alpha_4]$ (рис. 1б).

После сужения отрезка процедура повторяется до тех пор, пока длина отрезка не станет меньше заданной точности.

После нахождения минимума потенциальной энергии системы проводилась оптимизация постоянной решётки a . Для этого система в целом (все атомы, включая фиксированные) масштабировалась (растягивалась – сжималась) в соответствии с тем или иным коэффициентом a , фактически опять решается задача поиска минимума функции по конкретной переменной. Поэтому для поиска использовался тот же самый комбинированный метод (рис. 1), как и в задаче линейного поиска в методе сопряжённых градиентов (п. 2).

После подстройки постоянной решётки a алгоритм релаксации подвижных атомов по методу Флетчера-Ривса нужно запускать заново, поскольку энергетическое равновесие при изменении размеров блока как целого теряется. После релаксации – опять подстройка a и так далее, до момента, пока максимальная сила в системе не будет ниже установленного порога. Только в этом случае будет найдена конфигурация атомов, близкая к равновесному состоянию, тогда при записи конфигурации в файл и последующем чтении ошибки округления, которые для арифметики вещественных чисел с плавающей точкой двойной точности (8 бит) составляют ~ 16 знаков, не приведут к потере равновесия и необходимости повторной релаксации блока.

Для более эффективной работы алгоритма сначала мы ищем энергетический минимум грубо (силы равны нулю с точностью 10^{-3} эВ/Å), а после попадания в ближайшую окрестность минимума – точно (10^{-5} эВ/Å соответственно). При этом точность нахождения минимума в задаче линейного поиска при грубом и точном подходе также различались (табл. 1). После окончания процедуры точного поиска координаты атомов блока записывались в файл и вновь отдавались в программу релаксации, которая всё-таки запускалась снова, но уже достигала минимума за 1–5 шагов.

Таблица 1 / Table 1

Параметры грубой и точной релаксации атомного блока по методу сопряжённых градиентов / Parameters of coarse and fine relaxation of an atomic block using the conjugate gradient method

	Максимальная сила, эВ/Å	Максимальное число шагов	Точность поиска минимума (в ед. a)
Грубо	10^{-3}	100	10^{-6}
Точно	10^{-5}	50	10^{-10}

Параметры релаксированного блока. После завершения релаксации мы получаем значение постоянной решётки a как масштабного параметра, доставляющего минимум потенциальной энергии системы, условно назовём её *объёмной*. Однако для изучения эмиссии атомов с поверхности необходимо знать также постоянную решётки *на поверхности*, которая больше объёмной постоянной решётки. Отличие связано с тем, что у поверхностных атомов уменьшается координационное число, это приводит к перестройке верхних слоёв, которая компенсирует асимметрию межатомных взаимодействий на границе кристалл-вакуум.

Для верхнего слоя постоянной решётки вычислялась двумя способами: по первой координационной сфере (a_1) и по второй координационной сфере (a_2). Для этого вычислялись парные расстояния r_{ij} для каждой пары атомов i и j верхнего слоя, далее среди них выделялись значения, которые отличаются от радиуса координационной сферы в объёме $R_1 = a/\sqrt{2}$ или $R_2 = a$ менее, чем на 10%. Усреднение парных расстояний в каждой группе позволяет найти радиусы

координационных сфер на поверхности и постоянную решётки. Результаты вычислений для блоков разного размера представлены в табл. 2.

Таблица 2 / Table 2

Параметры, рассчитанные для атомных блоков различного размера / Parameters calculated for atomic blocks of different sizes

Размер блока $N_x \times N_y \times N_z$	Постоянная решётки, Å			Энергия связи, эВ		
	a	a_1	a_2	E_b	E_b^*	$ U_s $
7×7×7	3.5072	3.5231	3.5187	5.223	5.260	4.987
9×9×7						
11×11×7						
7×7×9	3.5094	3.5237	3.5192	5.225	5.261	4.987
9×9×9						
11×11×9						
7×7×11	3.5110	3.5241	3.5195	5.226	5.262	4.987
9×9×11						
11×11×11						

Как видно из табл. 2, значения постоянной решётки, рассчитанные по первой (a_1) и второй (a_2) координационным сферам, устойчиво превышают объёмное значение a для всех исследованных размеров блоков. Наблюдаемое небольшое различие между a_1 и a_2 указывает на анизотропный характер релаксации, при котором атомы испытывают не только вертикальные, но и латеральные смещения, по-разному влияющие на межатомные расстояния внутри поверхностного слоя и между слоями.

Кроме этого, для каждого блока вычислялась *поверхностная энергия связи* E_b , которая также очень важна для изучения финальной стадии распыления – эмиссии с поверхности. Для вычислений выбирался атом на поверхности блока, равноудалённый от боковых границ. Энергия связи, по определению, равна

$$E_b = U_{N-1} + U_1 - U_N,$$

где U_N – потенциальная энергия блока из N атомов, U_{N-1} – потенциальная энергия блока с одним удалённым атомом, U_1 – потенциальная энергия изолированного атома, которая равна нулю.

Энергию оставшегося блока можно вычислять с учётом или без учёта релаксации, будут получаться различные значения, которые мы обозначим U_{N-1} и U_{N-1}^* соответственно. Это приведёт к двум различным значениям энергии связи: E_b и E_b^* (табл. 2). Полученные значения согласуются со значением 5.55 эВ для грани (001) Ni в работе [19], где энергия связи вычислялась с использованием парного потенциала Морзе.

Ещё одну оценку энергии связи можно получить, если вычислить потенциальную энергию атома на поверхности U_s (табл. 2). Необходимо

отметить, что $|U_s|$ меньше E_b^* , это связано с тем, что при использовании ЕАМ потенциальная энергия системы не равна простой сумме энергий взаимодействия, и удаление атома с поверхности приводит к пересчёту электронных плотностей.

Для проверки корректности также вычислялась z -координата свободной поверхности блока как средняя координата \bar{z} атомов верхнего слоя и среднеквадратичное отклонение σ_z . За счёт различия постоянной решётки в объёме и на поверхности при релаксации верхний слой смещается так, что $\bar{z} \sim -0.1 \text{ \AA}$, $\sigma_z \approx 0$ с точностью более чем 10^{-6} \AA (то есть вздутие поверхности отсутствует).

Интегрирование уравнений движения. После релаксации системы запускается алгоритм интегрирования уравнений движения по методу молекулярной динамики. В предыдущих работах [10; 11] нами использовался метод средней силы [20], в котором по текущим значениям координат и скоростей сначала предсказываются координаты и скорости следующего положения:

$$\hat{x} = x(t) + v(t)\Delta t + \frac{F(x(t), v(t), t)}{2m} \Delta t^2,$$

$$\hat{v} = v(t) + \frac{F(x(t), v(t), t)}{m} \Delta t,$$

а затем они пересчитываются заново:

$$x(t + \Delta t) = x(t) + v(t)\Delta t + \frac{\langle F \rangle}{2m} \Delta t^2,$$

$$v(t + \Delta t) = v(t) + \frac{\langle F \rangle}{m} \Delta t,$$

с использованием значения силы, усреднённого по текущему и предсказанному положению:

$$\langle F \rangle = (F(x(t), v(t), t) + F(\hat{x}, \hat{v}, t + \Delta t))/2.$$

Порядок точности метода – второй.

При моделировании больших атомных систем важным вопросом является *симплектичность* численной схемы, то есть условие сохранения элемента объёма фазового пространства вдоль траектории. Неизбежная погрешность начальных условий приводит к тому, что точка фазового пространства превращается в малый фазовый объём. В симплектических методах этот объём сохраняется.

Анализ показал (см. Приложение 1), что в методе средней силы объём фазового пространства не сохраняется точно. В нашем случае, когда диссипация отсутствует и силы зависят явно только от координат, было получено, что фазовый объём сохраняется вплоть до порядка $O(\Delta t^3)$. Поэтому было решено использовать метод Верле для скоростей второго порядка, с одним шагом по координатам и двумя полушагами для скоростей:

$$v(t + \Delta t/2) = v(t) + \frac{F(x(t))}{m} \Delta t/2,$$

$$x(t + \Delta t) = x(t) + v(t + \Delta t/2)\Delta t,$$

$$v(t + \Delta t) = v(t + \Delta t/2) + \frac{F(x(t + \Delta t))}{m} \Delta t/2.$$

В методе Верле фазовый объём сохраняется точно, поскольку якобиан преобразования тождественно равен 1.

В программе производилась проверка сохранения полной энергии системы и трёх проекций импульса системы. Расчёты показывают, что энергия сохраняется с точностью не хуже 10^{-7} эВ, проекции импульса – не хуже 10^{-8} эВ^{1/2} · а.е.м.^{1/2}.

При расчёте импульса системы необходимо было учесть, что на фиксированные атомы также действуют силы F_f , которые не приводят к изменению их скоростей, но осуществляют передачу импульса воображаемой подложке. Поэтому импульсы p_f фиксированных атомов будем интегрировать отдельно:

$$\begin{aligned} p_f(t + \Delta t/2) &= p_f(t) + F_f(x(t))\Delta t/2, \\ p_f(t + \Delta t) &= p_f(t + \Delta t/2) + F_f(x(t + \Delta t))\Delta t/2. \end{aligned}$$

Заключение

В настоящей работе описывалась молекулярно-динамическая модель атомного блока (001) Ni для задач ионного распыления. Была написана программа на языке Fortran, которая генерирует блок необходимых размеров, релаксирует его и просчитывает динамику по методу Верле для скоростей.

Расчёт сил в программе был реализован с помощью многочастичного ЕАМ-потенциала Чжоу-Джонсона-Уодли. На малых расстояниях парная часть потенциала сшивалась с потенциалом Зиглера-Бирсака-Литтмарка (ZBL) с помощью экспоненциально-кубического сплайна.

Для нескольких блоков различных размеров была проведена процедура релаксации. Минимум потенциальной энергии системы находился по методу сопряжённых градиентов Флетчера-Ривса (который показал свою высокую эффективность) в сочетании с оптимизацией по постоянной решётки a как масштабному параметру системы. Для задачи однопараметрической оптимизации был разработан метод, сочетающий в себе быстроту сходимости метода аппроксимации параболой и надёжность метода золотого сечения.

Для каждого релаксированного блока были рассчитаны параметры, которые необходимы для задачи эмиссии атомов при распылении поверхности – постоянная решётки для верхнего слоя и поверхностная энергия связи. Постоянная решётки ~ 3.52 Å очень близка к табличному значению, использовавшемуся нами ранее [10; 11]. Значение энергии связи ~ 5.2 эВ получилось выше табличного значения 4.435 эВ, которое мы использовали в [10; 11], однако близко к значению энергии связи в классической работе [19], полученному с помощью парного потенциала Морзе.

Полученные параметры (постоянная решётки, энергия связи) стабильны для разных размеров блока и соответствуют данным литературы, что подтверждает адекватность выбранного потенциала и процедуры релаксации.

Было показано, что использовавшийся ранее [10; 11] метод средней силы не является строго симплектическим, сохраняя фазовый объём с точностью до третьего порядка по временному шагу $O(\Delta t^3)$. Поэтому для интегрирования уравнений динамики был выбран метод Верле для скоростей, который сохраняет фазовый объём точно. После отладки алгоритма численного интегрирования энергия и импульс системы сохраняются.

Сказанное выше подтверждает корректность созданной модели и позволяет использовать её для дальнейших исследований эмиссии атомов с поверхности (001) Ni.

Приложение 1. Элемент объёма в фазовом пространстве и метод средней силы

Рассмотрим систему одинаковых частиц (атомов) с s степенями свободы, для которой фазовое пространство Ω задаётся каноническими координатами $\mathbf{q} = (q_1, \dots, q_s)$ и импульсами $\mathbf{p} = (p_1, \dots, p_s)$, и гамильтониан

$$\mathcal{H}(\mathbf{q}, \mathbf{p}) = T(\mathbf{p}) + U(\mathbf{q}).$$

В таком случае силы $\mathbf{F} = -\nabla U$ зависят прямо только от координат \mathbf{q} . Без ограничения общности можно считать, что масса частиц $m = 1$.

В численном методе интегрирования уравнений движения по методу средней силы [20] мы вначале предсказываем координаты (предиктор):

$$\hat{\mathbf{q}} = \mathbf{q}(t) + \mathbf{p}(t)\Delta t + \mathbf{F}(\mathbf{q}(t)) \Delta t^2/2,$$

а затем, используя значения сил, усреднённых по текущим и предсказанным координатам, находим координаты и импульсы в следующий момент времени (корректор):

$$\begin{aligned} \mathbf{q}(t + \Delta t) &= \mathbf{q}(t) + \mathbf{p}(t)\Delta t + \left(\mathbf{F}(\mathbf{q}(t)) + \mathbf{F}(\hat{\mathbf{q}}) \right) \Delta t^2/4, \\ \mathbf{p}(t + \Delta t) &= \mathbf{p}(t) + \left(\mathbf{F}(\mathbf{q}(t)) + \mathbf{F}(\hat{\mathbf{q}}) \right) \Delta t/2. \end{aligned}$$

В дальнейшем, для краткости, будем обозначать координаты и импульсы в текущий момент времени просто \mathbf{p} и \mathbf{q} , а в следующий – \mathbf{p}' и \mathbf{q}' . Тогда

$$\begin{aligned} \hat{\mathbf{q}} &= \mathbf{q} + \mathbf{p}\Delta t + \mathbf{F}(\mathbf{q}) \Delta t^2/2, \\ \mathbf{q}' &= \mathbf{q} + \mathbf{p}\Delta t + \left(\mathbf{F}(\mathbf{q}) + \mathbf{F}(\hat{\mathbf{q}}) \right) \Delta t^2/4, \\ \mathbf{p}' &= \mathbf{p} + \left(\mathbf{F}(\mathbf{q}) + \mathbf{F}(\hat{\mathbf{q}}) \right) \Delta t/2. \end{aligned}$$

Бесконечно малый элемент объёма фазового пространства преобразуется через якобиан J :

$$d\Omega' = d\mathbf{q}' d\mathbf{p}' = J d\mathbf{q} d\mathbf{p} = J d\Omega,$$

который можно записать в блочном виде

$$J = \begin{vmatrix} \frac{\partial \mathbf{q}'}{\partial \mathbf{q}} & \frac{\partial \mathbf{p}'}{\partial \mathbf{q}} \\ \frac{\partial \mathbf{q}'}{\partial \mathbf{p}} & \frac{\partial \mathbf{p}'}{\partial \mathbf{p}} \end{vmatrix}.$$

При вычислении производных необходимо учесть зависимость предсказанной координаты от текущих координат и импульсов:

$$\frac{\partial \hat{q}_k}{\partial q_j} = \delta_{kj} + \frac{\Delta t^2}{2} \frac{\partial F_k}{\partial q_j},$$

$$\frac{\partial \hat{q}_k}{\partial p_j} = \delta_{kj} \Delta t,$$

поэтому

$$\begin{aligned} \frac{\partial F_i(\hat{\mathbf{q}})}{\partial q_j} &= \sum_k \frac{\partial F_i}{\partial \hat{q}_k} \cdot \frac{\partial \hat{q}_k}{\partial q_j} = \sum_k \frac{\partial F_i}{\partial \hat{q}_k} \left(\delta_{kj} + \frac{\Delta t^2}{2} \frac{\partial F_k}{\partial q_j} \right) = \frac{\partial F_i}{\partial \hat{q}_j} + \frac{\Delta t^2}{2} \sum_k \frac{\partial F_i}{\partial \hat{q}_k} \frac{\partial F_k}{\partial q_j}, \\ \frac{\partial F_i(\hat{\mathbf{q}})}{\partial p_j} &= \sum_k \frac{\partial F_i}{\partial \hat{q}_k} \cdot \frac{\partial \hat{q}_k}{\partial p_j} = \sum_k \frac{\partial F_i}{\partial \hat{q}_k} \delta_{kj} \Delta t = \frac{\partial F_i}{\partial \hat{q}_j} \Delta t. \end{aligned}$$

Используя эти результаты, для блоков якобиана получаем:

$$\begin{aligned} \frac{\partial q'_i}{\partial q_j} &= \delta_{ij} + \frac{\Delta t^2}{4} \left(\frac{\partial F_i}{\partial q_j} + \frac{\partial F_i}{\partial \hat{q}_j} \right) + \frac{\Delta t^4}{8} \sum_k \frac{\partial F_i}{\partial \hat{q}_k} \frac{\partial F_k}{\partial q_j}, \\ \frac{\partial q'_i}{\partial p_j} &= \delta_{ij} \Delta t + \frac{\Delta t^3}{4} \frac{\partial F_i}{\partial \hat{q}_j}, \\ \frac{\partial p'_i}{\partial q_j} &= \frac{\Delta t}{2} \left(\frac{\partial F_i}{\partial q_j} + \frac{\partial F_i}{\partial \hat{q}_j} \right) + \frac{\Delta t^3}{4} \sum_k \frac{\partial F_i}{\partial \hat{q}_k} \frac{\partial F_k}{\partial q_j}, \\ \frac{\partial p'_i}{\partial p_j} &= \delta_{ij} + \frac{\Delta t^2}{2} \frac{\partial F_i}{\partial \hat{q}_j}. \end{aligned}$$

Запишем блоки, пренебрегая слагаемыми с произведениями частных производных сил:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \mathbf{q}'}{\partial \mathbf{q}} &= \mathbf{I} + \frac{\Delta t^2}{4} (\nabla \mathbf{F}(\mathbf{q}) + \nabla \mathbf{F}(\hat{\mathbf{q}})) + O(\Delta t^4), \\ \frac{\partial \mathbf{q}'}{\partial \mathbf{p}} &= \mathbf{I} \Delta t + \frac{\Delta t^3}{4} \nabla \mathbf{F}(\hat{\mathbf{q}}), \\ \frac{\partial \mathbf{p}'}{\partial \mathbf{q}} &= \frac{\Delta t}{2} (\nabla \mathbf{F}(\mathbf{q}) + \nabla \mathbf{F}(\hat{\mathbf{q}})) + O(\Delta t^3), \\ \frac{\partial \mathbf{p}'}{\partial \mathbf{p}} &= \mathbf{I} + \frac{\Delta t^2}{2} \nabla \mathbf{F}(\hat{\mathbf{q}}), \end{aligned}$$

здесь \mathbf{I} – единичная матрица размера $s \times s$, $\nabla \mathbf{F}$ – матрица частных производных сил по координатам.

Воспользуемся формулой Шура для определителя блочной матрицы:

$$J = \det \left(\frac{\partial \mathbf{q}'}{\partial \mathbf{q}} \right) \det S,$$

где S – дополнение Шура:

$$S = \frac{\partial \mathbf{p}'}{\partial \mathbf{p}} - \frac{\partial \mathbf{q}'}{\partial \mathbf{p}} \left(\frac{\partial \mathbf{q}'}{\partial \mathbf{q}} \right)^{-1} \frac{\partial \mathbf{p}'}{\partial \mathbf{q}}.$$

Также используем формулы разложения обратной матрицы и определителя по малому параметру ϵ :

$$\begin{aligned} (I + \epsilon A)^{-1} &= I - \epsilon A + O(\epsilon^2), \\ \det(I + \epsilon A) &= 1 + \epsilon \operatorname{tr} A + O(\epsilon^2) \end{aligned}$$

(A – произвольная матрица, $\text{tr } A$ – её след). Получим

$$\det \left(\frac{\partial \mathbf{q}'}{\partial \mathbf{q}} \right) = 1 + \frac{\Delta t^2}{4} \text{tr}(\nabla \mathbf{F}(\mathbf{q}) + \nabla \mathbf{F}(\hat{\mathbf{q}})) + O(\Delta t^4),$$

$$\det S = \det \left(\mathbf{I} - \frac{\Delta t^2}{2} \nabla \mathbf{F}(\mathbf{q}) + O(\Delta t^4) \right) = 1 - \frac{\Delta t^2}{2} \text{tr} \nabla \mathbf{F}(\mathbf{q}) + O(\Delta t^4),$$

$$J = 1 + \frac{\Delta t^2}{4} \text{tr}(\nabla \mathbf{F}(\hat{\mathbf{q}}) - \nabla \mathbf{F}(\mathbf{q})) + O(\Delta t^4).$$

Выполним разложение в ряд Тейлора:

$$\frac{\partial F_i}{\partial \hat{q}_j} - \frac{\partial F_i}{\partial q_j} = \sum_k \frac{\partial^2 F_i}{\partial q_k \partial q_j} (\hat{q}_k - q_k) + O(\|\hat{\mathbf{q}} - \mathbf{q}\|^2),$$

$$\hat{q}_k - q_k = p_k \Delta t + O(\Delta t^2),$$

$$\text{tr}(\nabla \mathbf{F}(\hat{\mathbf{q}}) - \nabla \mathbf{F}(\mathbf{q})) = \Delta t \sum_{i,k} \frac{\partial^2 F_i}{\partial q_k \partial q_i} p_k + O(\Delta t^2).$$

Окончательный ответ:

$$J = 1 + \frac{\Delta t^3}{4} \sum_{i,k} \frac{\partial^2 F_i}{\partial q_k \partial q_i} p_k + O(\Delta t^4).$$

Если силы гармонические, то коэффициенты при Δt^3 обнуляются, в этом случае фазовый объём сохраняется с точностью $O(\Delta t^4)$.

ЛИТЕРАТУРА

1. Secondary ion mass spectrometry / N. P. Lockyer, S. Aoyagi, J. S. Fletcher, I. S. Gilmore, P. A. W. van der Heide, K. L. Moore, B. J. Tyler, L. -T. Weng // Nature Reviews Methods Primers. 2024. Vol. 4. No. 1. Article no. 32. DOI: 10.1038/s43586-024-00311-9.
2. Модификация рельефа поверхности аддитивных материалов при облучении ионами Ar^+ / Д. С. Киреев, К. Ф. Миннебаев, В. А. Киселевский, А. Е. Иешкин // Вестник Московского университета. Серия 3. Физика. Астрономия. 2024. Т. 79. № 4. С. 2440501. DOI: 10.55959/MSU0579-9392.79.2440501.
3. Исследование влияния травления ионными пучками на шероховатость поверхности монокристаллического сапфира / М. С. Михайленко, А. Е. Пестов, М. В. Зорина, А. К. Чернышев, Н. И. Чхало, И. Э. Шевчук // Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования. 2023. № 12. С. 25–30. DOI: 10.31857/S1028096023120154.
4. Структурные особенности текстурированных пленок оксида цинка, полученных методом ионного распыления / В. Г. Костишин, А. Ю. Миронович, А. В. Тимофеев, И. М. Исаев, Р. И. Шакирзянов, А. И. Риль, А. А. Сергиенко // Физика и техника полупроводников. 2021. Т. 55. № 3. С. 230–236. DOI: 10.21883/FTP.2021.03.50600.9542.

5. The cosmic-ray induced sputtering process on icy grains / Ö. Arslan, S. Hocuk, P. Caselli, I. Küçük // *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society*. 2023. Vol. 518. Iss. 2. P. 2050–2067. DOI: 10.1093/mnras/stac3196.
6. Шпиньков В. И., Самойлов В. Н. О фокусировке атомов, распыленных с грани (001) Ni, в случае гауссовых пучков эмитируемых атомов // *Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования*. 2009. № 3. С. 73–79.
7. Самойлов В. Н., Носов Н. В. Эффекты фокусировки по азимутальному углу атомов, эмитированных с граней (001) Ni и (001) Au // *Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования*. 2014. № 3. С. 81–92. DOI: 10.7868/S0207352814030202.
8. Sigmund P. Theory of Sputtering. I. Sputtering Yield of Amorphous and Polycrystalline Targets // *Physical Review*. 1969. Vol. 184. Iss. 2. P. 383–416. DOI: 10.1103/PhysRev.184.383.
9. Sigmund P. Errata. Theory of Sputtering. I. Sputtering Yield of Amorphous and Polycrystalline Targets // *Physical Review*. 1969. Vol. 187. Iss. 2. P. 768. DOI: 10.1103/PhysRev.187.768.
10. Мусин А. И., Самойлов В. Н. О сдвиге максимума полярного углового распределения распыленных атомов в МД-модели распыления грани (001) Ni // *Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования*. 2024. № 6. С. 31–37. DOI: 10.31857/S1028096024060048.
11. Мусин А. И., Самойлов В. Н. Об особенностях формирования полярного распределения распыленных атомов в МД-модели распыления грани (001) Ni // *Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования*. 2025. № 3. С. 17–22. DOI: 10.31857/S1028096025030039.
12. Kornich G. V., Betz G. MD simulation of atomic displacements in pure metals and metallic bilayers during low energy ion bombardment at 0 K // *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms*. 1998. Vol. 143. Iss. 4. P. 455–472. DOI: 10.1016/S0168-583X(98)00410-8.
13. Simple N-body potentials for the noble metals and nickel / G. J. Ackland, G. Tichy, V. Vitek, M. W. Finnis // *Philosophical Magazine A*. 1987. Vol. 56. Iss. 6. P. 735–756. DOI: 01418618708204485.
14. Supercomputer Lomonosov-2: Large Scale, Deep Monitoring and Fine Analytics for the User Community / Vl. V. Voevodin, A. S. Antonov, D. A. Nikitenko, P. A. Shvets, S. I. Sobolev, I. Yu. Sidorov, K. S. Stefanov, V. V. Voevodin, S. A. Zhumatiy // *Supercomputing Frontiers and Innovations*. 2019. Vol. 6. No. 2. P. 4–11. DOI: 10.14529/jsfi190201.
15. Humphrey W., Dalke A., Schulten K. VMD: Visual molecular dynamics // *Journal of Molecular Graphics*. 1996. Vol. 14. Iss. 1. P. 33–38. DOI: 10.1016/0263-7855(96)00018-5.
16. Zhou X. W., Johnson R. A., Wadley H. N. G. Misfit-energy-increasing dislocations in vapor-deposited CoFe/NiFe multilayers // *Physical Review B*. 2004. Vol. 69. Iss. 14. Article no. 144113. DOI: 10.1103/PhysRevB.69.144113.

17. Ziegler J. F., Biersack J. P., Littmark U. Empirical stopping powers for ions in solids // Charge states and dynamic screening of swift ions in solids: Proceedings of the U. S. – Japan Seminar on Charged-Particle Penetration Phenomena (January, 25–29, East-West Center, Honolulu, Hawaii). Oak Ridge, TN (USA): Oak Ridge National Lab., 1983. P. 88–100.
18. Fletcher R., Reeves C. M. Function minimization by conjugate gradients // The Computer Journal. 1964. Vol. 7. Iss. 2. P. 149–154. DOI: 10.1093/comjnl/7.2.149.
19. Jackson D. P. Binding energies in cubic metal surfaces // Radiation Effects. 1973. Vol. 18. Iss. 3-4. P. 185–189. DOI: 10.1080/00337577308232120.
20. Harrison D. E., Gay W. L., Effron H. M. Algorithm for the calculation of the classical equations of motion of an N-body system // Journal of Mathematical Physics. 1969. Vol. 10. Iss. 7. P. 1179–1184. DOI: 10.1063/1.1664955.

REFERENCES

1. Lockyer, N. P., Aoyagi, S., Fletcher, J. S., Gilmore, I. S., van der Heide, P. A. W., Moore, K. L., Tyler, B. J. & Weng, L.-T. (2024). Secondary ion mass spectrometry. In: *Nature Reviews Methods Primers*, 4 (1), article no. 32. DOI: 10.1038/s43586-024-00311-9.
2. Kireev, D. S., Minnebaev, K. F., Kiselevskiy, V. A. & Ieshkin, A. E. (2024). Modification of the Surface Topography of Additive Materials under Ar+ Ion Irradiation. In: *Moscow University Physics Bulletin*, 79 (4), p. 2440501. DOI: 10.55959/MSU0579-9392.79.2440501 (in Russ.).
3. Mikhailenko, M. S., Pestov, A. E., Zorina, M. V., Chernyshev, A. K., Chkhalo, N. I. & Shevchuk, I. E. (2023). Study of the influence of ion-beam etching on the surface roughness of single-crystal sapphire. In: *Journal of Surface Investigation: X-Ray, Synchrotron and Neutron Techniques*, 12, 25–30. DOI: 10.31857/S1028096023120154 (in Russ.).
4. Kostishin, V. G., Mironovich, A. Y., Timofeev, A. V., Isaev, I. M., Shakirzyanov, R. I., Ril, A. I. & Sergienko, A. A. (2021). Structural features of textured zinc-oxide films obtained by the ion-beam sputtering method. In: *Semiconductors*, 55 (3), 230–236. DOI: 10.21883/FTP.2021.03.50600.9542 (in Russ.).
5. Arslan, Ö., Hocuk, S., Caselli, P. & Küçük, I. (2023). The cosmic-ray induced sputtering process on icy grains. In: *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society*, 518 (2), 2050–2067. DOI: 10.1093/mnras/stac3196.
6. Shpinkov, V. I. & Samoilo, V. N. (2009). Focusing of Atoms Sputtered from (001)Ni Surface for Gaussian Distribution of Ejected Atoms. In: *Journal of Surface Investigation. X-ray, Synchrotron and Neutron Techniques*, 3, 73–79 (in Russ.).
7. Samoilo, V. N. & Nosov, N. V. (2014). Effects of the Azimuthal Angle Focusing of Atoms Ejected from (001) Ni and (001) Au. In: *Journal of Surface Investigation. X-ray, Synchrotron and Neutron Techniques*, 3, 81–92. DOI: 10.7868/S0207352814030202 (in Russ.).

8. Sigmund, P. (1969). Theory of Sputtering. I. Sputtering Yield of Amorphous and Polycrystalline Targets. In: *Physical Review*, 184 (2), 383–416. DOI: 10.1103/PhysRev.184.383.
9. Sigmund, P. (1969). Errata. Theory of Sputtering. I. Sputtering Yield of Amorphous and Polycrystalline Targets. In: *Physical Review*, 187 (2), 768. DOI: 10.1103/PhysRev.187.768.
10. Musin, A. I. & Samoilov, V. N. (2024). On the shift of the maximum of the polar angular distribution of sputtered atoms in the md model of the (001) Ni face sputtering. In: *Journal of Surface Investigation. X-ray, Synchrotron and Neutron Techniques*, 6, 31–37. DOI: 10.31857/S1028096024060048 (in Russ.).
11. Musin, A. I. & Samoilov, V. N. (2025). On the features of the formation of polar distribution of sputtered atoms in the md model of the (001) Ni face sputtering. In: *Journal of Surface Investigation. X-ray, Synchrotron and Neutron Techniques*, 3, 17–22. DOI: 10.31857/S1028096025030039 (in Russ.).
12. Kornich, G. V. & Betz, G. (1998). MD simulation of atomic displacements in pure metals and metallic bilayers during low energy ion bombardment at 0 K. In: *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms*, 143 (4), 455–472. DOI: 10.1016/S0168-583X(98)00410-8.
13. Ackland, G. J., Tichy, G., Vitek, V. & Finnis, M. W. (1987). Simple N-body potentials for the noble metals and nickel. In: *Philosophical Magazine A*, 56 (6), 735–756. DOI: 01418618708204485.
14. Voevodin, V. V., Antonov, A. S., Nikitenko, D. A., Shvets, P. A., Sobolev, S. I., Sidorov, I. Yu., Stefanov, K. S., Voevodin, V. V. & Zhumatiy, S. A. (2019). Supercomputer Lomonosov-2: Large Scale, Deep Monitoring and Fine Analytics for the User Community. In: *Supercomputing Frontiers and Innovations*, 6 (2), 4–11. DOI: 10.14529/jsfi190201.
15. Humphrey, W., Dalke, A. & Schulten, K. (1996). VMD: Visual molecular dynamics. In: *Journal of Molecular Graphics*, 14 (1), 33–38. DOI: 10.1016/0263-7855(96)00018-5.
16. Zhou, X. W., Johnson, R. A. & Wadley, H. N. G. (2004). Misfit-energy-increasing dislocations in vapor-deposited CoFe/NiFe multilayers. In: *Physical Review B*, 69 (14), article no. 144113. DOI: 10.1103/PhysRevB.69.144113.
17. Ziegler, J. F., Biersack, J. P. & Littmark, U. (1983). Empirical stopping powers for ions in solids. In: *Charge states and dynamic screening of swift ions in solids: Proceedings of the U. S. – Japan Seminar on Charged-Particle Penetration Phenomena (January, 25–29, East-West Center, Honolulu, Hawaii)*. Oak Ridge, TN (USA): Oak Ridge National Lab., pp. 88–100.
18. Fletcher, R. & Reeves, C. M. (1964). Function minimization by conjugate gradients. In: *The Computer Journal*, 7 (2), 149–154. DOI: 10.1093/comjnl/7.2.149.
19. Jackson, D. P. (1973). Binding energies in cubic metal surfaces. In: *Radiation Effects*, 18 (3-4), 185–189. DOI: 10.1080/00337577308232120.
20. Harrison, D. E., Gay, W. L. & Effron H. M. (1969). Algorithm for the calculation of the classical equations of motion of an N-body system. In: *Journal of Mathematical Physics*, 10 (7), 1179–1184. DOI: 10.1063/1.1664955.

ИНФОРМАЦИЯ ОБ АВТОРЕ

Мусин Артем Игоревич – кандидат физико-математических наук, доцент кафедры физики Московского государственного технологического университета «СТАНКИН»; доцент кафедры физики и методики обучения физике Вятского государственного университета;

<https://orcid.org/0000-0002-3167-9023>; e-mail: ai.musin@physics.msu.ru

INFORMATION ABOUT THE AUTHOR

Artem I. Musin – Cand. Sci. (Phys.-Math.), Assoc. Prof., Department of Physics, Moscow State University of Technology “STANKIN”; Assoc. Prof., Department of Physics and Teaching Physics, Vyatka State University;

<https://orcid.org/0000-0002-3167-9023>; e-mail: ai.musin@physics.msu.ru