

01;12  
©1995

## РАСЧЕТ МАСС-СПЕКТРОВ КЛАСТЕРОВ ПРИ ИОННОМ РАСПЫЛЕНИИ ПОВЕРХНОСТИ ТВЕРДОГО ТЕЛА

*Б.Г.Краков, О.В.Гулямова*

Одним из основных способов формирования кластеров является бомбардировка поверхности твердого тела ионами средних (несколько кэВ) энергий. Масс-спектр (МС) распыленных частиц очень широк: от единиц до сотен атомов в кластере [1]. Среди кластеров встречаются как нейтральные, так и ионизованные. При этом небольшие кластеры с размером  $\leq 10$  в основном нейтральны, а более крупные кластеры, как правило, заряжены [2]. Поскольку наибольший интерес в настоящее время представляет область больших  $n$ , мы будем рассматривать ионизованные кластеры. Существует ряд моделей формирования кластеров при распылении и методов их расчета. Вычисление МС во всех этих моделях связано либо с проведением сложных численных расчетов, либо с использованием большого числа эмпирических параметров.

В нашей модели формирование МС кластеров рассматривается на основе метода, первоначально развитого для расчета дисперсного состава продуктов эрозии электродов под действием импульсного электрического разряда [3]. Необходимо отметить, что такой подход независимо использован в работе [4] для расчета процесса мультифрагментации возбужденных ядер. Применительно к процессу ионного распыления поверхности суть его такова. Суммарное число атомов, вылетевшее в единичном акте распыления, равно некоторому целому числу  $N$ , зависящему от энергии и массы ионов. Из-за большой энергии иона возможны любые комбинации вылетающих атомов в единичном акте распыления. Каждая комбинация образует некоторое распределение кластеров по размерам. При этом все возможные распределения кластеров по размерам считаются равновероятными. Математически эта задача эквивалентна задаче о нахождении всех возможных разбиений некоторого целого положительного числа  $N$  на целые положительные слагаемые, причем слагаемые могут быть одинаковыми. Разбиения могут быть упорядоченные и неупорядоченные [5]. Для упорядоченных разбиений порядок слагаемых в сумме имеет значение, и разбиения с разным порядком од-

них и тех же слагаемых считаются разными. Для неупорядоченных разбиений порядок слагаемых не имеет значения. Упорядоченное разбиение числа 3 имеет вид (3), (2;1), (1;2), (1;1;1), а неупорядоченное — (3), (1;2), (1;1;1). Поскольку атомы неразличимы, то разбиения типа (2;1) и (1;2) являются вырожденными. Следовательно, нужно рассматривать только неупорядоченные разбиения.

Обозначим через  $\Pi_N^n$  число разбиений целого числа  $N$  на слагаемые  $1, 2 \dots n$ . Тогда имеет место формула [6]:

$$\Pi_N^n = \Pi_N^{n-1} + \Pi_{N-n}^n, \quad (1)$$

Полагая, что  $\Pi_0^n = 1$ , и замечая, что  $\Pi_N^1 = 1$ , можно рассчитать все  $\Pi_N^n$ , вплоть до  $\Pi_N^N$  ( $\Pi_N^N$  — число разбиений  $N$  на слагаемые от 1 до  $N$ ). Введем числа  $M_N^n$ , равные числу появлений слагаемого  $n$  во всех разбиениях  $N$ . Из определения чисел  $M_N^n$  следует соотношение, связывающее их с числами  $\Pi_N^n$ :

$$\Pi_N^N \cdot N = \sum_{n=1}^N n \cdot M_N^n. \quad (2)$$

Для чисел  $M_N^n$  справедлива рекуррентная формула

$$M_N^n = M_{N-n}^n + \Pi_{N-n}^{N-n}, \quad (3)$$

которая позволяет с учетом формулы (1) получить все числа  $M_N^n$  ( $n = 1, 2 \dots N$ ). С помощью чисел  $\Pi_N^n$  и  $M_N^n$  можно рассчитать некоторые характеристики разбиения числа  $N$ : функцию распределения слагаемых  $n$  —  $F_N^n$ ; среднее количество слагаемых  $n$  в разбиении —  $G_N^n$ ; интегральную функцию распределения —  $Y_N^n$  [3];

$$F_N^n = \frac{M_N^n}{\sum_{k=1}^N M_N^k}, \quad (4)$$

$$G_N^n = \frac{M_N^n}{\Pi_N^n}, \quad (5)$$

$$Y_N^n = \sum_{k=1}^n F_N^k. \quad (6)$$

Переходя от целых чисел  $n$  к кластерам размером  $n$ , получим, что выражение (4) дает относительный выход

кластеров по размерам, выражение (5) — среднее число кластеров данного размера в единичном акте распыления, (6) — интегральный выход кластеров. Единственным параметром модели является число  $N$  — количество выбитых атомов в одном акте распыления.

Из экспериментальных данных [7,8] следует, что при распылении образуются кластеры с номерами  $n$ , много большими среднего коэффициента распыления материала  $S$  при данной энергии падающего иона. Это позволяет предположить, что число атомов, выбиваемых в единичном акте распыления, носит случайный характер. Это может быть связано с неоднородностью поверхности, немонохроматичностью пучков и т. д. Полагая, что вероятность выбивания  $N$  атомов в единичном акте распыления,  $P(N)$  описывается распределением Пуассона

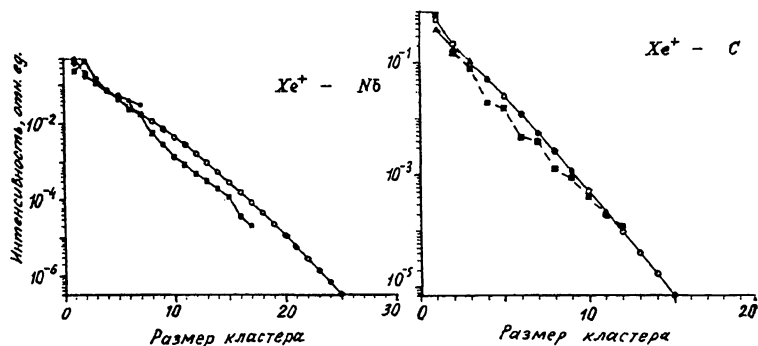
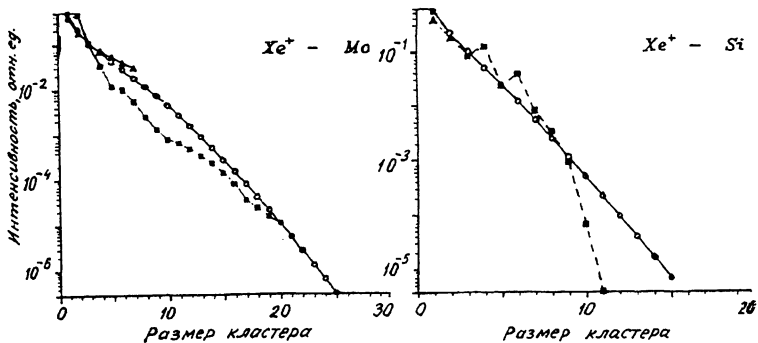
$$P(N) = \frac{\lambda^N \cdot \exp(-\lambda)}{N!}, \quad (7)$$

где  $\lambda = S$ , для относительного выхода  $f(\lambda, n)$  получим следующее выражение

$$f(\lambda, n) = \sum_{N=1}^{\infty} F_N^n \cdot P(N). \quad (8)$$

На рисунке приведены экспериментальные данные [8] по получению кластеров  $Mo_n^+$ ,  $Nb_n^+$ ,  $C_n^+$ ,  $Si_n^+$  ионами  $He^+$  с энергией 9.5 кэВ, а также результаты наших расчетов по формулам (4) и (8). Средние коэффициенты распыления для данных экспериментальных условий взяты из [9]. Расчеты по формуле (8) демонстрируют неплохое согласие с экспериментом как для металлов, так и для неметаллов. Интересно отметить, что полученные кривые, как и экспериментальные данные, хорошо аппроксимируются простой экспоненциальной функцией, в отличие от большинства существующих моделей, для которых характерна степенная зависимость относительного выхода кластеров  $F_N^n$  от номера  $n$  [2]. Имеющиеся расхождения с экспериментом связаны, на наш взгляд, с предположением о равновероятности всех возможных разбиений числа  $N$ , что означает равновероятность всех каналов фрагментации. Другим возможным фактором является предположение о пуассоновском характере распределения  $P(N)$ .

Наряду с расчетом относительного выхода кластеров предложенный метод позволяет получить детальную информацию о единичном акте распыления. Так, формула (5) дает среднее число кластеров данного размера. Можно получить распределение по количеству частиц, образованных



Функция распределения кластеров различных элементов по размерам: ■ — эксперимент [8], ▲ — расчет по формуле (4), ○ — расчет по формуле (8).

одним падающим ионом. Эти расчеты могут быть проверены экспериментально.

Таким образом, предложенный метод расчета распределений распыленных кластеров дает возможность достаточно просто получить зависимости различных характеристик распыления от размеров кластеров.

Мы благодарим С.В. Верхотурова и И.С. Битенского за многочисленные и плодотворные обсуждения.

### Список литературы

- [1] Katakuse I., Ichihara T, Fachta Y. et al. // Inter. J. Mass Spec. 1989. V. 91. N 1. P. 99.
- [2] Wucher A., Wahl M., Oechsner H. // NIM. 1993. V. B83, N 1. P. 73.
- [3] Абдукаримов Э.Т., Краков Б.Г. // Электронная обработка материалов. 1993. № 3. С. 13.
- [4] Кравцов А.В., Солякин Г.Е. Письма в ЖЭТФ. 1993. Т. 58. В. 3. С. 172.
- [5] Холл М. Комбинаторика. М.: Мир, 1970. 310 с.
- [6] Виленкин И.Я. Комбинаторика. М.: Наука, 1969. 328 с.

- [7] *Джемилев Н.Х., Вертогуров С.В.* // Изв. АН СССР. Сер. физ. 1985. Т. 49. В. 6. С. 1831.
- [8] *Джемилев Н.Х., Вертогуров С.В., Расулев У.Х.* // Поверхность. Физика, химия, механика. 1986. № 2. С. 86.
- [9] *Распыление твердых тел ионной бомбардировкой* / Под ред. Р. Бериша. М.: Мир, 1984. 336 с.

Институт электроники  
АН РУ  
Ташкент

Поступило в Редакцию  
7 июля 1994 г.  
В окончательной редакции  
16 февраля 1995 г.

---