

ОБРАЗОВАНИЕ КЛАСТЕРОВ ПРИ ИОННОМ РАСПЫЛЕНИИ: СИНЕРГЕТИКА И КОМБИНАТОРНЫЙ МЕХАНИЗМ CLUSTER FORMATION UNDER ION SPUTTERING: SYNERGETICS AND COMBINATORIC MECHANISM

С.Е.Максимов¹, Б.Л.Оксенгендлер¹, Х.Б.Ашуров¹, Н.Ю.Тураев¹, Ш.Т.Хожиев^{1,2}

S.E.Maksimov¹, B.L.Oksengendler¹, Kh.B.Ashurov¹, N.Yu.Turaev¹, Sh.T.Khozhiev^{1,2}

¹Институт ионно-плазменных и лазерных технологий им.У.А.Арифова Академии Наук Республики Узбекистан; ул.Дурмон Йули, 33, Академгородок, 100125 Ташкент;

e-mail: maksimov_s@yahoo.com Telegram: +998-93-510-92-06

² Институт биоорганической химии имени А.С.Садыкова Академии Наук Республики Узбекистан; проспект Мирзо Улугбека, 83, 100125 Ташкент.

Abstract. The brief analysis of the models and mechanisms of cluster formation under ion sputtering of surfaces is presented. A qualitative theoretical description of the formation of sputtered heterogeneous clusters is presented within the framework of synergetic concepts, taking into account the combinatorial nature of the process.

Keywords: cluster, ion sputtering, mass distribution, fragmentation, combinatorial mechanism, synergetics.

Существующие основные модели образования кластеров под действием ионной бомбардировки не могут одновременно корректно описать и экспериментальные масс-распределения распыленных кластеров, которые для гомоядерных частиц в зависимости от количества атомов n в них описываются степенным законом [1]:

$$Y(n) \sim n^{\delta}, \quad (1)$$

причём $\delta=4\div 9$ и зависит от полного коэффициента распыления, и энергоспектры распыленных кластеров. С другой стороны, распыление материалов под действием ионной бомбардировки характеризуется участием в процессах многих частиц, нелинейным характером их взаимодействия и сильной неравновесностью процессов. Следовательно, базой анализа распыления согласно [2] может служить синергетика. Показано [2], что, моделируя распыление атомов с помощью набора «реакций» типа



где A – атомы поверхности, X – распыляемые атомы, n и m – целые числа, из основного кинетического уравнения в «одношаговом приближении» можно получить распределение вероятности числа распыленных атомов (N):

$$P_S(N) = P_S(0) \prod_{Z=1}^N \frac{t^+(Z-1)}{t^-(Z)} \quad (3),$$

где $t^+(Z-1)$ и $t^-(Z)$ – вероятности одноатомного рождения и гибели соответственно ($Z-1$) и (Z) чисел заполнения. При сдвиге равновесий реакций (2) $P_S(N)$ имеет непурассоновский характер (в соответствии с экспериментом). Для ниспадающего участка (13) при больших N :

$$-\partial \ln P_S(N) / \partial \ln N \equiv \alpha > 1 \quad (4)$$

в согласии с экспериментальным распределением выходов (1). Подбором констант прямых и обратных реакций (2) синергетический подход позволяет описать и интегральное, и кластерное распыление.

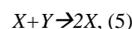
Использованный в [2] метод мастер-уравнения, успешный в случае небольшого числа компонентов квазихимического процесса, в техническом отношении резко усложняется при большем числе измерений. В случае гетероядерных кластеров, где будут как минимум три компонента (X , Y и XY), эта задача решаема, но на данный момент для существующих экспериментальных данных это вряд ли целесообразно. В этой связи представляется гораздо важнее рассмотреть принципиальную схему совокупности квазихимических реакций в общем формализме термодинамики необратимых процессов открытых систем с выраженной неравновесностью, чтобы выявить пути возможной самоорганизации (уменьшения энтропии). Для этого изучают следующие базовые элементы системы:

- все процессы описываются совокупностью химических реакций, по крайней мере одна из которых – автокаталитическая;
- кроме того, эта реакция должна быть необратимой (существенно неравновесной).

Выделим следующие положения:

1) Путь имеет место $i \gg 1$ химических реакций, моделирующих процесс.

2) Пусть «узким горлом» является автокаталитическая реакция, причём необратимая (обратной реакции нет):



причём сами X и Y – это компоненты системы X, Y, m . Далее, есть реакции до $i=j$ и после $i>j$, т.е. (5) – промежуточная, но самая медленная реакция.

Используется условие устойчивости химической системы, где идёт множество реакций ($i \gg 1$). Оно имеет вид [3]:

$$\delta_x \sigma = \frac{1}{T} \sum_{i=1}^i \delta v_i * \delta A_i \quad (6)$$

Здесь величина $\delta_x \sigma$ называется избыточной продукцией энтропии при флуктуации в системе компонента X [3], $\delta_x v$ – флуктуации скорости всех реакций, A_i – химическое средство реакции. Мы оставляем только одну реакцию из всей их последовательности. Этого достаточно [3], чтобы общее явление было синергетическим.

Проанализируем знак правой части (6) при флуктуации δX компонента X в реакции (5) (необратимый автокатализ). Имеем:

$$v \sim X * Y; \quad A \sim \ln \frac{Y}{X} \quad (7)$$

Тогда

$$\delta v \sim (\delta X) * Y; \quad \delta A = \delta \left[\ln \frac{Y}{X} \right] = -\frac{Y}{X} \delta X \quad (8)$$

Таким образом

$$\delta v \delta A \sim -\frac{Y}{X} (\delta X)^2 < 0 \quad (9)$$

Отрицательность означает неустойчивость исходного состояния по отношению к флуктуации компоненты X , т.е. δX . Поэтому из условия (6)

$$\delta_x \sigma < 0. \quad (10)$$

Это означает, что избыток прироста энтропии отрицателен, т.е. имеет место упорядочение. Далее, упорядочение всегда ведёт к отклонению от Пуассоновского распределения [3]. Таким образом, если реакция (6) является «узким горлом», а остальные более быстрые реакции зависимы, то наблюдаемый характер распределения будет иметь вид, отличный от распределения Пуассона, что для интенсивностей выходов распыленных гетероядерных кластеров наблюдается экспериментально.

[1] Wucher A. Sputtering: Experiment. //Matematisk-fysiske Meddelelser. Det Kongelige Danske Videnskabernes Selskab. Copenhagen, 2006. V.52. P.405-432.

[2] Maksimov S.E., Oksengendler B.L., Turaev N.Yu. Synergetic Approach to Studying Material Sputtering under Ion Bombardment. // Journal of Surface Investigation. X-ray, Synchrotron and Neutron Techniques. 2013. V.7. №2. P.333-338. <https://doi.org/10.1134/S1027451013020407>

[3] Николис Г., Пригожин И.Р. Самоорганизация в неравновесных системах. М.: «Мир». 1979.

¹Arifov Institute of ion plasma and laser technologies, Academy of Sciences of the Republic of Uzbekistan, Tashkent, Dormon Yuli str., 33, 100125, Uzbekistan

²Institute of bioorganic chemistry, Academy of Sciences of the Republic of Uzbekistan, Tashkent, Mirzo Ulugbek str., 83, 100125, Uzbekistan