



КАЗАНСКИЙ ФЕДЕРАЛЬНЫЙ
УНИВЕРСИТЕТ

СБОРНИК ТЕЗИСОВ

ВСЕРОССИЙСКОЙ С МЕЖДУНАРОДНЫМ
УЧАСТИЕМ ШКОЛЫ-КОНФЕРЕНЦИИ СТУДЕНТОВ,
АСПИРАНТОВ И МОЛОДЫХ УЧЕНЫХ

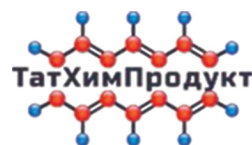
«МАТЕРИАЛЫ И ТЕХНОЛОГИИ XXI ВЕКА»



МИНИСТЕРСТВО НАУКИ
И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ
РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ



Координационный совет по делам молодежи в
научной и образовательной сферах при Совете
при Президенте Российской Федерации по
науке и образованию



ТатХимПродукт



Казань, 30 ноября – 2 декабря 2023 года

СБОРНИК ТЕЗИСОВ

ВСЕРОССИЙСКОЙ С МЕЖДУНАРОДНЫМ УЧАСТИЕМ
ШКОЛЫ-КОНФЕРЕНЦИИ СТУДЕНТОВ, АСПИРАНТОВ
И МОЛОДЫХ УЧЕНЫХ

«МАТЕРИАЛЫ И ТЕХНОЛОГИИ XXI ВЕКА»



Издательский дом Маковского
Казань, 2023

УДК 001.1(082)
ББК 72я43
С23

**Мероприятие проведено в рамках реализации в форме субсидий
из федерального бюджета образовательным организациям
высшего образования на реализацию мероприятий,
направленных на поддержку студенческих научных сообществ.**

- С23 Сборник тезисов Всероссийской с международным участием школы-конференции студентов, аспирантов и молодых ученых «Материалы и технологии XXI века» / Отв. ред. А.В. Герасимов. [Электронный ресурс]: сб. тезисов. – Электрон. текстовые дан. (1 файл: 9,44 Мб). – Казань: Издательский дом Маковского, 2023. – 311 с. – Систем. требования: Adobe Acrobat Reader. – Режим доступа: https://kpfu.ru/portal/docs/F_717227560/Sbornik.tezisev.MiT.2023.pdf. – Загл. с титул. экрана.**

ISBN 978-5-904613-33-4

УДК 001.1(082)
ББК 72я43

ISBN 978-5-904613-33-4

МОДЕЛЬ ЭМИССИИ АТОМОВ NI И MO С ПОВЕРХНОСТИ МОНОКРИСТАЛЛА (001) Ni₄Mo

А.И. Мусин^{a,b}, В.Н. Самойлов^c, Н.Г. Ананьева^c

^aМосковский государственный технологический университет «СТАНКИН», Москва, Россия

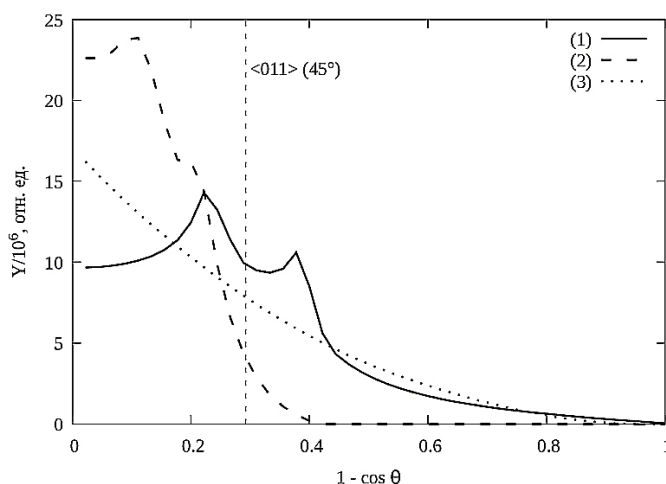
^bГосударственный университет просвещения, Мытищи, Московская область, Россия

^cМосковский государственный университет им. М.В. Ломоносова, Москва, Россия

ai.musin@physics.msu.ru

На основе модели [1], использованной нами ранее для расчетов распыления с грани (001) Ni, была создана модель численного моделирования распыления атомов с поверхности монокристалла (001) Ni₄Mo на стадии эмиссии по методу молекулярной динамики, в рамках которой учитывалось взаимодействие атома с ближайшими 20 атомами первого слоя. Начальная функция распределения $F_0 \sim \cos\theta_0 / E_0^2$.

На рисунке показаны рассчитанные распределения атомов Mo, распыленных с поверхности (001) Ni₄Mo, по $1 - \cos\theta$ (1), $1 - \cos\theta_i$ (2) и $1 - \cos\theta_0$ (3), где θ_0 – начальный полярный угол эмиссии, θ_i – полярный угол при подлете к плоскому потенциальному барьеру, θ – конечный полярный угол вылета. Было показано, что даже без учета процессов в каскаде столкновений можно получить реалистичное распределение распыленных атомов только за счет действия поверхностных механизмов распыления.



Работа выполнена с использованием оборудования Центра коллективного пользования сверхвысокопроизводительными вычислительными ресурсами МГУ имени М.В. Ломоносова [2].

1. А.И. Мусин, В.Н. Самойлов. Поверхность. 2020. №7. С. 104–112.

2. Vl. Voevodin et al. Supercomputing Frontiers and Innovations. 2019. V. 6. No. 2. P. 4–11.