01;05;11

Энергетические спектры и температурные распределения кластеров при ионном распылении металла

© В.И. Матвеев,[1] С.А. Кочкин

Поморский государственный университет им. М.В. Ломоносова,
163006 Архангельск, Россия
[1] e-mail: matveev.victor@pomorsu.ru

(Поступило в Редакцию 5 июня 2003 г.)

Предложена методика расчетов энергетических спектров и температурных зависимостей нейтральных и заряженных кластеров с числом атомов $N \geq 5$ при ионном распылении металла. Результаты представлены в виде простых формул. Проведено сравнение с экспериментом рассчитанных в данной работе энергетических распределений кластеров, эмиттированных при бомбардировке ниобия, тантала и железа атомарными ионами золота и ксенона, а также температурных зависимостей выхода кластеров серебра при бомбардировке ионами ксенона.

Введение

Во многих случаях [1–5] экспериментальные исследования процессов ионного распыления твердых тел в виде кластеров направлены на выяснение механизмов, обусловливающих наличие в продуктах распыления многоатомных частиц. Обычно (см., например, [6–11]) проводятся измерения энергетических спектров и распределений нейтральных и однократно заряженных кластеров по размерам в зависимости от типа мишени, состава и тока бомбардирующих частиц, а также зависимостей выхода нейтральных и заряженных кластеров от температуры мишени [8], несущих более подробную информацию о механизмах формирования кластеров. Теоретическое описание процессов эмиссии кластеров при ионном распылении затруднено прежде всего существенно многочастичным характером задачи. Расчеты же методами молекулярной динамики (см., например, [1]) сложны в техническом отношении, особенно с ростом числа атомов в кластере, и трудно воспроизводимы другими, кроме авторов расчетов, исследователями. Трудности значительно возрастают при включении в схему расчетов процессов формирования зарядового состава продуктов распыления (см., например, обзор [5]).

В настоящей статье, на основе физических представлений, предложенных в работах [12–15], и метода расчета полного выхода кластеров [15], справедливых для кластеров с числом атомов $N \geq 5$, развит метод расчета энергетических спектров нейтральных и заряженных кластеров, эмиттированных при ионной бомбардировке металла, а также зависимостей энергетических распределений таких кластеров от температуры мишени.

Энергетический спектр

Будем считать твердое тело образованным из атомов, каждый из которых находится в осцилляторной яме глубиной Δ и имеет собственную частоту ω. Характерный период колебаний $T = 2\pi/\omega$. Пусть скорость падающего иона такова, что за время $\tau \ll T$ ион и быстрые атомы отдачи при движении в металле претерпевают большое число столкновений, в результате которых атомы металла получают некоторые импульсы $\mathbf{q}_i$, где i — номер атома. Тогда, согласно [15], вероятность вылета кластера из N атомов как целого с импульсом $\mathbf{k}$, равна

$$W_{\mathbf{k}} = \left| \langle \Phi_{\mathbf{k}}(\mathbf{R}) \right| \exp\left(\frac{i}{\hbar} \sum_{i=1}^{N} \mathbf{q}_i \mathbf{R} \right) \left| \Phi_0(\mathbf{R}) \rangle \right|^2 \times \exp\left(-\frac{1}{n_0} \frac{1}{2\alpha^2\hbar^2} \sum_{i=1}^{N} \mathbf{q}_i^2 \right), \tag{1}$$

где $\alpha^2 = m\omega/\hbar$, m — масса атома, $\hbar$ — постоянная Планка; $n_0 = \Delta/\hbar\omega$; $\Phi_0(\mathbf{R})$ — волновая функция основного состояния центра масс блока из N атомов; $\Phi_{\mathbf{k}}(\mathbf{R})$ — волновая функция центра масс блока в состоянии непрерывного спектра с импульсом $\mathbf{k}$; $\mathbf{R}$ — координаты центра масс.

Считается, что центр масс блока из N атомов совершает гармонические колебания с частотой Ω в потенциальной яме глубиной U_N, имеющей смысл энергии связи кластера с металлом. Такая энергия связи пропорциональна площади поверхности S_N, по которой блок из N атомов соприкасается с остальным металлом. Тогда [12–15] $U_N = \sigma S_N = \delta N^{2/3}$, где δ — имеет смысл энергии связи кластера, отнесенной к одному атому в составе кластера (и, вообще говоря, δ отличается от Δ — глубины потенциальной ямы, в которой находится каждый атом твердого тела).

Для вычисления энергетического спектра в этом случае воспользуемся выражением (1). Считаем, что центр масс блока движется в сферически симметричном осцилляторном потенциале, обрезанным на высоте U_N. Такой потенциал будем обозначать $U(\mathbf{R})$, причем

$$U(\mathbf{R}) = \frac{mN\Omega^2}{2} \mathbf{R}^2$$

при $R < R_N$, где R_N такое, что $U(R_N) = U_N$, а при $R > R_N$ потенциал имеет постоянное значение

$U(\mathbf{R}) = U_N$. Далее, запишем волновую функцию для центра масс в состоянии $\Phi_{\mathbf{k}}(\mathbf{R})$ непрерывного спектра с импульсом $\mathbf{k}$ и энергией $E_c + U_N$, где $E_c = \mathbf{k}^2/(2mN)$, в квазиклассическом виде [16]

$$\Phi_{\mathbf{k}}(\mathbf{R}) = \frac{A}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \exp\left(\frac{i}{\hbar}\int \mathbf{k}(\mathbf{R})\,d\mathbf{R}\right), \qquad (2)$$

где $|\mathbf{k}(\mathbf{R})| = \sqrt{2mN\big(E_c + U_N - U(\mathbf{R})\big)}$ и $\mathbf{k}(\mathbf{R}) \to \mathbf{k}$ при $R \to \infty$.

Далее, считаем [12–15], что яма $U(\mathbf{R})$ достаточно глубокая и выполнены следующие условия $\hbar\Omega \ll U_N$, так что на размерах основного состояния $\Phi_0(\mathbf{R})$ можно считать, что $U(\mathbf{R}) \ll U_N$. Тогда в формуле (1) при вычислении матричного элемента

$$\left\langle \Phi_{\mathbf{k}}(\mathbf{R}) \middle| \exp\left(\frac{i}{\hbar}\sum_{i=1}^{N} \mathbf{q}_i \mathbf{R}\right) \middle| \Phi_0(\mathbf{R}) \right\rangle$$

можно считать, что в функции $\Phi_{\mathbf{k}}(\mathbf{R})$ импульс $|\mathbf{k}(\mathbf{R})| = \sqrt{2mN(E_c + U_N)} = |\mathbf{k}(0)|$ В результате

$$W_{\mathbf{k}} = \frac{|A|^2}{(\pi m N\hbar\Omega)^{3/2}} \exp\left(-\left(\sum_{i=1}^{N} \mathbf{q}_i - \mathbf{k}(0)\right)^2 \Big/ (mN\hbar\Omega)\right)$$

$$\times \exp\left(-\frac{1}{n_0}\frac{1}{2\alpha^2\hbar^2}\sum_{i=1}^{N} \mathbf{q}_i^2\right). \qquad (3)$$

Далее, как и в [15], следует усреднить вероятность (3) по всем возможным значениям $\mathbf{q}_i$, $i = (1, 2, \ldots, N)$. Сделаем естественное предположение о распределениях значений $\mathbf{q}_i$: считаем все $\mathbf{q}_i$ независимыми, а все направления $\mathbf{q}_i$ равновероятными и возьмем среднее по углам $\Omega_{\mathbf{q}_i}$ векторов $\mathbf{q}_i$

$$\overline{W_{\mathbf{k}}} = \frac{1}{(4\pi)^N}\iint \ldots \int d\Omega_{\mathbf{q}_1}\, d\Omega_{\mathbf{q}_2} \ldots d\Omega_{\mathbf{q}_N}\, W_{\mathbf{k}}. \qquad (4)$$

Для вычисления этого среднего используем прием, предложенный в [15],

$$\exp\left(-\gamma\left(\sum_{i=1}^{N} \mathbf{q}_i - \mathbf{k}(0)\right)^2\right) = \frac{1}{(2\pi)^3}\left(\frac{\pi}{\gamma}\right)^{3/2}$$

$$\times \int d^3\mathbf{r} \exp\left(-i\left(\sum_{i=1}^{N} \mathbf{q}_i - \mathbf{k}(0)\right)\mathbf{r}\right) \exp\left(-\frac{\mathbf{r}^2}{4\gamma}\right),$$

где $\gamma = 1/(mN\hbar\Omega)$.

Далее используем значение интеграла

$$\frac{1}{(4\pi)}\int d\Omega_{\mathbf{q}_i} \exp(-i\mathbf{q}_i\mathbf{r}) = \frac{1}{qr}\sin(qr).$$

Дальнейшие выкладки значительно упрощаются, если считать, что все $\mathbf{q}_i$ имеют одинаковую длину $|\mathbf{q}_i| = q$, т. е. в среднем все $\mathbf{q}_i$ одинаковы по величине, но направлены хаотично [12–15]. Тогда получим

$$\overline{W_{\mathbf{k}}} = \frac{|A|^2}{(\pi m N\hbar\Omega)^{3/2}}\frac{1}{(2\pi)^3}\left(\frac{\pi}{\gamma}\right)^{3/2}$$

$$\times \left[\int d^3\mathbf{r} \exp\left(-\frac{\mathbf{r}^2}{4\gamma} + i\mathbf{k}(0)\mathbf{r}\right)\left(\frac{\sin(qr)}{qr}\right)^N\right]$$

$$\times \exp\left(-\frac{1}{n_0}\frac{1}{2\alpha^2\hbar^2}Nq^2\right).$$

Затем воспользуемся формулой

$$\left(\frac{1}{x}\sin x\right)^N \approx \exp\left(-\frac{Nx^2}{6}\right),$$

справедливой при $N \gg 1$ [15], тогда будем иметь

$$\overline{W_{\mathbf{k}}} = \frac{|A|^2}{(\pi m N\hbar\Omega)^{3/2}}\frac{1}{(2\pi)^3}\left(\frac{\pi}{\gamma}\right)^{3/2}$$

$$\times \left[\int d^3\mathbf{r} \exp\left(-\mathbf{r}^2\left(\frac{1}{4\gamma} + \frac{Nq^2}{6}\right) + i\mathbf{k}(0)\mathbf{r}\right)\right]$$

$$\times \exp\left(-\frac{1}{n_0}\frac{1}{2\alpha^2\hbar^2}Nq^2\right).$$

Интеграл в последнем выражении легко вычисляется и равен

$$\int d^3\mathbf{r} \exp\Big(-\mathbf{r}^2\big(1/(4\gamma) + Nq^2/6\big) + i\mathbf{k}(0)\mathbf{r}\Big)$$

$$= \frac{\pi^{3/2}}{\big(1/(4\gamma) + Nq^2/6\big)^{3/2}}$$

$$\times \exp\left(-\frac{k^2(0)}{4\big(1/(4\gamma) + Nq^2/6\big)}\right).$$

В результате после усреднения вероятность примет вид

$$\overline{W_{\mathbf{k}}} = \frac{|A|^2}{\pi^{3/2}\big(mN\hbar\Omega + 2Nq^2/3\big)^{3/2}}$$

$$\times \exp\left(-\frac{\mathbf{k}^2(0)}{mN\hbar\Omega + 2Nq^2/3}\right)$$

$$\times \exp\left(-\frac{1}{n_0}\frac{1}{2\alpha^2\hbar^2}Nq^2\right). \qquad (5)$$

Далее, полная вероятность $\overline{W_N}$ обнаружить центр масс в непрерывном спектре может быть получена интегрированием $\overline{W_{\mathbf{k}}}$ по всем $\mathbf{k}$ с условием, что импульс $\mathbf{k}$ направлен наружу, что соответствует телесному углу 2π; для этого представим элемент интегрирования $d^3\mathbf{k}$ в виде $d^3\mathbf{k} = 2\pi k^2 dk = 2\pi m N\sqrt{2mN(E_c+U_N)}\,dE$. В результате

$$\overline{W_N} = \int \overline{W_\mathbf{k}}\, d^3\mathbf{k} = \int\limits_0^\infty \left(\frac{d\overline{W_N}}{dE_c}\right)_1 dE_c, \qquad (6)$$

где

$$\left(\frac{d\overline{W_N}}{dE_c}\right)_1 = \overline{W_\mathbf{k}}\, 2\pi m N\sqrt{2mN(E_c+U_N)}$$

представляет собой энергетический спектр N-атомных кластеров, который после простых преобразований примет вид

$$\left(\frac{d\overline{W_N}}{dE_c}\right)_1 = |A|^2 \frac{1}{\sqrt{\pi}} \frac{(E_c+U_N)^{1/2}}{\left(\frac{\hbar\Omega}{2}+\frac{2}{3}\frac{q^2}{2m}\right)^{3/2}} \times \exp\left(-\frac{E_c+U_N}{\frac{\hbar\Omega}{2}\frac{2}{3}\frac{q^2}{2m}}\right)\exp\left(-\frac{Nq^2}{2m\Delta}\right).$$

Пренебрегая малой энергией нулевых колебаний $\hbar\Omega/2$ по сравнению с энергией

$$\frac{2}{3}\frac{q^2}{2m},$$

получим спектр в виде

$$\left(\frac{d\overline{W_N}}{dE_c}\right)_1 = |A|^2 \frac{1}{\sqrt{\pi}} \frac{(E_c+U_N)^{1/2}}{\varepsilon^{3/2}} \times \exp\left(-N\frac{3}{2}\frac{\varepsilon}{\Delta} - \frac{E_c+U_N}{\varepsilon}\right), \qquad (7)$$

где

$$\varepsilon = \frac{2}{3}\frac{q^2}{2m}, \qquad U_N = \delta N^{2/3}.$$

Требуя совпадения $\overline{W_N}$ из формулы (6) с ранее полученной в [15] (путем суммирования по всем связанным состояниям $\Phi_n(\mathbf{R})$ центра масс с последующим вычитанием из единицы) формулой

$$\overline{W_N} = \left[1-\left(1+\frac{\varepsilon}{U_N}\right)^{-3/2}\right]\exp\left(-N\frac{3}{2}\frac{\varepsilon}{\Delta}\right), \qquad (8)$$

находим значение $|A|^2$

$$|A|^2 = \sqrt{\pi}\left[1-\left(1+\frac{\varepsilon}{U_N}\right)^{-3/2}\right]\Gamma^{-1}\left(\frac{3}{2}, \frac{U_N}{\varepsilon}\right),$$

где $\Gamma^{-1}(x,y) = 1/\Gamma(x,y)$; $\Gamma(x,y)$ — неполная Γ-функция.

Такая процедура определения $|A|^2$, строго говоря, является последовательной при $U_N/\varepsilon \to 0$ и в нашем случае может быть оправдана также совпадением величины $\overline{W_N}$, вычисленной нами путем интегрирования (6) по состояниям непрерывного спектра, с результатом суммирования (8). Таким образом, получаем энергетический спектр кластеров, состоящих из N атомов, в виде

$$\left(\frac{d\overline{W_N}}{dE_c}\right)_1 = \frac{(E_c+U_N)^{1/2}}{\varepsilon^{3/2}\Gamma\left(\frac{3}{2}, \frac{U_N}{\varepsilon}\right)}\left[1-\left(1+\frac{\varepsilon}{U_N}\right)^{-3/2}\right] \times \exp\left(-\frac{E_c+U_N}{\varepsilon} - N\frac{3}{2}\frac{\varepsilon}{\Delta}\right). \qquad (9)$$

Выражение (2) для волновой функции $\Phi_\mathbf{k}(\mathbf{R})$, строго говоря, соответствует вылету центра масс блока в непрерывный спектр вдали от потолка потенциальной ямы, т.е. с энергией $E_c \gg U_N$ [16, с. 297]. Поэтому соответствующее выражение для спектра (9) должно быть сшито со спектром кластеров при низких энергиях $0 < E_c \ll U_N$. Низкоэнергетическую часть спектра получим следующим образом. Полная вероятность W_N вылета центра масс блока из N атомов в непрерывный спектр была получена в [15] путем суммирования по всем возможным связанным состояниям центра масс блока с последующим вычитанием из единицы, а именно

$$W_N = \left[1-\sum_{n=0}^{k_0}\left|\langle\Phi_n(\mathbf{R})\right|\exp\left(\frac{i}{\hbar}\sum_{i=1}^{N}\mathbf{q}_i\mathbf{R}\right)\left|\Phi_0(\mathbf{R})\rangle\right|^2\right] \times \exp\left(-\frac{1}{n_0}\frac{1}{2\alpha^2\hbar^2}\sum_{i=1}^{N}\mathbf{q}_i^2\right), \qquad (10)$$

где суммирование проводится от $n=0$ до некоторого максимального значения $n=k_0$, соответствующего связанному состоянию с максимальной энергией в потенциальной яме глубиной U_N, т.е. $k_0 = U_N/(\hbar\Omega)$.

После вычисления матричных элементов, суммирования по n и усреднения по векторам $\mathbf{q}_i$ получаем [15] из (10) полную вероятность (8), которую нам удобно представить так:

$$\overline{W_N} = \left[1-\left(1+\frac{\varepsilon}{k_0\hbar\Omega}\right)^{-3/2}\right]\exp\left(-N\frac{3}{2}\frac{\varepsilon}{\Delta}\right).$$

Последнее выражение может быть представлено в виде интеграла от некоторой спектральной функции следующим простым способом. Будем считать k_0 переменной величиной (тогда $\overline{W_N}$ будет функцией от k_0, т.е. $\overline{W_N} = \overline{W_N}(k_0)$) и введем зависимость $k_0 = (E_c+U_N)/(\hbar\Omega)$, тогда

$$\overline{W_N} = \int \frac{d\,\overline{W_N}}{dk_0}\,dk_0 = \int\limits_0^\infty \left(\frac{d\,\overline{W_N}}{dE_c}\right)_2 dE_c,$$

где $(d\overline{W_N}/dE_c)_2$ имеет смысл энергетического спектра кластеров из N атомов, причем

$$\left(\frac{d\,\overline{W_N}}{dE_c}\right)_2 = \frac{d\,\overline{W_N}(k_0)}{dk_0}\frac{dk_0}{dE_c}.$$

После дифференцирования и простых преобразований получаем энергетический спектр кластеров, состоящих из N атомов, в виде

$$\left(\frac{d\overline{W_N}}{dE_c}\right)_2 = \frac{3}{2}\left[1+\frac{E_c+U_N}{\varepsilon}\right]^{-5/2} \times \frac{(E_c+U_N)^{1/2}}{\varepsilon^{3/2}} \exp\left(-N\frac{3}{2}\frac{\varepsilon}{\Delta}\right). \quad (11)$$

Как следует из способа получения этого выражения, формула (11) может быть интерпретирована как спектр кластеров лишь в непосредственной близости к границе между непрерывными и дискретными состояниями, т.е. при $E_c \ll U_N$. Для получения спектра во всем диапазоне изменения E_c необходимо „сшить“ низкоэнергетическую (11) и высокоэнергетическую (9) части спектра. Представим искомый результат сшивки $d\overline{W_N}/dE_c$ в следующем виде:

$$\frac{d\overline{W_N}}{dE_c} = f(E_c)\,|C|^2\left(\frac{d\overline{W_N}}{dE_c}\right)_2 + \left[1-f(E_c)\right]\left(\frac{d\overline{W_N}}{dE_c}\right)_1, \quad (12)$$

где функция $f(E_c)$ должна быть такой, что $f(E_c)\to 1$ при $E_c \ll U_N$ (т.е. при $E_c \to 0$), и $f(E_c)\to 0$ при $E_c \gg U_N$ (т.е. при $E_c\to\infty$).

Тогда при изменении E_c от 0 до ∞ полный спектр $d\overline{W_N}/dE_c$ плавно переходит от $(d\overline{W_N}/dE_c)_2$ в спектр $(d\overline{W_N}/dE_c)_1$. Мы выбрали следующую, удовлетворяющую указанным условиям функцию $f(E_c)$: $f(E_c) = \exp[-E_c^2/\varepsilon^2]$. Проведение такой процедуры, очевидно, нарушает условие нормировки, поэтому в (12) введена нормировочная константа C так, что полный спектр $d\overline{W_N}/dE_c$ нормирован на вероятность $\overline{W_N}$ вылета кластера из N атомов, т.е. $\overline{W_N} = \int\limits_0^\infty \left(d\overline{W_N}/dE_c\right)dE_c$, тогда получим выражение для численного расчета $|C|^2$

$$|C|^2 = \left(\int\limits_0^\infty f(E_c)\left(d\overline{W_N}/dE_c\right)_1 dE_c\right)\Big/\left(\int\limits_0^\infty f(E_c)\left(d\overline{W_N}/dE_c\right)_2 dE_c\right).$$

Зарядовый состав

Для получения энергетических спектров кластеров с учетом их зарядового состояния воспользуемся физическими представлениями [12–15], согласно которым процесс формирования зарядового состава является составной частью механизма распыления. В этом случае вероятность $\overline{W_N^Q}$ вылета кластера с числом атомов N и зарядом Qe (e — заряд электрона), согласно [15], определяется произведением

$$\overline{W_N^Q} = \overline{W_N}\,P_N(Q), \quad (13)$$

где, согласно [15], $P_N(Q)$ — вероятность N-атомному кластеру иметь после вылета заряда Qe описывается стандарной формулой для вероятности флуктуаций

$$P_N(Q) = \frac{1}{D_N}\exp\left\{-\frac{1}{2}\frac{(Q-Q_0)^2}{\overline{(\Delta Q_N)^2}}\right\}, \quad (14)$$

$$\overline{(\Delta Q_N)^2} = \frac{3^{1/3}}{\pi^{4/3}}\frac{m_e\Theta}{\hbar^2}\left(\frac{V}{N}\right)^{2/3}\gamma^{1/3}N, \quad (15)$$

где нормирующий множитель D_N определяется путем суммирования по всем возможным значениям $Q = 0, \pm1, \pm2, \ldots$; m_e — масса электрона зоны проводимости; V — объем кластера; Θ — температура мишени; γ — валентность атомов металла; $\overline{(\Delta Q_N)^2}$ — средний квадрат отклонений заряда кластера от некоторого равновесного значения Q_0.

Согласно [14,15], равенство равновесного заряда нулю есть следствие предположения о совпадении между собой уровней Ферми в кластере и металле, если это не выполнено, то будет наблюдаться асимметрия между отрицательно и положительно заряженными кластерами. Именно это показывает эксперимент [8], поэтому мы предполагаем, что равновесный заряд Q_0 не равен нулю. Вычислим равновесный заряд Q_0 в зависимости от разности между энергиями Ферми $\Delta\mu$ в металле и в кластере. Зная число электронов N_e внутри сферы Ферми [17] радиуса μ

$$N_e = N\gamma = \frac{V(2m)_e^{3/2}}{3\pi^2\hbar^3}\mu^{3/2},$$

получим выражение для равновесного заряда $Q_0 e$

$$Q_0 = \Delta N_e = 2^{1/2}\frac{Vm_e^{3/2}}{\pi^2\hbar^3}\sqrt{\mu}\,\Delta\mu = \frac{3^{1/3}}{\pi^{4/3}}\frac{m_e}{\hbar^2}\left(\frac{V}{N}\right)^{2/3}\gamma^{1/3}N\Delta\mu. \quad (16)$$

Выражение для $\overline{(\Delta Q_N)^2}$ в знаменателе показателя экспоненты в формуле (14) нуждается в некоторых комментариях. Стремление $\overline{(\Delta Q_N)^2}$ к нулю при температуре Θ, стремящейся к нулю, есть следствие применимости статистики Ферми к системам с макроскопическим числом частиц или так называемого термодинамического предела ($N\to\infty$, $V\to\infty$, причем $N/V = \mathrm{const}$). В нашем же случае незначительного (по макроскопическим масштабам, хотя и много большего единицы) числа частиц $N_e = N\gamma$ среднеквадратичная флуктуация не должна строго обращаться в нуль при равных нулю температурах из-за необходимости учета квантовых флуктуаций. Соответствующую поправку к $\overline{(\Delta Q_N)^2}$ в знаменателе показателя экспоненты в формуле (14) будем обозначать β. В результате вероятность N-атомному кластеру иметь после вылета заряд Qe будем описывать формулой

$$P_N(Q) = \frac{1}{D_N}\exp\left\{-\frac{1}{2}\frac{(Q-Q_0)^2}{\overline{(\Delta Q_N)^2}+\beta}\right\}, \quad (17)$$

где β — параметр, соответствующий квантовым флуктуациям заряда при нулевой температуре мишени.

Тогда, согласно (13), получаем полную вероятность иметь вылетевшему кластеру из N атомов заряд Qe в виде

$$\overline{W_N^Q} = \left[1 - \left(1 + \frac{\varepsilon}{U_N}\right)^{-3/2}\right] \exp\left(-N\,\frac{3}{2}\,\frac{\varepsilon}{\Delta}\right)$$
$$\times \frac{1}{D_N} \exp\left\{-\frac{1}{2}\,\frac{(Q-Q_0)^2}{(\Delta Q_N)^2+\beta}\right\}. \qquad (18)$$

Таким образом, для получения энергетического спектра $(d\overline{W_N^Q}/dE_c)$ кластеров с числом атомов N и зарядом Qe необходимо умножить спектр $(d\overline{W_N}/dE_c)$ из (12) на $P_N(Q)$ из (17). В результате получаем окончательное выражение для энергетического спектра кластеров из N атомов и имеющих заряд Qe

$$\frac{d\overline{W_N^Q}}{dE_c} = \left\{ f(E_c)|C|^2\left(\frac{d\overline{W_N^Q}}{dE_c}\right)_2 + \left[1 - f(E_c)\right]\left(\frac{d\overline{W_N^Q}}{dE_c}\right)_1 \right\}$$
$$\times \frac{1}{D_N} \exp\left\{-\frac{1}{2}\,\frac{(Q-Q_0)^2}{(\Delta Q_N)^2+\beta}\right\}. \qquad (19)$$

Необходимо отметить, что энергетические спектры (как полные вероятности $\overline{W_N^Q}$; ср. [15] и эксперимент [8]) нейтральных кластеров слабо зависят от температуры мишени, тогда как спектры заряженных кластеров существенно зависят от температуры мишени, однако с ростом температуры они приближаются к масс-спектрам нейтральных кластеров.

Сравнение с экспериментом

Если проинтегрировать полный спектр (19) по всем возможным значениям энергии кластера E_c, то результатом будет полная вероятность $\overline{W_N^Q}$ вылета кластера с числом атомов N и зарядом Qe. В этом смысле значения $d\,\overline{W_N^Q}/dE_c$ в формуле (19) соответствуют абсолютным значениям спектра. На эксперименте обычно проще измерять относительные энергетические спектры I_N^Q кластеров с различным числом атомов. Как правило, выбирают нормированные на единицу при $E_c = 0$ относительные энергетические спектры

$$I_N^Q = \left(d\,\overline{W_N^Q}/dE_c\right)/\left(d\,\overline{W_N^Q}/dE_c\right)\Big|_{E_c=0}.$$

Отметим, что такая нормировка, удобная при проведении экспериментов, несколько „обедняет“ получаемую информацию, в частности, зависимость от температуры мишени, согласно (19), исчезает. На рис. 1 и 2 приведены энергетические спектры однозарядных I_7^{+1} кластеров Nb_N и Ta_N с числом атомов в их составе $N = 7$ при бомбардировке мишеней из ниобия и тантала однозарядными ионами золота Au^{-1} при энергии 6 keV. На рис. 3 приведены относительные энергетические спектры I_N^{+1} однозарядных кластеров Fe_N с числом атомов в их

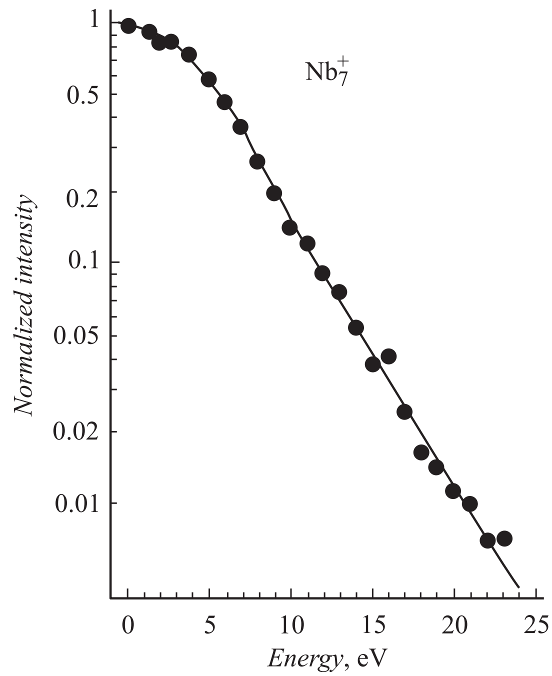

Рис. 1. Относительный энергетический спектр (нормированная интенсивность) I_7^1 однозарядных кластеров Nb_7^+ с числом атомов в их составе $N = 7$ при бомбардировке мишени из ниобия однозарядными ионами Au^{-1} при энергии 6 keV: кривая — расчет при значении варьируемого параметра $q = 270$ a.u., • — эксперимент [7].

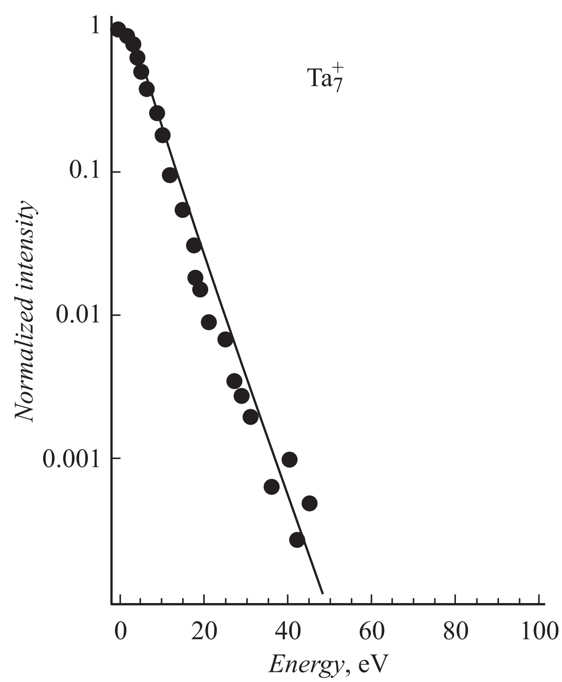

Рис. 2. Относительный энергетический спектр (нормированная интенсивность) I_7^1 однозарядных кластеров Ta_7^{+1} с числом атомов в их составе $N = 7$ при бомбардировке мишени из тантала однозарядными ионами Au^{-1} при энергии 6 keV: кривая — расчет при значении варьируемого параметра $q = 420$ a.u., • — эксперимент [19].

составе $N = 7$, 8, 9 при бомбардировке мишени из железа однозарядными ионами Xe^{+1} и энергии 8.5 keV. При расчетах с целью ограничения числа подгоночных параметров считалось, что $\Delta = \delta$ и их общее значение, следуя [15], выбиралось равным энергии сублимации. Таким образом, для ниобия $\Delta = \delta = 7.47$ eV (энергия сублимации [18] ниобия), значение варьируемого параметра $q = 270$ a.u. (атомные единицы: $\hbar = m_e = e = 1$); для тантала: $\Delta = \delta = 8.1$ eV (энергия сублимации [18] тантала), $q = 420$ a.u.; и для железа: $\Delta = \delta = 4.29$ eV (энергия сублимации [18] железа), $q = 200$ a.u. Для сравнения на рис. 1–3 приведены также экспериментальные данные [7,19,20]. Рис. 3 приведен в подтверждение следующей из (19) слабой зависимости относительных энергетических спектров от числа частиц в кластере.

На рис. 4 и 5 приведены зависимости от температуры мишени Θ выхода (18) однозарядных положительных и отрицательных кластеров Ag_7, отнесенного к выходу тех же кластеров при температуре мишени $\Theta = 156°$C при бомбардировке мишени из серебра однозарядными ионами Xe^{+1} при энергии 8.5 и 12.5 keV соответственно, т.е. зависимость от температуры величин $\overline{W_N^Q}(\Theta)/\overline{W_N^Q}\,(156°\mathrm{C})$, где $N = 7$ и $Q = \pm 1$ соответственно. При расчетах считалось, что разница между энергиями Ферми в металле и в кластере из семи атомов $\Delta\mu = 0.08$ eV и параметр $\beta = 0.13$. Для сравнения на рис. 4 и 5 приведены нормированные единым образом

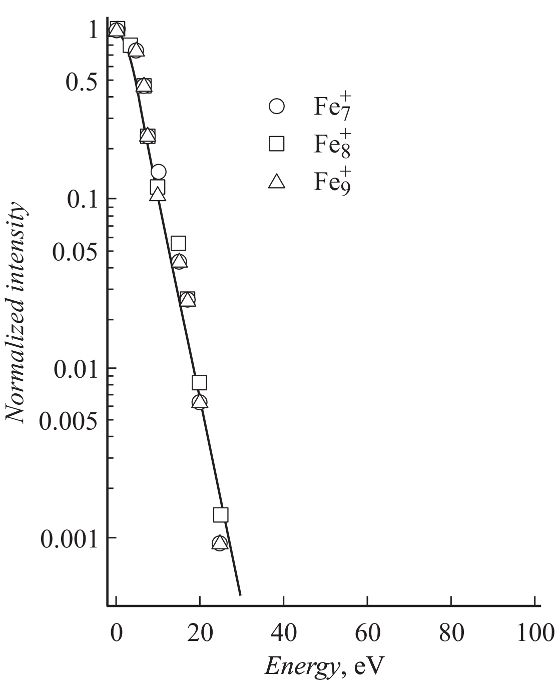

Рис. 3. Относительные энергетические спектры I_N^1 однозарядных кластеров железа Fe_N^1 с числом атомов в их составе $N = 7–9$ при бомбардировке мишени из железа однозарядными ионами Xe^{+1} при энергии 8.5 keV: линия — результат слияния в логарифмическом масштабе трех линий соответствующих расчетным значениям трех величин I_N^1 для $N = 7–9$ при значении варьируемого параметра $q = 200$ a.u., ◯, □, △ — эксперимент [20].

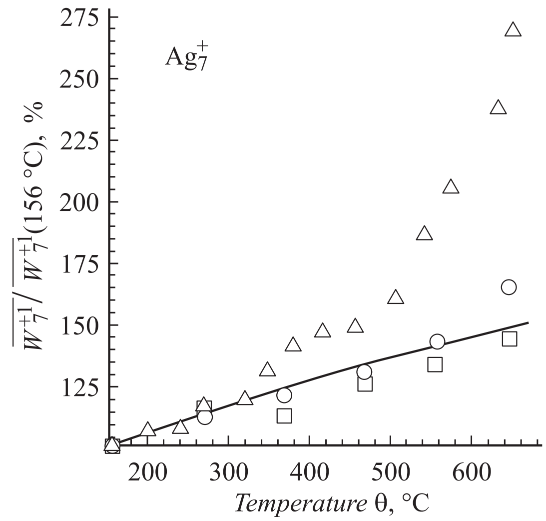

Рис. 4. Относительная температурная зависимость однозарядных кластеров Ag_7^{+1} с числом атомов в их составе $N = 7$ при бомбардировке мишени из серебра однозарядными ионами Xe^{+1} при энергии 8.5 keV: линия — результаты расчета; ◯, □ и △ — в соответствии с обозначениями [8] три группы результатов измерений одной и той же температурной зависимости в экспериментах [8].

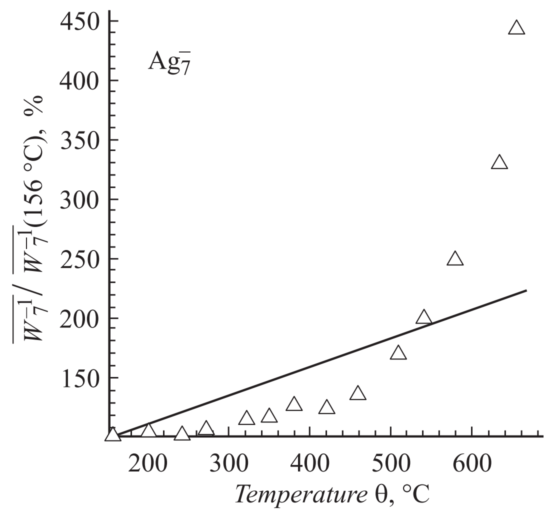

Рис. 5. Относительная температурная зависимость однозарядных кластеров Ag_7^{-1} с числом атомов в их составе $N = 7$ при бомбардировке мишени из серебра однозарядными ионами Xe^+ при энергии 12.5 keV, △ — эксперимент [8].

результаты экспериментов [8]. Причем в [8] для положительно заряженных кластеров приведены три группы результатов, полученных на различных установках и представленных нами на рис. 4, тогда как измерение температурной зависимости для отрицательно заряженных кластеров проводилось лишь на одной установке и представлено лишь одной группой результатов на рис. 5. Следует отметить значительный разброс в результатах измерений, что позволяет заключить, что теоретические результаты не только качественно, но и удовлетворительно количественно согласуются с экспериментом [8], в котором исследовались температурные зависимости полного выхода нейтральных, а также положительно и отрицательно заряженных кластеров.

Авторы благодарны Российскому фонду фундаментальных исследований и Администрации Архангельской области за финансовую поддержку работы (грант № 02-02-97503-р2002север).

Список литературы

[1] Фундаментальные и прикладные аспекты распыления твердых тел. Сб. статей. Пер. с англ. Составитель Е.С. Машкова. М.: Мир, 1989. 399 с.
[2] *Andersen H.H.K.Dan.* // Vidensk. Selsk. Mat. Fys. Medd. 1993. Vol. 43. P. 127.
[3] *Urbassek H.M., Hofer W.O.K.Dan* // Vidensk. Selsk. Mat. Fys. Medd. 1993. Vol. 43. P. 97.
[4] *Баранов И.А., Мартыненко Ю.В., Цепелевич С.О., Явлинский Ю.Н.* // УФН. 1988. Т. 156. С. 478.
[5] Распыление под действием бомбардировки частицами / Под ред. Р. Бериша, К. Виттмака. Вып. 3. М.: Мир, 1998. 551 с.
[6] *Colla Th.J., Urbassek H.M., Wucher A.* et al. // Nucl. Instrum. Meth. 1998. Vol. B 143. P. 284.
[7] *Belykh S.F., Habets B., Rasulev U.Kh.* et al. // Nucl. Instrum. Meth. 2000. Vol. B 164–165. P. 809.
[8] *Staudt C., Heinrich R., Mazarov P.* et al. // Nucl. Instrum. Meth. 2000. Vol. B 164–165. P. 715.
[9] *Kissel R., Urbussek H.M.* // Nucl. Instrum. Meth. 2001. Vol. B 180. P. 293.
[10] *Belykh S.F., Palitsin V.V., Veryovkin I.V.* et al. // Nucl. Instrum. Meth. 2003. Vol. B 203. P. 164.
[11] *Morozov S.N., Rasulev U.Kh.* // Nucl. Instrum. Meth. 2003. Vol. B 203. P. 192.
[12] *Матвеев В.И., Хабибуллаев П.К.* // ДАН. 1998. Т. 362. С. 191.
[13] *Belykh S.F., Matveev V.I., Veryovkin I.V.* et al. // Nucl. Instrum. Meth. 1999. Vol. B 155. P. 409.
[14] *Матвеев В.И.* // ЖТФ. 2000. Т. 70. Вып. 5. С. 10–15.
[15] *Матвеев В.И.* // ЖТФ. 2002. Т. 72. Вып. 6. С. 115.
[16] *Гольдбергер М., Ватсон К.* // Теория столкновений. М.: Мир, 1967. 823 с.
[17] *Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М.* Статическая физика. Ч. 1. М.: Наука, 1964. 567 с.
[18] *Киттель Ч.* Введение в физику твердого тела. М.: Наука, 1978. 792 с.
[19] *Belykh S.F., Rasulev U.Kh., Samartsev A.V., Veryovkin I.V.* // Nucl. Instrum. Meth. 1998. Vol. B 136–138. P. 773.
[20] *Bekkerman A.D., Dzhemilev N.Kh., Verkhoturov S.V.* et al. // Microchim. Acta. 1998. Vol. 15. P. 371.