

ИОН-ПЛАЗМА ВА ЛАЗЕР ТЕХНОЛОГИЯЛАРИ ИНСТИТУТИ
ЎЗУРИДАГИ ИЛМИЙ ДАРАЖАЛАР БЕРУВЧИ
DSc.02/30.12.2019.FM.65.01 РАҚАМЛИ ИЛМИЙ КЕНГАШ

ИОН-ПЛАЗМА ВА ЛАЗЕР ТЕХНОЛОГИЯЛАРИ ИНСТИТУТИ

МАКСИМОВ СЕРГЕЙ ЕВЛАНТИЕВИЧ

СИРТДАН ИОН БОМБАРДИМОНИ ТАЪСИРИДА ЧАНГЛАТИЛГАН
КЛАСТЕРЛИ ИОНЛАРНИНГ ФУНДАМЕНТАЛ ХОССАЛАРИ

01.04.04–Физик электроника

ФИЗИКА-МАТЕМАТИКА ФАНЛАРИ ДОКТОРИ (DSc)
ДИССЕРТАЦИЯСИ АВТОРЕФЕРАТИ

ТОШКЕНТ–2020

Докторлик (DSc) диссертацияси автореферати мундарижаси

Оглавление автореферата докторской (DSc) диссертации

Contentsof the Doctoral (DSc) Dissertation Abstract

Максимов Сергей Евлантиевич

Сиртдан ион бомбардимони таъсирида чанглатилган кластерли
ионларнинг фундаментал хоссалари..... 5

Максимов Сергей Евлантиевич

Фундаментальные свойства кластерных ионов,
распыленных с поверхности под действием ионной
бомбардировки..... 37

Maksimov Sergei Evlantieich

Fundamental properties cluster ions,
sputtering from a surface under the influence of the ionic
Bombardments..... 70

Эълон қилинган ишлар рўйхати

Список опубликованных работ
List of published
works..... 76

ИОН-ПЛАЗМА ВА ЛАЗЕР ТЕХНОЛОГИЯЛАРИ ИНСТИТУТИ
ЎУЗУРИДАГИ ИЛМИЙ ДАРАЖАЛАР БЕРУВЧИ
DSc.02/30.12.2019.FM.65.01 РАҚАМЛИ ИЛМИЙ КЕНГАШ
ИОН-ПЛАЗМА ВА ЛАЗЕР ТЕХНОЛОГИЯЛАРИ ИНСТИТУТИ

МАКСИМОВ СЕРГЕЙ ЕВЛАНТИЕВИЧ

СИРТДАН ИОН БОМБАРДИМОНИ ТАЪСИРИДА ЧАНГЛАТИЛГАН
КЛАСТЕРЛИ ИОНЛАРНИНГ ФУНДАМЕНТАЛ ХОССАЛАРИ

01.04.04–Физик электроника

ФИЗИКА-МАТЕМАТИКА ФАНЛАРИ ДОКТОРИ (DSc)
ДИССЕРТАЦИЯСИ АВТОРЕФЕРАТИ

ТОШКЕНТ–2020

**Докторлик (DSc) диссертацияси мавзуси Ўзбекистон Республикаси Вазирлар
Маҳкамаси ҳузуридаги Олий аттестация комиссиясида B2020.3.DSc/FM138 рақам
билан рўйхатга олинган.**

Диссертация Ион-плазма ва лазер технологиялари институтида бажарилган.

Диссертация автореферати уч тилда (ўзбек, рус, инглиз (резюме)) Илмий кенгаш веб-саҳифасида <http://iplt.uz/> ҳамда «Ziynet» Ахборот-таълим порталида (www.ziynet.uz) жойлаштирилган.

Илмий маслаҳатчи:

Ашуров Хатам Бахронович

техника фанлари доктори, профессор

Расмий оппонентлар:

Кремков Михаил Витальевич

физика-математика фанлари доктори, профессор

Умирзаков Болтахожа Ерматович

физика-математика фанлари доктори, профессор

Усманов Дилшадбек Турсунбаевич

физика-математика фанлари доктори, катта и.х.

Етакчи ташкилот:

Ўзбекистон Миллий Университети

Диссертация ҳимояси Ион-плазма ва лазер технологиялари институти ҳузуридаги DSc.02/30.12.2019.FM.65.01 рақамли Илмий кенгашнинг 2020 йил «03» 12 соат 14⁰⁰ даги мажлисида бўлиб ўтади (Манзил:100125, Тошкент ш., Дўрмон йўли кўчаси, 33-уй. Тел./факс: (99871)262-32-54, e-mail:info@iplt.uz, Ион-плазма ва лазер технологиялари институти).

Диссертация билан Ион-плазма ва лазер технологиялари институтининг Ахборот-ресурс марказида танишиш мумкин (4 рақами билан рўйхатга олинган). Манзил:100125, Тошкент ш., Дўрмон йўли кўчаси, 33-уй. Тел./факс:(99871)262-31-69.

Диссертация автореферати 2020 йил «26» 11 куни тарқатилди.
(2020 йил «26» 11 даги 4 рақамли реестр баённомаси).



С.А.Бахрамов

Илмий даражалар берувчи илмий кенгаш раиси ўринбосори, т.ф.д., профессор

И.Д. Ядгаров

Илмий даражалар берувчи илмий кенгаш илмий котиби, ф.-м.ф.д., катта и.х.

Ш.Д. Пайзиев

Илмий даражалар берувчи илмий кенгаш қошидаги илмий семинар раиси ф.-м.ф.д., катта и.х.

КИРИШ (докторлик диссертациясининг (DSc) аннотацияси)

Докторлик мавзусининг долзарблиги ва зарурати. Қаттиқ жисм сиртини тезлаштирилган ионлар билан бомбардимон қилинганда нишондан нейтрал ва зарядланган атомларнинг ҳамда чангланаётган жисмнинг алоҳида кўп атомли фрагментлари — кластерларнинг эмиссиясига олиб келади. Сўнги йилларда фундаментал тадқиқотлар ҳамда амалий масалаларнинг кенг доираси нуктаи назаридан, алоҳида атом ва қаттиқ жисм орасидаги ўтиш ҳолатида пайдо бўладиган кластерлар ва нанозарраларнинг табиати ва хоссаларини ўрганишга қизиқиш анча ўсгани кузатилмоқда ва долзарб масалалардан бири бўлиб қолмоқда. Кластерлар битта ёки икки ёки ундан кўп ҳар хил кимёвий элемент атомларидан шаклланиши, уларнинг ўлчами эса бир нечта атомдан минг атомгача ўзгариши мумкин. Сўнги ўлчам эффектлари электрон, оптик, магнит, кимёвий ва бошқа хоссаларга олиб келадики, бу хоссалар ўша материалнинг ҳажми катта бўлгандаги хоссаларидан жуда катта фарқ қилади. Назарий нуктаи назардан, кластерлардан атом масштабидан ҳажмий материалга ўтишнинг турли фундаментал физик аспектларини тадқиқ қилишнинг модели сифатида фойдаланилади.

Материалларга ион билан ишлов бериш кўплаб тадқиқотчилик ва саноатчилик мақсадлари учун кенг қўлланиладиган услублардан бири ҳисоланади, бунда атомли ва молекулали кластерлар сўнги ўн йилликда сезиларли эътиборни тортди. Айниқса, кластерли ион дасталари иккиламчи-ион масс спектроскопияси (ИИМС) масалаларини ечишда ҳамда органик бирикмаларни ва аралашмаларнинг чуқурлик бўйича тақсимотини юқори аниқликда олишда муҳим рол ўйнайди.

Материалларни тезлаштирилган ионлар билан чанглантириш кластерлар генерацияси учун бошқа услубларга нисбатан алоҳида ўрин тутаети, бунда чанглантириладиган материалларни ва бомбардимон қиладиган зарраларни танлаб, имкони борица гомо- ва гетероядероли кластерларни олиш мумкин, бир қатор ҳолатларда қийин ёки бошқа услублар билан умуман синтез қилиб бўлмайдиган, зарядли ва жунбушга келган кластерларнинг фундаментал хоссаларини, бир экспериментда ҳосил бўлиш жараёнларини тадқиқ қилиш мумкин, нега деганда уларни жунбушга келтириш, ионлаштириш ва фрагментациялаш учун қўшимча воситалар керак бўлмайди. Аммо, бу услубнинг ноёб бўлишига қарамасдан, шу вақтгача ионлар бомбардимони билан чанглантирилган кластерларнинг муҳим хоссаларини аниқлайдиган комплекс услублар мавжуд бўлмаганлиги сабабли, кластерларнинг ҳосил бўлиш жараёнлари табиати ва эмиссияси хоссаларини аниқлашда шу вақтгача кўп нарсалар ноаниқ бўлиб қолаётти. Шубҳасиз, янги перспектив кластерларни излаш ва уларнинг фундаментал хоссаларини тадқиқ қилиш нафақат физик электроника ва кичик

зарраларнинг физикаси, шу билан бирга замонавий нанотехнология ва материалшуносликнинг долбзарб илмий ва амалий вазифалари ҳисобланади.

Ушбу диссертация иши Ўзбекистон Республикаси Президентининг 2017 йил 07 февралдаги "Ўзбекистон Республикасини янада ривожлантириш бўйича ҳаракатлар Стратегияси тўғрисида"ги ПФ-4947-сонли Фармонида белгиланган вазифаларга мос келади¹. Диссертация бўйича олиб борилган тадқиқотлар 2015-йил 15-декабрда қабул қилинган "2011-2015 йилларда Ўзбекистон Республикаси саноатини ривожлантиришнинг устувор йўналишлари тўғрисида" ги ПП-1442 сонли Президент Фармонини, 2017 йил 17 февралдаги "2017-2021-йилларда Ўзбекистон Республикасини ривожланишининг бешта устувор йўналиши бўйича ҳаракатлар стратегияси" ва 2017 йил 17 февралдаги "Фанлар академияси фаолиятини янада такомиллаштириш, илмий-тадқиқот ишларини ташкил этиш, бошқариш ва молиялаштириш тўғрисида"ги П-2789-сонли қарорини, шунингдек, ушбу соҳада қабул қилинган бошқа ҳуқуқий ҳужжатларга киритилган вазифаларни бажаришда маълум даражада хизмат қилади.

Тадқиқотнинг республика фан ва технологияларни ривожлантиришнинг устувор йўналишларига мослиги. Ушбу илмий тадқиқот ишлари Ўзбекистон Республикаси Фан ва технологияларни ривожлантиришнинг устувор йўналишларига мувофиқ амалга оширилди: II «Физика, астрономия, энергетика ва машинасозлик», III «Энергетика, энергоресурс тежамкорлик, транспорт, машиносозлик ва асбобсозлик, замонавий электроника, микроэлектроника, фотоника, электрон асбобсозликнинг ривожланиши».

Диссертация мавзуси бўйича хорижий илмий-тадқиқотлар шарҳи.

Ионлар бомбардимони таъсирида кластер зарраларини ҳосил бўлиши ва эмиссияси соҳасидаги, ҳамда кластерларнинг ҳар хил материаллар (қаттиқ жисм сирти, плёнкалар, адсорбатлар, органик ва биоорганик материаллар) билан ўзаро таъсири соҳасидаги илмий тадқиқотлар дунёнинг етакчи илмий марказларида олиб борилаяпти, жумладан: Аргон миллий лабораторияси (АҚШ), Пенсилвания давлат университети (АҚШ), Техас А&М университети (АҚШ), Кайзерслаутерн университети (ГФР), Дуйсбург университети (ГФР), Росток университети (ГФР), Киото университети (Япония), Япония атом энергияси илмий-тадқиқот институти (Япония), Paris Sud университети (Франция), Catholique de Louvain университети (Бельгия), Технион – Исроил Технология институти (Исроил), Ухан университети (ХХР), Хельсинки университети (Финляндия), Jagiellonian университети (Польша), Москва давлат университети (Россия), Москва мухандислик физикаси институти қошидаги Ядро физикаси илмий-тадқиқот институти (Россия), Шимолий (Арктика) Федерал университети (Россия), Ион-плазма ва лазер технологиялари институти (Ўзбекистон).

¹ 2017-2021 йилларда Ўзбекистон Республикасини ривожлантиришнинг бешта устувор йўналиши бўйича ҳаракатлар стратегияси / Ўзбекистон Республикаси Президентининг 2017 йил 7 февралдаги ПФ-4947-сонли Фармонида 1-илова, п. 3.2.

Ҳозирги даврда бу муаммо устида бутун дунёда кўплаб олимлар қизгин иш олиб бораяпти, жумладан қуйидаги шу ишларни амалга ошираётган гуруҳ раҳбарларини алоҳида: М.Пеллин, Б.Гаррисон, Н.Виноград, Э.Швейкерт, А.Вухер, Х.Гназер, Х.Урбассек, К.-Х.Майвес-Брёер, Х.Ямамото, А.Делькорте, Э.Колодный, Д.Фу, К. ордлунд. З.Постава, Е.С.Машкова, В.Е.Юрасова, В.С.Черныш, А.М.Борисов, Ф.Г.Джурабекова, В.И.Матвеев.

Кластерларнинг сирт ва юпка плёнкалар билан ўзаро таъсири бўйича олиб борилаётган тадқиқотлардан мақсад шуки, кластер дасталарини ўтиргизиш йўли билан янги ва модификацияланган материаллар ҳосил қилиш, кластерларнинг сирт билан ўзаро таъсирида махсус кимёвий реакцияларни амалга оширишда, сирт рельефини ўзгартиришни бошқариш шунингдек легирланган аралашмалар тақсимотининг катта градиентини яратиш ион имплантациясини ўтказиш. Органик материалларни чанглантриш ва чуқурлик бўйича аралашмаларнинг тақсимот профилини юқори аниқликда олиш учун иккиламчи ион масс-спектрометрияси (ИИМС) вазифаларини бажаришда кластер дасталари алоҳида ўрин тутди. Ҳар хил мамлакатдаги тадқиқот гуруҳларнинг халқаро илмий ҳамкорликда юқори савияда комплекс тадқиқотлар ўтказишини, биринчи навбатда ўз ичига олган масалаларни экспериментал ўрганишларини ҳамда кўп атомли мос жараёнларни компьютерда моделлаштиришларини алоҳида таъкидлаб ўтиш керак.

Муаммонинг ўрганилганлик даражаси. Ўтган асрнинг 50-чи йиллар охиридан дунёда ионлар билан чанглантрилган кластер эмиссияси жараёнларини тадқиқ қилиш ишлари давом этаяпти. 60-80-чи йилларда бажарилган экспериментлар ионлар бомбардимонининг ҳар хил шароитларида эмиссияланган зарядли кластерларнинг қонуниятларига бағишланган эди. 80-90-чи йилларда олиб борилган ишлар асосан ҳар хил режимда чанглантрилган нейтрал кластер компонентларини ўрганиш билан боғлиқ эди. 90-чи йилларнинг иккинчи ярмидан бошлаб полиатомли ионлар таъсирида зарядли ҳамда нейтрал кластерлар эмиссияси жараёнлари интенсив ўрганила бошланди, бу эса ўз навбатида кластер дасталарининг ҳар хил ион технологиясида кенг қўлланилишининг бошланиши билан ҳамбарчас боғлиқдир.

Кластерлар чангланишини ўрганишда алоҳида ўрин, Тошкент мактаби бўлган Ўзбекистон Фанлар Академияси Электроника институтига тегишлидир, бунда 70-90 йилларда бажарилган экспериментал ва назарий тадқиқотлар кўп томондан янги характерга эга эди. 80-чи йилларнинг ўрталарида Н.Х. Джемилев, У.Х. Расулев ва С.В. Верхотуров томонидан очилган кашфиёт, яъни чангланган кластерларнинг фрагментацияси ҳодисаси фундаментал аҳамиятга эгадир. Кейинроқ, 80-90-чи йилларда чангланган кластер ионларининг парчаланиш жараёнлари бўйича тадқиқотлар олиб борилди ва унинг муҳим параметрларни аниқлайдиган кўп томондан уникал бўлган услублар ишлаб чиқилди. Бу услубларнинг қўлланилиши қатор зарядли кластерларнинг шундай, яъни фрагментация тезлиги константалари

бўйича тақсимоти ва яшаш вақти ҳамда жунбушга келиш энергияси каби характеристикаларини аниқлашга имконият яратди. Назарий модель асосида ишлаб чиқилган “буғлантирувчи ансамбл” гомоядроли кластер ионларининг диссоциаланиш энергиясини аниқловчи услуб, чангланган зарраларнинг стабиллигини баҳолаш ва айрим ҳолларда юқори даражада стабиллашган структураларни топишга имконият беради. Кейинги вақтда бу услубни биз гетероядроли кластерларга қўллаш учун модификация қилганмиз. Лекин диссоциаланиш энергиясини аниқловчи “буғлантирувчи ансамбл” моделини чангланган ҳар қандай гетероядроли кластерларнинг стехиометрик таркибига ва бўлиши мумкин бўлган структурасига боғлиқ бўлмаган ҳолда қўллаш мумкинлиги масаласи, умуман айтганда, очиқ ҳолда қолди.

Ҳозирги вақтгача кенг қўламдаги ўтказилган экспериментал ва назарий тадқиқотларга қарамасдан яна шуни қайд этиш керакки, сиртни ионлар билан бомбардимон қилганда кластерларнинг ҳосил бўлиши ва эмиссия жараёнлари табиати кўп ҳолларда ноаниқ бўлиб қолмоқда, кўплаб яратилган назарий моделлар ва механизмлар эса одатдагидек, алоҳида кузатилган ҳодисалар қонуниятларини мос равишда тасвирлайди.

Диссертация мавзусининг диссертация бажарилган олий таълим илмий-тадқиқот ишлари режаси ёки илмий-тадқиқот муассасаси илмий-тадқиқот ишлари билан боғлиқлиги. Диссертация тадқиқоти Ион-плазма ва лазер технологиялари институти илмий-тадқиқот ишлари режасининг 2/98 Давлат Фан ва Технологиялар қўмитаси “Ионлар чанглантириши натижасида синтез қилинган ўта стабиллашган металл-углерод кластерларининг физик-кимёвий хоссаларини ўрганиш” (1998-2000); №40-02 Фундаментал тадқиқотларни қўллаб-қувватлаш фонди (ФТҚҚФ) «Молекуляр ионлар бомбардимони таъсирида ҳосил бўлган ва эмиссияланган кластер зарраларини тадқиқ қилиш» (2002-2003); №44-04 ФТҚҚФ «Чангланган кластер ионлари: парчаланишнинг кинетик энергияси ва жунбушга келиш механизми» (2004-2005); №57-06 ФТҚҚФ «Ионлар бомбардимони билан чангланган кластерлар фрагментацияси жараёнидаги иккиламчи ионларнинг массаси ва энергиявий тақсимоти эволюциясини тадқиқ қилиш» (2006-2007); лойиҳа №Ф-2-1-30 «Ионлар бомбардимони билан синтез қилинган металл оксидлари кластерларининг ҳосил бўлишини ва фундаментал хоссаларини тадқиқ қилиш: тадқиқот янги материал яратиш нуқтаи назаридан» (2003-2007); лойиҳа №ФА-Ф2-Ф096 «Ионлар бомбардимони билан синтез қилинган металл оксидлари молекуляр кластерларининг парчаланиш кинетик энергияларини, стабиллигини ва ҳосил бўлиш механизминини тадқиқ қилиш» (2007-2011); лойиҳа № Ф2-ФА-Ф157 «Ионлар бомбардимони вақтида металл, яримўтказгич ва полимер оксиди кластерларининг ҳосил бўлиш, жунбушга келиш ва мономлекуляр парчаланиш механизмлари» (2012-2016); лойиҳа ОТ-Ф3-11 «Альтернатив энергетика ва наноэлектроника учун материаллар нуқтаи назардан ҳар хил ўлчамга эга бўлган кремний ва унинг оксиди структураларидаги кўчиш ва релаксация жараёнларини ўрганиш» (2017-2020).

Тадқиқотнинг мақсади ионлар бомбардимони билан чангланган зарядли кластерларнинг фундаментал хоссаларини аниқлашнинг самарали усуллари ишлаб чиқиш ва синовдан ўтказиб тасдиқлаш ҳамда парчаланишнинг (диссоциаланиш) активлашув энергиясини аниқлашдан иборат.

Тадқиқотнинг вазифалари:

бир хил экспериментал шароитда оғир атомар Xe^+ ва унга массаси яқин бўлган SF_5^+ молекуляр ионлар дасталари билан сиртларни чанглантиргандаги массалар тақсимотини ва Ag_n^+ , Nb_n^+ ва Ta_n^+ кластерлари фрагментацияси жараёнларини солиштириб тадқиқ қилиш ва тасдиқлаш;

парчаланган ионлар кинетик энергияси спектрларини ўлчашга асосланган ва ундан фойдаланиш орқали Xe^+ ионлари билан ниобий карбиди сиртидан чанглантирилган Nb_mCn^+ кластерларининг диссоциаланиш энергиясини баҳолаш йўли билан Райс-Рамспергер-Касселнинг (РРК) мономолекуляр реакциялар назариясининг классик варианты доирасида чангланган кластер ионларининг диссоциаланиш энергиясини баҳолаш усулини ишлаб чиқиш;

Si , Nb ва V сиртларини чанглантирганда атомлар сони ҳар хил (n ва m) бўлган $\text{Si}_n\text{O}_m^\pm$, $\text{V}_n\text{O}_m^\pm$ ва $\text{Nb}_n\text{O}_m^\pm$ оксидли кластерларнинг самарали генерация усулини ишлаб чиқиш;

кўпроқ $\text{Si}_n\text{O}_m^\pm$ чангланган кластерлар чиқадиган асосий фрагментация каналлари учун уларнинг парчаланган ионлари кинетик энергияси спектрларини ўлчаш, ўтказилган ўлчашлар асосида, “буғлантирувчи ансамбл” модели ва Райс-Рамспергер-Кассел (РРК) назарияси доирасида шу кластерларнинг диссоциаланиш энергиясининг сон қийматларини ҳисоблаш, шу $\text{Si}_n\text{O}_m^\pm$ кластерларнинг парчаланиш тезлиги ўртача константаларини ва ўртача яшаш вақтини аниқлаш;

V ва Nb сиртларининг чангланишида $\text{V}_n\text{O}_m^\pm$ ва $\text{Nb}_n\text{O}_m^\pm$ кластерлар фрагментацияси жараёнларини тадқиқ қилиш, $\text{V}_n\text{O}_m^\pm$ ва $\text{Nb}_n\text{O}_m^\pm$ парчаланишининг асосий реакциялари учун парчаланган кластер ионлари кинетик энергияси спектрларини ўлчаш, ушбу ўлчашлар натижаларини “буғлантирувчи ансамбл” модели ва Райс-Рамспергер-Кассел (РРК) назарияси доирасида қайта кўриб чиқиб, ушбу кластерларнинг диссоциаланиш энергиясини аниқлаш, $\text{V}_n\text{O}_m^\pm$ ва $\text{Nb}_n\text{O}_m^\pm$ кластерлар фрагментациясининг асосий каналлари учун парчаланиш тезлиги ўртача константаси ва ўртача жунбушга келиш энергиясини аниқлаш;

ион чангланишда кластерларнинг ҳосил бўлиш жараёнларини сифат жиҳатдан таърифлаб, ҳозирги замон кучли мувозанатсиз жараёнлар физикаси тушунчалари нуктаи назардан назарий яқинлашиш асосида ишлаб чиқиш, чанглантирилган мувозанатсиз кластер структураларининг релаксация вақтини назарий баҳолаш ва буларнинг Клотснинг “буғлантирувчи ансамбл” ва РРК мономолекуляр назариясидан фойдаланиб олинган натижаларга мумкин қадар таъсирини аниқлаш.

Тадқиқот объектлари чангланган Ag_n^+ , Nb_n^+ , Ta_n^+ , Nb_nC_m^+ , $\text{Si}_n\text{O}_m^\pm$, $\text{V}_n\text{O}_m^\pm$ ва $\text{Nb}_n\text{O}_m^\pm$ кластер ионларидан иборатдир

Тадқиқот предмети ионлар бомбардимони вақтида материаллар сиртидан чангланган Ag_n^+ , Nb_n^+ , Ta_n^+ , Nb_nC_m^+ , $\text{Si}_n\text{O}_m^\pm$, $\text{V}_n\text{O}_m^\pm$ ва $\text{Nb}_n\text{O}_m^\pm$ кластер ионларининг эмиссия ва фрагментация жараёнларидир.

Тадқиқот усуллари иккиламчи ионлар масс-спектрометрияси, “буғлантирувчи ансамбл” назарияси ва мономолекуляр реакциялар назариясидан иборатдир.

Тақиқотларнинг илий янгилиги қуйидагилардан иборат:

айнан бир хил тажриба шароитларда Ag , Nb ва Ta сиртларини оғир атомар Xe^+ ва массалари жиҳатдан яқин бўлган SF_5^+ молекуляр ионлар билан тўзғитиш жараёнларида Ag_n ва Nb_n металлларининг гомоядроли кластерларининг чиқиши бир хил, улар интенсивлигида кузатиладиган фарқлар чангланаётган заррачаларнинг ионлашиш эҳтимоллиги билан боғлиқ эканлиги кўрсатиб берилди;

Ag_n^+ , Au_n^+ , Cu_n^+ , Nb_n^+ ва Ta_n^+ каби қатор кластерларнинг ўртача бўлиниш тезликлари доимийлари ва ўртача яшаш вақтлари аниқланди, Nb_n^+ ва Ta_n^+ каби кластерлар қатори учун ўртача ғалаёнланиш энергиялари аниқланди; бир-бирига яқин бўлган атомар ва молекуляр ионлар билан чанглантилган кластерларнинг ўртача бўлиниш тезликлари доимийлари ва ўртача яшаш вақтлари бир хил эканликлари кўрсатиб берилди;

парчаланган ионлар кинетик энергиялари спектрини ўлчаш ва Xe^+ ионлари билан чанглантилган қатор Nb_mC_n^+ кластерларнинг диссоциацияланиш энергияларини баҳолаш амалга оширилган классик вариантдаги Райс-Рамспергер-Кассель (РРК) ларнинг мономолекуляр реакциялари назарияси доирасида ўлчаш натижаларини қайта ишлашга асосланган методика ишлаб чиқилди; РРК ва «буғлантирувчи ансамбл» назариясидан биргаликда фойдаланиш асосида ишлаб чиқилган ягона ҳисоблаш методикасидан чанглантилган кластерлар диссоциация энергияларини аниқлаш мақсадида фойдаланишнинг мақсадга мувофиқ эканлиги асослаб берилди;

бомбардимон қилиш камерасида кислород киритиш ва Si , V ва Nb сиртларни ксенон ионлари билан чанглантилиш жараёнларида $\text{Si}_n\text{O}_m^\pm$, $\text{V}_n\text{O}_m^\pm$ ва $\text{Nb}_n\text{O}_m^\pm$ кластерларининг ҳосил бўлиши ва эмиссияси учун самарали шарт-шароитлар аниқланди;

парчаланган ионлар кинетик энергиялари спектрларини ўлчаш асосида ўтказилган РРК ва «буғлантирувчи ансамбл» назариялари доирасида ҳисобланган $\text{Si}_n\text{O}_{2n+1}^-$ ($n=2-7$) ва Si_nO_m^+ кластерларнинг диссоциация энергияларининг сонли қийматлари методика ўлчаш хатоликлари даражасида кислород киритилган шароитда O_2^+ ва Xe^+ ионлари билан чанглантилган $\text{Si}_n\text{O}_{2n+1}^-$ ($n=2-7$) кластерларнинг диссоциация энергиялари билан бир хил эканлиги, яъни ушбу кластерларнинг структуравий тузилишлари уларнинг пайдо бўлиш ёки уйғотилиш усулларига боғлиқ эмаслиги кўрсатиб берилди;

$\text{Si}_n\text{O}^-_{2n+1}$ ($n=1-6$) и Si_nO_m^+ , ($n=1,2$) кластерларнинг ўртача яшаш вақтлари ва ўртача парчаланиш тезлиги доимийлари аниқланди;

сиртга кислород киритилган шароитларда Xe^+ ионлари билан чанглангантирилган V ва Nb сиртларидаги $\text{V}_n\text{O}_m^\pm$ ва $\text{Nb}_n\text{O}_m^\pm$ кластерларининг фрагментациялари жараёнлари тадқиқ қилинди; «буғлангантирувчи ансамбл» ва РРК назарияларидан фойдаланган ҳолда ишлаб чиқилган методика доирасида $\text{V}_n\text{O}_m^\pm$ ва $\text{Nb}_n\text{O}_m^\pm$ қатори бош бўлиниш реакциялари учун парчаланган ионлар кинетик энергиялари спектрлари ўлчанди, уларнинг диссоциация энергиялари аниқланди; асосий фрагментация каналлари учун чанглангантирилган $\text{V}_n\text{O}_m^\pm$ ва $\text{Nb}_n\text{O}_m^\pm$ кластерларнинг ўртача бўлиниш тезликлари доимийлари аниқланди; ўхшаш стехиометрияга эга бўлган кластерларнинг бўлиниш тезликлари доимийларининг сонли қийматлари уларнинг заряд ҳолатларига боғлиқ эмаслиги, чанглангантирилган кластерларда ғалаёнланиш солиштира энергиялари эса кластерлардаги атомлар турига ҳам, уларнинг зарядига ҳам боғлиқ эмаслиги кўрсатиб берилди;

чизикли каскадда силжиган атомларнинг треки (қолдирадиган изи) нинг фазодаги тасвири мос «фрактал кластер» ҳосил бўлиши жараёни каби ифодаланиши мумкинлиги назарий жиҳатдан кўрсатиб берилди, ион бомбардимон қилиш жараёнида материалларнинг чангланиш ҳодисасига синергетик ёндошувни қўллаш кузатиладиган чангланган кластерлар масса тақсимооти шаклланишини сифат жиҳатдан ифодалаш ва нозикли динамика тасаввурлари асосида эластик силжиш ва термочўққилар жараёнига ягона ёндошувни ишлаб чиқиш имконини беради; чизикли каскадлар ва термочўққилар орасидаги оралиқ соҳани ифодалаб берувчи янги назарий таҳлил методи тавсия қилинди;

чанглангантирилган номувозанатли кластерли структураларнинг релаксация вақтлари назарий аниқланди; Клотснинг «буғлангантирувчи ансамбл» ва РРК мономолекуляр реакциялар назарияларидан фойдаланиб олинган натижалар аниқлигига ушбу жараёнларнинг таъсир қилмаслиги, лекин уларнинг $\tau < 10^{-9}$ с вақт интервалида (диапазонида) чангланган кластерлар фрагментациялари (бўлинишлари) учун жавобгар эканликлари кўрсатиб берилди.

Тадқиқотларнинг амалий натижалари:

ион технологиялари ривожланиши учун катта қизиқиш уйғотувчи чангланган кластерли ионлар турғунлигини аниқлаш учун тавсия қилинган «буғлангантириш ансамбли» ва РРК мономолекуляр реакциялар назарияларидан биргаликда фойдаланиб парчаланган ионлар кинетик энергиялари спектрларини кейин қайта ишлашга асосланган диссоциация энергияларини аниқлаш методикаси ишлаб чиқилди;

амалий масалаларни ечиш учун бир вақтнинг ўзида бомбардимон қилинувчи сиртга кислород киритиш орқали сиртни оғир атомар ионлар дастаси билан чанглангантириш жараёнида оксидли кластерларни генерация қилишнинг (ҳосил қилишнинг) самарали методи ишлаб чиқилди;

биринчи маротаба ион технологияларининг турли хилдаги қўлланилишларида ушбу кластерлардан фойдаланиш имкониятларини

баҳолаш учун фойдаланиш мумкин бўлган $Nb_nC_m^+$, $Si_nO_m^\pm$, $V_nO_m^\pm$ ва $Nb_nO_m^\pm$ лар қатор кластерларининг диссоциация энергияларининг сонли қийматлари аниқланди.

Тадқиқот натижаларининг ишончлилиги иккиламчи-ион масс-спектрокопиясининг замонавий методларининг қўлланилиши, тажрибаларстатистикаси ва шарт-шароитларини батафсил ва тўла таҳлил қилинганлиги, замонавий юқори аниқликдаги ўлчов асбобларидан фойдаланилганлиги, олинган тадқиқот натижаларининг учраши мумкин бўлган хатоликларни ҳисобга олган ҳолда статистик усулларда қайта ишланганлиги ва батафсил, изчил ҳисоблашларни амалга оширилганлигига, олинган тажрибавий ва назарий натижаларнинг, ҳамда чиқарилган хулосаларнинг кўп атомлизаррачаларнинг хусусиятларива табиати, чанглатилган кластерларнинг эмиссияси ва фрагментациясини ўрганишга бағишланган замонавий тадқиқот натижалари билан мос келиши билан асосланади.

Тадқиқот натижаларининг илмий ва амалий аҳамияти.

Массалари бир-бирига яқин бўлган бир атомли ва кўп атомли заррачалар билан чанглантириш жараёнларида кластерлар эмиссияси ва фрагментацияларини қиёсий тадқиқ қилиш натижаларининг илмий аҳамияти бундай шароитларда содир бўлаётган жараёнларнинг бомбардимон қилаётган ионлардаги заррачалар сонига боғлиқ бўлмаган ҳолда бир хилда кечишини, айнан ўхшашлигини аниқлашдадир.

Биз томонимиздан ишлаб чиқилган бир вақтнинг ўзида РРК мономолекуляр реакциялар ва «буғлантирувчи ансамбли» назарияларини биргаликда ишлатган ҳолда олинган натижаларни қайта ишлаш орқали парчаланган ионлар кинетик энергиялари спектрларини ўлчашга асосланган кластерлар диссоциация энергияларини аниқлаш методикасининг илмий аҳамияти кластер ионларининг фундаменталь параметрларини аниқлаш имкониятларининг мавжуд эканлигидадир; юқорида келтирилган методиканинг амалий аҳамияти шундан иборатки, фойдаланиладиган замонавий ион технологияларда бевосита чангланган кластер ионлар турғунлигини аниқлаш учун қўлланилиш имкониятларининг мавжудлигидир.

Кислород киритилган ҳолда O_2^+ ва He^+ ионлари билан чанглантирилган $Si_nO_{2n+1}^-$ ($n=2-7$) кластерлар фрагментация жараёнларининг айнан ўхшашлиги ва диссоциация энергияларининг сонли қийматларининг илмий аҳамияти улар структураларининг уларни ҳосил қилиш усулларига боғлиқ эмаслигини кўрсатиб берганлигидадир.

$Nb_nC_m^+$, $Si_nO_m^\pm$, $V_nO_m^\pm$ ва $Nb_nO_m^\pm$ каби қатор кластерлар диссоциация энергияларини аниқлашнинг илмий ва амалий аҳамияти шундан иборатки, улар учун олинган сонли қийматлардан ҳам фундаментал тадқиқотлар, ҳам ама қўлланишларда фойдаланиш имкониятлари мавжуд.

$V_nO_m^\pm$ ва $Nb_nO_m^\pm$ каби чангланган кластерларнинг аниқланган ўртача бўлиниш тезликлари доимийларининг илмий аҳамияти шундан иборатки, улардай чангланган кластерларнинг солиштирма ғалаёнланиш энергиялари

кластерларнинг турига ҳам, уларнинг зарядларига ҳам боғлиқ эмас деган хулоса чиқариш мумкин.

Фойдаланилган назарий ёндошувларнинг илмий аҳамияти шундан иборатки, уларни турли шароитларда материаллар сиртини ион чанглантририш жараёнида ҳосил бўладиган кластерлар ва уларнинг эмиссияси жараёнларини комплекс аналитик ифодалашда қўллаш мумкин.

Тадқиқот натижаларининг татбиқ қилиниши.

«Investigating the dissociation energies of niobium and vanadium oxides clusters synthesized by ion sputtering» (Bulletin of the Russian Academy of Sciences. Physics. 2012. vol. 76. N.5. pp. 527-530) номли мақолада чоп этилган чанглатилган $V_mO_n^+$ кластерлар диссоциацияси энергияларининг олинган сонли қийматлари Ухан ш. (ХХР) Университетида проф. Д.Фу раҳбарлигидаги илмий гуруҳда (Dr. Professor Fu Dejun, Accelerator Laboratory, School of Physics and Technology, Wuhan University) Хитойнинг Ухан ва Сучжоу илмий-техника Бошқармалари (Wuhan Science and Technology Bureau and Suzhou Science and Technology Bureau of China) илмий Лойиҳаларини бажаришда, “Research on cluster ion beam equipment for fabrication of ultra shallow junction devices” номли №2016030409020210 рақамли грант ва “Cluster ion beam nanofabrication device” номли №ZXG201448 рақамли грантларни бажаришда фойдаланилди ва бу зарур стехиометрия ва бошқа параметрларга эга бўлган ванадий оксидининг мусбат кластерли ионлар дастасини олиш имконини берди (Wuhan University нинг 09.10.2020й. даги Маълумотномаси).

«Fragmentation of sputtered $Si_nO_m^+$ clusters: Release kinetic and dissociation energies» (Bulletin of the Russian Academy of Sciences: Physics, 2008, 72(7), 910–914) номли мақолада чоп этилган кремний оксидининг чанглантририлган кластерларининг диссоциация энергияларини баҳолаш натижалари Мичиган плазмали тадқиқотлар ва инженерия АҚШ энергетика Вазирлиги институтида бажарилган АҚШ Энергетика Вазирлигининг «Directed Energy Interactions with Surfaces» номли №DE-AC02-06CH11357 рақамли илмий лойиҳасида кластерлар миқдори ва уларнинг нисбий интенсивлиги нуқтаи назаридан ўлчанган масс-спектрларни таҳлил қилишда фойдаланилди (Michigan State University нинг 30.09.2020й.даги Маълумотномаси).

Радиацион синергетика концепцияси асосида ишлаб чиқилган ион бомбардимон жараёнида иккиламчи заррачалар эмиссиясини ифодалаш учун фойдаланилган, динамик ва термодинамик назариялар орасидаги бўшлиқни тўлдиришга мўлжалланган ва «Синергетика распыления материалов при ионной бомбардировке», «Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования» журнали, 2013, №4, С.42-47 ва «Множественные процессы при распылении материалов ионной бомбардировкой», «Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования» журнали, 2013, №6, С.60-64 журналлардаги мақолаларда баён қилинган биз томонимиздан ишлаб чиқилган назарий таҳлил методдан Урал федерал университети Физика-технология институтида (Россия) қуйидаги:

Госзадание 3.1485.2017/4.6 Министерства науки и высшего образования РФ «Дефектная структура, возбуждённые состояния и конверсия излучения УФ-ИК диапазона в разупорядоченных оксидах РЗЭ с пониженной размерностью» (2017-2019 гг.), ва Грант РФФИ №20-42-660012 «Электронная структура, дефекты и фотоиндуцированные процессы в ионно-имплантированных материалах» (2019-2021 гг.) (Справка Физико-технологического института Уральского федерального университета №33.05-32/64 от 05.10.2020) илмий-тадқиқот лойиҳаларини бажариш доирасида радиацион индуцирланган эффектларни ўрганиш жараёнида фойдаланилган.

Диссертация материаллари университетларнинг мос йўналишлари ва мутахасислари ўқув дастурларига кичик заррачалар физикаси ва иончангланиш соҳасидаги янги қўлга киритилган ютуқлар сифатида киритилиши мумкин.

Тадқиқот натижаларининг апробацияси. Тадқиқотларнинг асосий натижалари 26 та халқаро ва 3 та республика миқёсидаги илмий-амалий анжуманларда муҳокама қилинган.

Тадқиқот натижаларининг чоп этилганлиги. Диссертация мавзуси бўйича олинган натижалар 59 та илмий ишда, улардан 21 таси илмий мақола, шу жумладан 12 та чет эл ва 9 та Ўзбекистон Республикаси Олий аттестация комиссиясининг асосий докторлик диссертациялари материалларини чоп этиш учун тавсия қилган республика журналларида баён қилинган.

Диссертация таркиби ва ҳажми. Диссертация структураси (таркиби) кириш, 5 та боб, хулоса, фойдаланилган адабиётлар ва иловадан ташкил топган. Диссертация ҳажми 193 бет матнни ўз ичига олган бўлиб, унда 38 та расм ва 20 та жадвал мавжуд.

ДИССЕРТАЦИЯНИНГ АСОСИЙ МАЗМУНИ

Кириш қисмида диссертация иши мавзусининг долбзарблиги ва зарурияти асосланган, татқиқотларнинг мақсади ва вазифалари, ҳамда объекти, предмети ва усуллари аниқланган, татқиқотнинг Ўзбекистон Республикасида илм-фан ва технологияларини ривожлантиришнинг устувор йўналишларига мослиги кўрсатиланган, илмий янгилиги ва амалий натижалари баён қилинган, олинган натижаларнинг илмий-амалий муҳимлиги, ишончлиги кўрсатилган, амалиётда қўллаш ҳақида маълумотлар, олинган натижаларнинг апробацияси, диссертациянинг структураси ва ҳажми ҳақида маълумотлар келтирилган.

Диссертациянинг «Иончангланиш жараёнида кластерлар эмиссияси ва уларнинг сирт билан ўзаро таъсири жараёнларини тадқиқ қилишнинг қисқача таҳлили» номли биринчи бобида иончангланиш жараёнида кластерлар эмиссияси ва кластер дасталарининг турли режимларда материаллар сирт билан ўзаро таъсири жараёнларида кластерлар ҳосил бўлишини ўрганиш бўйича олиб борилаётган ишларнинг замонавий ҳолати қараб чиқилган. Қаттиқ жисмларни атомар ионлар дастаси билан

бомбардимон қилиш жараёнида кластерлар эмиссиясининг асосий қонуниятлари қисқача баён қилинган. Заррачалар энергияси ва турига боғлиқ равишда кластерларнинг сирт билан ўзаро таъсирининг асосий типлари кўрсатиб берилган. Кластерли ионлар дастаси билан чанглангириш жараёнларининг асосий қонуниятларига уларнинг иккиламчи-ион масс-спектрометрияда қўлланилиши нуқтаи назаридан асосий эътибор; хусусан олинган хусусиятлардан органик материалларнинг чангланиши ва қаттиқ жисмларнинг сирт олди қатламларида чуқурлик бўйича аралашмалар тақсмоти профилини олиш учун қўлланилиши кўрсатиб берилди. Сиртларни кластерли ионлар билан бомбардимон қилиш жараёнларида юзага келадиган аддитив бўлмаган эффектлар қараб чиқилди. Қаттиқ жисмларнинг чангланиши жараёнларида кластерли ионларнинг мономолекуляр фрагментацияларини ва бунда қўлланиладиган аналитик ва экспериментал методикаларни ўрганиш бўйича олиб борилган ишлар батафсил келтирилган ва таҳлил қилинган. Диссертацион иш олдига қўйилган масала ҳолати таҳлил қилиниб, тадқиқот ишлари олдига қўйилган вазифалар келтирилган.

«Экспериментал қурилма ва тадқиқотлар методикаси» номли иккинчи бобда экспериментал қурилма-тескари геометрияли иккиламчи фокусировкага эга масс-спектрометр қараб чиқилган, унинг асосий қисмлари ва конструктив хусусиятлари баёни келтирилган. Олиб бориладиган тадқиқотларда ишлатиладиган материалларни танлаш асосланган ва тажрибаларни ўтказиш шароитлари баён қилинган. Сиртларни He^+ , Ar^+ , O_2^+ ва SF_5^+ ионлари дастаси билан чанглангириш жараёнида кластерларнинг массалар бўйича тақсмотини тадқиқ қилиш методикаси баён қилинган. Чангланиш маҳсулотларининг мусбат ва манфий ташкил этувчиларини ўрганиш жараёнида бирламчи ионларнинг энергиялари 8,5 кэВ ва 18,5 кэВ ни ташкил қилди. Бирламчи ионлар тоқларининг абсолют қийматлари: тоқлар зичлигининг $1\text{--}3 \cdot 10^{-3} \text{ А/см}^2$ катталиққа мос қийматларида дуоплазматрон билан He^+ ионлари учун 400-700 нА ни ва O_2^+ ионлари учун 700-800 нА ни, электрон таъсирли ионлар манбаи билан He^+ ионлари учун 700 нА ни ва SF_5^+ и Ar^+ ионлари учун $\sim 1,2 \text{ мкА}$ ни ташкил қилди.

Масс-спектрометрнинг биринчи S_1 ва иккинчи S_2 майдонсиз соҳа (зона)ларида кластерлар фрагментацияларини тадқиқ қилиш методлари баён қилинган. Қурилманинг иккинчи майдонсиз соҳасида кластерларнинг бўлиниши жараёнида ҳосил бўладиган парчаланган ионларнинг кинетик энергиялари спектрларини ўлчаш методикаси тақдим қилинди ва “буғлангириш ансамбли” назарий моделидан фойдаланиб, олинган чанглангирилган кластерлар диссоциация энергиялари асосида ҳисоблашлар амалга оширилди. Бу модель учун масса маркази системасида парчаланган ионлар кинетик энергиялари спектри қуйидагича ифодаланади:

$$dN/dE \propto E^l \cdot \exp[-E/k_B T^{++}] \quad (1),$$

бу ерда k_B - Больцман доимийси, l параметр ноль ва бир орасидаги қийматларни қабул қилади, T^{++} - уйғотилган кластер температураси бўлиб, у солиштирма энергияга мос келади (эркинлик даражасига). Ушбу назария

доирасида кластернинг диссоциация энергияси T^{++} температура билан куйидагича боғланган:

$$E_d(T^{++}) = (\gamma(n) * k_b * T^{++}) / \left(1 - \frac{\gamma(n)}{2C(n)} + \frac{1}{12} * \left[\frac{\gamma(n)}{2C(n)} \right]^2 + \dots \right) \quad (2),$$

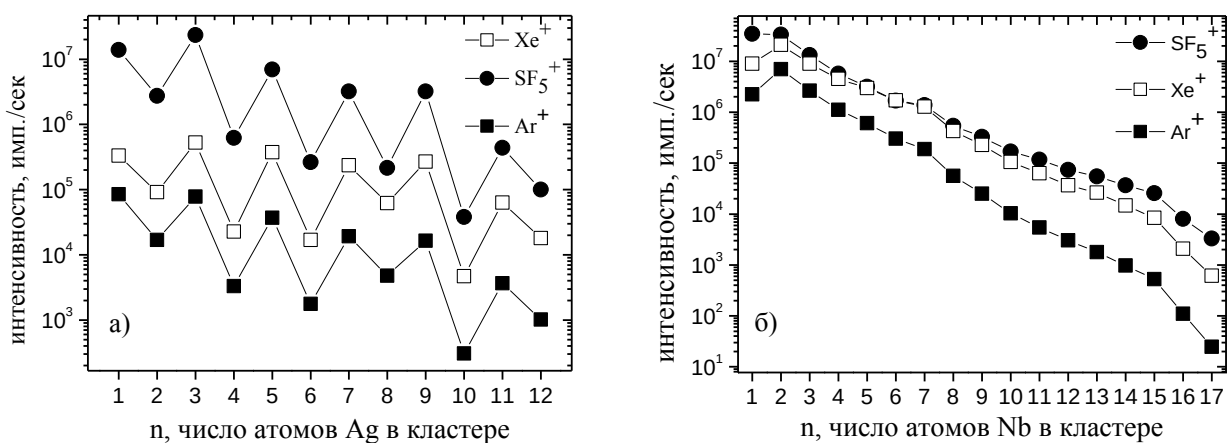
бу ерда

$$\gamma(n) = -\ln \left[1 / \left(10^{13} * n^{2/3} * \exp \left(\frac{6}{n^{2/3}} \right) * \bar{t}(n) \right) \right] \quad (3)$$

- Гспанн параметри бўлиб, у кластердаги атомлар сони n ва тажрибадан аниқланувчи кластернинг мос яшаш вақти $\bar{t}(n)$ га боғлиқ, $C(n) = 3 * n - 1$ – кластер иссиқлик сиғими (Больцман доимийси k_b бирликларида). Массалар маркази системасида кинетик энергиялар спектрида ва лаборатория системасида ўлчанган парчаланган ионлар кинетик энергияларини қайта ўзгартириш методикасининг баёни келтирилган.

Олинган натижаларни математик қайта ишлаш ва эксперимент натижалари аниқлигини баҳолаш босқичлари баён қилинган.

«Ион бомбардимон натижасида сиртдан чангланган кластерларнинг фундаментал хусусиятларини аниқлаш методикасини ишлаб чиқиш» номли учинчи бобда массалари бўйича бир-бирига яқин бўлган атомарных ионов Xe^+ атомар ва SF_5^+ молекуляр ионлари, шунингдек Ag^+ ионлари дастаси билан Ag , Nb ва Ta сиртларни чанглантериш жараёнларида кластерли ионлар фрагментацияларини ва масса-таксимотларини қиёсий тадқиқ қилиш натижалари келтирилган. Ag_n^+ ва Nb_n^+

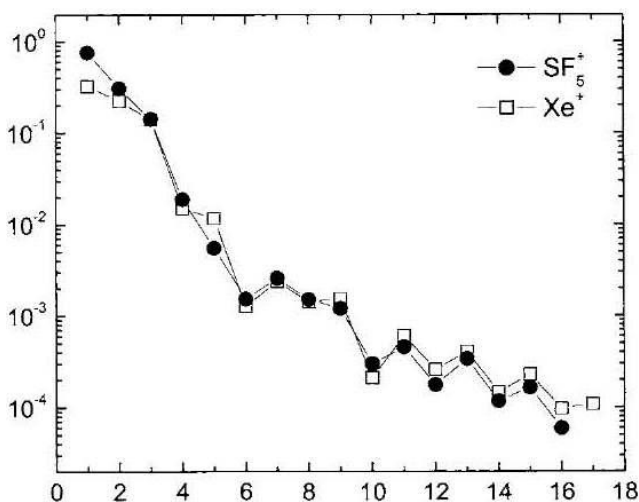


1.Расм. Ag (а) ва Nb (б) сиртларини SF_5^+ , Xe^+ и Ar^+ ионлари билан тўзғитиш жараёнларида мусбат гомоядроли кластерли ионларнинг масс-спектрлари.

кластерлар учун олинган масс-спектрлар (1.Расм), Ag_n^+ ($n=1-12$) учун бирламчи ионлар типига боғлиқ равишда чиқиш интенсивликларида катта тафовут кузатилишидан далолат беради. SF_5^+ молекуляр дасталари билан бомбардимон қилиш жараёнларида ҳосил бўладиган Ag_n^+ кластер ионлари интенсивлигининг энг катта қийматига эришилади, бу эса Ar^+ ионлари билан чанглантеририлган ҳолдаги мос кластерлар чиқишидан 160-170 марта юқори. Xe^+ ион дасталари билан бомбардимон қилиш жараёнида Ag_n^+ кластерлари

интенсивлиги (1a.Расм) бу кластерларнинг аргон билан чанглантирилган ҳолдаги чиқишидан катта, лекин SF_5^+ ионлари билан бомбардимон қилишдагидан кичик бўлган оралиқ қийматларни қабул қилади. Ушбу бирламчи ионлар дастаси билан чангланган Nb_n^+ ($n=1-17$) нинг масса-таксимоти (рис.1б.Расм) шуни кўрсатадики, кластерда $n > 2$ бўлганда ундаги атомлар сони ортиши билан интенсивликнинг монотон камайишини кўрсатади. SF_5^+ и He^+ ионлари билан бомбардимон қилинганда $n=4-8$ бўлган Nb_n^+ ионларининг чиқиши интенсивлик бўйича атомлар сонига кучсиз боғлиқ. SF_5^+ , He^+ ва Ag^+ ионлари билан чанглантирилган Ta_n^+ ($n=1-8$) кластерлари масса-таксимоти кутилмаган кўринишга эга. He^+ ионлари дастаси билан бомбардимон қилиш жараёнида кластерларнинг чиқиши катта қийматларга эришар экан. Молекуляр Ta_n^+ ионлари билан бомбардимон қилиш жараёнида Ta_n^+ кластерларининг чиқиши аргон билан чанглантирилгандагига қараганда сезиларли даражада юқори, лекин He^+ таъсиридаги интенсивликлардан кичик.

Кузатиладиган кластерли ионларнинг чиқишига бирламчи ионлар



2.Расм. 10кэВ энергияли He^+ ва SF_5^+ ионлари билан бомбардимон қилинган кумуш сиртидан чанглантирилган нейтрал Ag_n кластерларининг масс-спектрлари.

дастасидаги заррачалар сони ва чанглантирилган кластерлар ионланиши даражаси таъсирини аниқлаш мақсадида биз Эссен шаҳридаги Университетнинг (Германия) тадқиқот гуруҳи бидан биргаликда айнан бир хил шароитларда Ag сиртини He^+ ва SF_5^+ мономолекуляр ионлари билан чанглантириш жараёнида Ag_n нейтрал кластерлар эмиссиясини ўрганиш бўйича тажрибалар

ўтказилди. Тажрибалар лазер ионлаштириш имконияти бўлган рефлектрон типдаги вақт бўйича учувчи масс-спектрометрда $3 \cdot 10^{-12}$

Торр вакуум шароитида поликристалл кумушни 45° бурчак остида 10 кэВ энергияли He^+ ва SF_5^+ ионлари билан бомбардимон орқали ўтказилди. Олинган натижалар шундан далолат берадики (2.Расм), He^+ атомар ионлари билан чанглантиришдан SF_5^+ молекуляр ионлар билан чанглантиришга ўтиш кумуш нейтрал атомлари ва уларнинг димерлари чиқишининг унча сезиларли бўлмаган ортишига олиб келади. Айни вақтда $n \geq 3$ бўлган ҳолда Ag_n кластерлари чиқиши интенсивлиги амалда деярли ўзгаришсиз қолади. Олинган катталиклар таҳлили ва 1.Расм билан қиёсий солиштириш қуйидаги икки хулоса чиқариш имконини беради. Биринчидан, SF_5^+ билан бомбардимон қилиш жараёнида Ag_n^+ кластер ионлари чиқишининг, He^+ билан бомбардимон қилиш жараёнидаги чиқиш билан солиштирилганда

юқорироқ бўлиши чангланишнинг ортишига эмас, балки чангланган заррачалар ионлари эҳтимоллигининг ортишга боғлиқ. Иккинчидан, кўп атомли ионлар билан чанглантириш жараёнида, хусусан бомбардимон қилувчи заррачаларнинг ўлчамлари ва энергиялари тадқиқ қилинаётган соҳасида кластер чиқишининг нозичлиги кучайиш эффектлари кузатилмади.

Xe^+ ва SF_5^+ ионлари билан чангланган Ag_n^+ , Nb_n^+ ва Ta_n^+ кластерларининг бўлиниш бўйича тадқиқот натижалари шуни кўрсатадики, ҳар иккала типдаги бирламчи ионлар дастаси учун ўлчаш хатоликлари даражасида парчаланиш эҳтимолликлари бир хил бўлар экан.

Чангланган кластерларнинг фрагментация жараёнлари уларнинг бўлиниш тезликлари доимийлари билан характерланиши мумкин экан: $k \equiv 1/\tau$, бу ерда τ – кластерларнинг ўртача яшаш вақти. Турли стехиометрик таркибдаги, турли фрагментация каналларига эга бўлган чангланган кластерларнинг бўлиниш тезликлари доимийлари k ва яшаш вақти τ ларни аниқлаш учун биз масс-спектрометрнинг S_1 ва S_2 майдонсиз зоналарида Δt_1 ва Δt_2 учини вақтида бўлиниш актлари сонини солиштиришга асосланган методикадан бу вақт ичида фрагментацияга дучор бўлиши мумкин бўлган метастабил кластерлар сони ΔN_1 ва ΔN_2 ушбу зона киришидаги дастлабки ионлар сони N_1 ва N_2 ларга пропорционал деб фараз қилиб фойдаландик. Бўлиниш қонуни қуйидагича

$$N = N_0 \exp(-k\Delta t), \quad (4)$$

бу ерда k – парчаланиш тезлиги доимийси, N – Δt вақт ичида парчаланишга дучор бўлмайдиган метастабил ионлар сони, N_0 – дастлабки метастабил ионлар сони. Масс-спектрометрнинг S_1 ва S_2 зоналарининг ҳар бир майдонсиз зоналари (соҳалари) учун қуйидагиларни оламиз:

$$\Delta N_1 = N_0 \exp(-kt_1)[1 - \exp(-k\Delta t_1)]; \quad \Delta N_2 = N_0 \exp(-kt_2)[1 - \exp(-k\Delta t_2)], \quad (5)$$

бу ерда t_1 ва t_2 – қурилма геометрияси билан боғлиқ бўлган мос зоналаргача учиб бориш учун зарур бўлган вақтлар, Δt_1 ва Δt_2 – бу зоналарни учиб ўтиш вақти. Тажрибадан биринчи майдонсиз зона ΔN_1 ва иккинчи зона учун ΔN_2 дларни аниқлаб, уларнинг нисбати бўйича қуйидаги тенглама:

$$\Delta N_1 / \Delta N_2 = \exp k(t_2 - t_1)[1 - \exp(-k\Delta t_1)] / [1 - \exp(-k\Delta t_2)]. \quad (6)$$

орқали ўртача парчаланиш (бўлиниш) тезликлари доимийларини топишимиз мумкин.

Ag_n^+ , Nb_n^+ , Ta_n^+ , Au_n^+ и Cu_n^+ каби қатор ион кластерлар учун (4)-(6) формулалар орқали ҳисобланган ўртача парчаланиш (бўлиниш) тезликлари доимийлари k ва уларга мос ўртача яшаш вақтлари $\tau \equiv 1/k$ шуни кўрсатадики, атомар Xe^+ ва молекуляр SF_5^+ ионлари билан чанглантирилган турли металл кластерлар учун уларнинг сонли қийматлари ўлчаш хатолиги даражасида бир-бири билан мос тушади, яъни ушбу кластерларнинг тебранма уйғониш ички энергиялари бирламчи бомбардимон қилувчи ионлардаги атомлар сонига боғлиқ эмас.

Кўп атомли комплекслар ва ғалаёнлантирилган молекулалар фрагментацияси жараёнларини ифодалаб берувчи назариялардан бири Райса-

Рамспергер-Кассел ларнинг мономолекуляр реакциялар назарияси (РРК) ҳисобланади. Унга кўра реакция тезлиги доимийси куйидагича

$$k(E) = A[(E - E_0)/E]^{s-1} \quad (7),$$

бу ерда A – юқори температурали экспоненциал Аррениус кўпайтувчиси бўлган доимий катталиқ. Шундай қилиб, РРК назариясининг классик варианты доирасида чанглангирилган кластерлар ғалаёнланиш энергиялари $E \equiv E_{excit}$ ни сонли баҳолаш имкониятлари мавжуд. РРК доирасида кластерларнинг мономолекуляр бўлинишининг тавсифи, бўлиниш тезлиги доимийларининг топилган қийматларини инобатга олиб, E_d диссоциация реакциясининг фаоллишиш энергиясида, ўртача яшаш вақти τ нинг тебранма ғалаёнланиш энергияси E_{excit} га боғлиқлигини беради:

$$E_{excit} = E_d(n) / [1 - (k_n/\nu_0)^{1/s-1}], \quad (8)$$

бу ерда $\nu_0 \approx 10^{13} \text{ с}^{-1}$ - частота фактори (омили), n – кластердаги заррачалар сони в кластере, $s=3n-6$ – ундаги гармоник осциляторлар сони, ҳисобга олган ҳолда диссоциация реакцияларининг активлаштирилган энергиялари E_d шароитида τ ўртача яшаш вақтининг E_{excit} тебранма ғалаёнланиш энергиясига боғлиқлигини беради.

Биз (8) формула бўйича мос кластерлар диссоциация энергиялари

1.Жадвал. Nb_n^+ ва Ta_n^+ ларнинг чанглангирилган кластерларининг ўртача уйғотилиш энергиялари (эВ).

Ион	Распад	E_d	E_{excit}	$E_{excit}/\text{атом}$
Nb_5^+	$Nb_4^+ + Nb$	5,69	5,76	1,15
Nb_8^+	$Nb_7^+ + Nb$	5,84	6,31	0,79
Nb_9^+	$Nb_8^+ + Nb$	5,87	6,54	0,73
Nb_{10}^+	$Nb_9^+ + Nb$	6,88	7,93	0,79
Ta_5^+	$Ta_4^+ + Ta$	7,02	7,10	1,42
Ta_6^+	$Ta_5^+ + Ta$	5,52	5,68	0,95
Ta_7^+	$Ta_6^+ + Ta$	8,34	8,78	1,25

катталиклари ва (4)-(6) формулалар орқали аниқланувчи бўлиниш тезликлари доимийларини ҳисобга олган ҳолда чангланган кластерларнинг ўртача ғалаёнланиш энергияларини баҳолашни амалга оширдик. Nb_n^+ ва Ta_n^+ каби қатор кластерларнинг ўртача уйғониш энергияларини баҳолаш бўйича олган натижаларимиз 1.жадвалда

келтирилган.

Илгари ишлаб чиқилган методика (1) ва (3) формулалар орқали «буғлантириш ансамбли» назарияси доирасида фрагментация жараёнида ҳосил бўладиган парчаланган ионлар кинетик энергиялари спектрларини ўлчаш асосида чангланган кластер ионларнинг диссоциация энергияларини аниқлаш имконини беради. Айни вақтда, умумий ҳолда «буғлантирувчи ансамбл» назариясидан фойдаланишда ноаниқ қолаётган мумкин бўлган чекловлар мавжуд. Шу сабабли, «буғлантириш ансамбли» назарияси ёрдамида олинган катталиқларни кластерли ионларнинг бўлиниш активация энергияларининг сонли қийматлари билан солиштириб баҳоловчи қўшимча методикаларни ишлаб чиқиш долзарб муаммолардан саналади. Бу масалани ечиш учун биз РРК назарияси асосида кластерларнинг диссоциация энергияларини баҳолашнинг текшириш имконини берувчи методикани ишлаб

чикдик. Иккинчи майдонсиз S_2 соҳасида фрагментациялашадиган кластерлар учун ушбу методика доирасида, ғалаёнланиш энергияси диссоциация энергияси ва парчаланган ионларнинг кинетик энергиялари билан боғлиқ ортиқча энергиялар йиғиндисидан иборат деб фараз қилиняпти: $E_{excit}=E_v=E_d+E_e$. У ҳолда

$$E_d = [(v_0/k)^{1/s-1} - 1] E_e, \quad (9)$$

бу ерда v_0 – частота фактори (омили), s – осциляторлар сони, E_v – кластернинг ички энергияси,

$$E_e = s/c, \quad (10)$$

c – тажрибадан аниқланадиган эгарсимон нуқта қиймати:

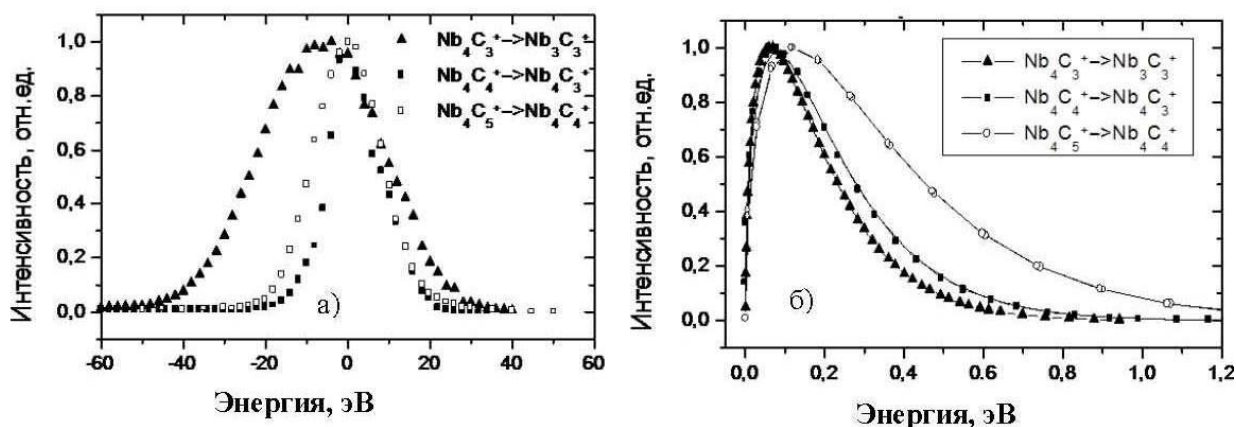
$$c = 1/[2(w/2)^2 \chi], \quad (11)$$

бу ерда w — Гаусс тақсимооти ёрдамида апроксимацияланадиган, парчаланган ионлар кинетик энергиялари бўйича тақсимооти спектри максимуми ярим баландлигининг кенглиги, χ – лаборатория координата системасидан масса маркази системасига энергияни ўтказиш коэффиценти. Шунини таъкидлаш лозимки, РРК назариясининг классик вариантыдан фойдаланиб аниқланган E_d диссоциация энергиялари, биринчидан, c параметрни танлашнинг ихтиёрийлиги, ва иккинчидан, назариянинг ўзини қўллашдаги баъзи чекланган аниқлик туфайли баҳолаш энергиялари ҳисобланади. Шундай қилиб, (9)-(11) лар ёрдамида чангланган кластерлар диссоциация активлаштириш энергияларини баҳолашнинг ушбу методикага «буғлантирувчи ансамбл» назариясига асосланган асосий (1)-(3) методикага нисбатан назорат қилувчи методика сифатида қаралар экан.

РРК назарияси асосида (9)-(11) лар ёрдамида чангланган кластерлар диссоциация активлаштириш энергияларини баҳолаш методикасининг имкониятларини текшириш учун ундан фойдаланган ҳолда гетероядроли кластер структураларни тадқиқ қилиш зарур. Шу сабабли, қатор илмий ва амалий ишларнинг асосий ўрганиш манбаи бўлган турли хусусиятларга эга ниобий-углеродли кластерларни тадқиқ қилиш алоҳида қизиқиш уйғотади. $Nb_nC_m^+$ кластерларнинг фрагментация ва эмиссияси бўйича тадқиқотлар ниобий карбидини He^+ ионлари билан чанглантириш шароитида ўтказилди. Олинган масса-тақсимоотлари таҳлили шуни кўрсатадики, $Nb_mC_n^+$ кластерлари атомлар сонининг $m=1-9$ ва $n=1-12$ кенг диапозонида қайд қилинади. $Nb_mC_n^+$ фрагментацияси тадқиқотлари натижалари мусбат ниобий-углерод учун умумий бўлиниш каналлари йўқлигини ва уларнинг аксарияти учун бир неча каналлар бўйича фрагментация характерли эканлигидан далолат беради.

Ниобий-углеродли кластерлар диссоциация энергияларини баҳолаш уларнинг парчаланган ионлар кинетик энергиялари спектрлари фрагментацияси шароитидаги тадқиқотлари асосида амалга оширилган бўлиб (3.Расм), Олинган натижалар «буғлантирувчи ансамбл» модели асосида (1)-(3) методика ҳамда классик РРК назариясига асосланиб (9)-(11)

методика бўйича қайта ишланган. $Nb_mC_n^+$ кластерлар қаторининг ҳар иккала методика доирасида ўтказилган ўлчашлар асосида ҳисобланган диссоциация энергиялари қийматлари 2.Жадвалда келтирилган.



3.Расм. Курилманинг иккинчи майдонсиз зонасида $Nb_mC_m^+$ кластерларнинг бўлиниши жараёнида парчаланган ионлар кинетик энергияларининг нормаллаштирилган: а) – лаборатория системасида; б) – массалар маркази системасида.

2.Жадвал. $Nb_mC_n^+$ кластерларининг E_d (эВ) диссоциация энергиялари: КI - теория "буғлантириш ансамбли"; RRК – РРК назарияси.

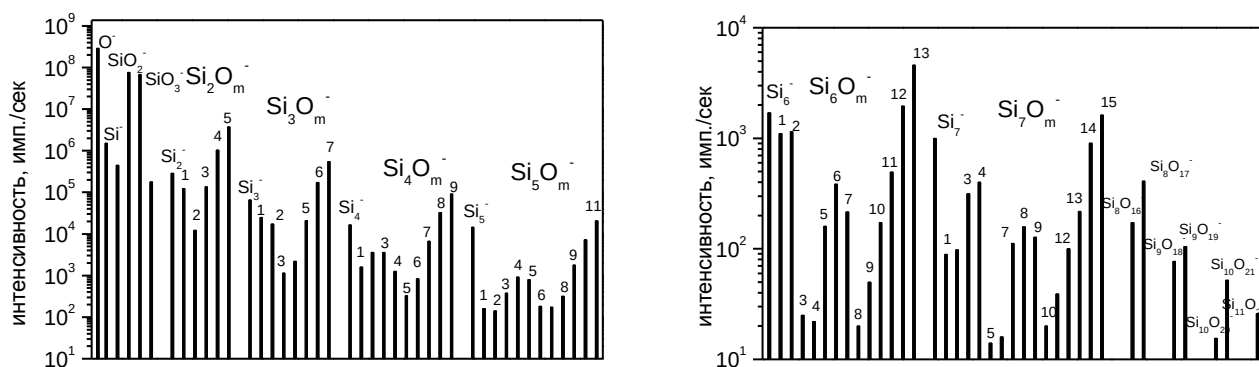
Кластер	Бўлиниш канали	E_d (эВ)	
		КI	RRК
$Nb_2C_3^+$	$Nb_2C_3^+ \rightarrow Nb^+ + NbC_3^0$	2.20	2,72
$Nb_2C_4^+$	$Nb_2C_4^+ \rightarrow Nb^+ + NbC_4^0$	4.31	4,26
$Nb_2C_5^+$	$Nb_2C_5^+ \rightarrow Nb_2C^+ + C_4^0$	2.40	2,15
$Nb_2C_5^+$	$Nb_2C_5^+ \rightarrow Nb_2C_2^+ + C_3^0$	4.99	4,47
$Nb_2C_6^+$	$Nb_2C_6^+ \rightarrow Nb_2C_2^+ + C_4^0$	2,07	1,77
$Nb_3C_3^+$	$Nb_3C_3^+ \rightarrow Nb^+ + Nb_2C_3^0$	4.60	4,56
$Nb_3C_4^+$	$Nb_3C_4^+ \rightarrow Nb_3C_3^+ + C_1^0$	7.56	6,79
$Nb_4C_2^+$	$Nb_4C_2^+ \rightarrow Nb_3C_2^+ + Nb^0$	5.20	5,18
$Nb_4C_5^+$	$Nb_4C_5^+ \rightarrow Nb_4C_4^+ + C_1^0$	7.22	6,84
Nb_5C^+	$Nb_5C^+ \rightarrow Nb_4C^+ + Nb^0$	6.17	6,16
$Nb_5C_2^+$	$Nb_5C_2^+ \rightarrow Nb_4C_2^+ + Nb^0$	5.34	4,82
$Nb_5C_3^+$	$Nb_5C_3^+ \rightarrow Nb_4C_3^+ + Nb^0$	4.71	4,04

Келтирилган катталиклардан кўринадикки, $Nb_mC_n^+$ диссоциация энергияларининг «буғлантирувчи ансамбл» ва РРК назариялари доирасида аниқланган қийматлари асосан бир-бирига яқин. Олинган натижалар шунингдек, чангланган кластер ионлар диссоциация энергияларини аниқлаш учун ҳар иккала ёндошувдан фойдаланган ҳолда ишлаб чиқилган ягона ҳисоблаш методикасидан фойдаланишнинг мақсадга мувофиқ эканлигидан далolat беради.

«Ион бомбардимон жараёнида синтез қилинган ванадий ва ниобий, кремний оксиди кластерларининг эмиссияси, фрагментацияси ва фундаментал хусусиятларини тадқиқ қилиш» номли тўртинчи бобда $Si_nO_m^{\pm}$, $V_nO_m^{\pm}$ ва $Nb_nO_m^{\pm}$ чангланган кластерларининг асосий характеристикаларини аниқлаш учун ишлаб чиқилган методикадан фойдаланган ҳолда масса-тақсимооти ва парчаланиши жараёнларини ўрганиш натижалари келтирилган. Турли стехиометрияли ва турли ўлчамли оксид кластерларнинг самарали синтези усуллари ва шароитларини топиш (аниқлаш) муҳим экспериментал вазифа ҳисобланади. Бирламчи ионлар дастасини растр бўйича ўтказиш жараёнларида $\sim 10^{-4}$ А·см⁻² ток зичлиги

қийматларида ионлар токи O_2^+ ионлари учун 0,7-0,8 мкА ни ва для O_2^+ и для He^+ ионлари учун 0,4-0,5 мкА ни ташкил қилди. Оксид кластерларнинг турли гуруҳлари чиқишининг кислород босимиға боғлиқ ҳолда ўзгаришини тадқиқ қилиш мақсадида, сирт яқинига игнасимон ўтказгичдан фойдаланган ҳолда бомбардимон камерасидаги босимни $P=2 \cdot 10^{-6}$ Па (қолдиқ вакуум) дан $P=5 \cdot 10^{-3}$ Па гача бир маромда ўзгартириш имконини берувчи киритиш мосламаси ўрнатилди.

Si сиртини энергияли O_2^+ ионлари билан чанглантриш жараёнида манфий кластер ионлар эмиссиясини тадқиқ қилиш шуни кўрсатдики, бу ҳолда ҳам гомоядроли Si_n^- кремний кластерларининг, ҳам гетероядроли $Si_nO_m^-$ кремний-кислород кластерларининг чиқиши кузатилади экан. Ҳар бир кластер сериясида адабиётларда келтирилган $Si_nO_{2n}^-$ ва $Si_nO_{2n+1}^-$ кластерлари ҳолидаги каби, Si нинг O га нисбатан аниқ қийматида $Si_nO_m^-$ кластернинг аномал юқори чиқиши кузатилади. Камерага O_2 киритилганда чанглантрилаётган соҳада кислород атомларининг концентрацияси ортади, ва қаралаётган «сеҳрли» кластерларнинг чиқиши ҳам ортади ва $P=4-5 \cdot 10^{-3}$ Па босимда максимумга эришади. Айни вақтда кислород киритилиб сиртни He^+ ионлари билан бомбардимон қилиш жараёнида ион тоқларининг катталиклари етарлича кичик бўлишига қарамай, чангланиш коэффициентининг юқори эканлиги сабабли $Si_nO_m^-$ кластерларининг энг катта чиқиши кузатилади (4.Расм). Ушбу методика кейинги тадқиқотларда, гетероядроли оксид кластер ионларнинг чангланиши жараёнида генерацияларни тадқиқ қилишда қўлланилди.

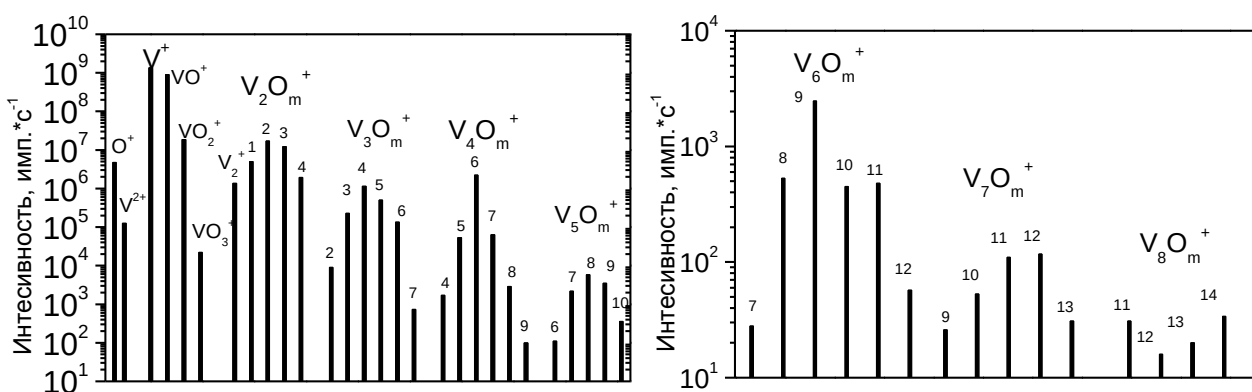


4.Расм. Si сиртини $P=5 \cdot 10^{-3}$ Па босимгача кислород киритилганда He^+ ионлари билан чанглантрилганда кремний атомлари ва кислород атомлари сонларига боғлиқ ҳолда тўпланган манфий кластер ионларнинг чиқиш диаграммалари.

Кислород киритилган шароитда He^+ ионлари билан кремний ионлари чанглантрилганда мусбат зарядланган кластерларнинг эмиссияси тадқиқотлари шундан далолат берадики, бу ҳолда таркибида турлича n кремний ва m кислород бўлган, ҳам гомоядроли Si_n^+ , ҳам гетероядроли $Si_nO_m^+$ кластерларнинг интенсив эмиссияси кузатилади. Мусбат зарядланган $Si_nO_m^+$ лар учун амалда ўзининг нисбий интенсивлиги бўйича яққол ажралиб турган бирон бир кластер мавжуд эмас. $Si_nO_m^+$ спектрида энг катта

интенсивликка эга бўлган шундай кластерлар мавжудки уларнинг чиқиши Si_nO_m^- манфий кластерида минимал.

Манфий V_nO_m^- кластерлари эмиссиясини ўрганиш шуни кўрсатадики, кластерли ионлар (n ва m) ўлчамлари ортиши билан уларнинг интенсивлиги тез камаяди. Лекин, ҳар бир кластерли серияда, V атомлари сонининг O га нисбати аниқ бўлган V_2O_m^- ($m=3-6$), V_3O_m^- ($m=5-8$) ва бошқалар каби, V_nO_m^- ионларнинг юқори чўққилари кузатилади, масс-спектрда O нинг V га нисбати кичик бўлган кластерлар эса кучсиз кўрсатилган ёки умуман мавжуд эмас. Мусбат зарядланган гомоядроли V_n^+ и гетероядроли V_nO_m^+ кластерларнинг ўлчанган чиқиш тақсимоти 5. Расмда келтирилган. Бу ҳолда массалар спектри манфий ионлар билан солиштирилганда янада ривожланган ва $n=1-8$ бўлган V_nO_m^+ кластерлар қайд қилинади. V_nO_m^- спектридан фарқли равишда V_n^+ гомоядроли кластерларнинг интенсив эмиссияси кузатилади. V_2O_5^- , V_3O_7^- , V_4O_9^- , ва бошқалар каби манфий ионлар спектрида яққол кўринадиган, кислород билан бойитилган оксидли кластерлар кучсиз намоён бўлади ёки умуман кўринмайди. Айни вақтда V_nO_m^+ нинг мусбат ионлари спектри, V_nO_m^- нинг манфий кластерлари билан солиштирилганда кислород атомлари сонининг металл атомлари сонига кичик нисбатларида

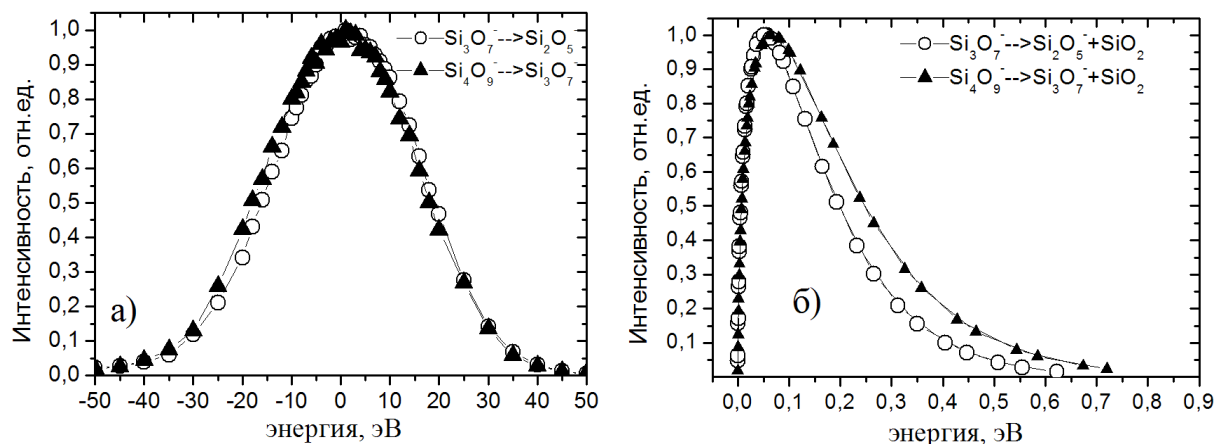


5. Расм. V ни $P=5 \cdot 10^{-3}$ Па босимгача кислород киритилганда Xe^+ ионлари билан англантириш жараёнида ҳосил бўладиган мусбат V_nO_m^+ кластерларнинг чиқиш диаграммалари.

кластерларнинг бойиган интенсив чўққиларга эга.

Манфий зарядланган Nb_nO_m^- ($n=1-5$) ниобий оксиди кластерлари эмиссиясини тадқиқ қилиш шундан далолат берадики, худди V_nO_m^- кластерларидаги каби, ҳар бир кластер сериясида Nb атомларининг O атомларига нисбати маълум бўлган, Nb_2O_m^- ($m=3-6$), Nb_3O_m^- ($m=6-8$) ва бошқалар каби, Nb_nO_m^- ионларининг юқори чиқишлари кузатилади экан, O нинг Nb га нисбати кичик бўлган кластерлар эса кучсиз намоён бўлади. Олиб борилган мусбат зарядланган ниобий оксиди Nb_nO_m^+ кластерларини ўрганиш шуни кўрсатадики, бу ҳолда массалар спектри манфий ионлар билан солиштирилганда сезиларлича анча ривожланган ва $n=1-6$, $m=1-12$ бўлган Nb_nO_m^+ кластерлари қайд қилинади. Nb_nO_m^- билан солиштирилганда, таркибида кам сондаги m кислород атомлари бўлган Nb_nO_m^+ ионларида кластерларнинг чўққилари янада интенсивроқ бўлар экан.

$\text{Si}_n\text{O}_m^\pm$ кластерлар диссоциация энергияларини баҳолаш (9)–(11) РРК классик назарияси ва (1)–(3) формулалар бўйича «буғлантирувчи ансамбл» моделларидан биргаликда фойдаланиш асосида ишлаб чиқилган ҳисоблаш методикасидан фойдаланган ҳолда парчаланган ионлар кинетик энергиялари спектрларини ўлчаш негизида амалга оширилди.



6.Расм. $\text{Si}_n\text{O}_{2n+1}^- \rightarrow \text{Si}_{n-1}\text{O}_{2n-2}^- + \text{SiO}_2$ сманфий кластер ионларининг бўлиниш жараёнларида ҳосил бўладиган парчаланган ионлар кинетик энергиялари спектрлари: а) лаборатория системасида (яхлит чизик – гауссиан орқали аппроксимация); б) масса маркази системасида.

6.Расмда SiO_2 чиқариб юбориладиган Si_3O_7^- ва Si_4O_9^- кластерларнинг бўлиниши учун парчаланган ионлар энергияларининг характерли спектрлари келтирилган. Ўлчашлар асосида олинган ва (1)–(3) ҳамда (9)–(11) формулалар орқали ҳисобланган, кислород киритилган шароитда Xe^+ ионлари билан чангланган манфий зарядланган «сехрли» $\text{Si}_n\text{O}_{2n+1}^-$ ($n=2-7$) кластерлар диссоциациялари энергиялари E_d ни ҳисоблаш натижалари 3.Жадвалда келтирилган. Шунингдек солиштириш учун МД-моделлаштириш орқали ҳисобланган [1, р. 1101] нейтрал Si_nO_{2n} ларнинг диссоциация энергиялари бўйича адабиётлардаги катталиклари ҳам келтирилган. Олинган катталиклардан кўринадики, РРК назарияси ва «буғлантирувчи ансамбл»

3.Жадвал. Таблица 3. $(\text{SiO}_2)_n\text{O}^-$ анионлари (E_d) диссоциацияси энергиялари ва $(\text{SiO}_2)_n$ нейтрал кластерлар (E_b) боғланиш энергиялари [1, р. 1101]: (KL) – «буғлантирувчи ансамбл» модели; (RRK) – мономолекуляр реакциялар назарияси.

Анион	Канал распада	E_d , эВ		Нейтральный кластер [1, р. 1101]	E_b , эВ
		KL	RRK		
$(\text{SiO}_2)_2\text{O}^-$	$(\text{SiO}_2)\text{O}^- + \text{SiO}_2$	2,82	2,38	$(\text{SiO}_2)_2$	2,67
$(\text{SiO}_2)_3\text{O}^-$	$(\text{SiO}_2)_2\text{O}^- + \text{SiO}_2$	3,75	3,23	$(\text{SiO}_2)_3$	3,80
$(\text{SiO}_2)_4\text{O}^-$	$(\text{SiO}_2)_3\text{O}^- + \text{SiO}_2$	4,27	3,72	$(\text{SiO}_2)_4$	4,26
$(\text{SiO}_2)_5\text{O}^-$	$(\text{SiO}_2)_4\text{O}^- + \text{SiO}_2$	4,66	4,09	$(\text{SiO}_2)_5$	4,62
$(\text{SiO}_2)_6\text{O}^-$	$(\text{SiO}_2)_5\text{O}^- + \text{SiO}_2$	4,82	4,25	$(\text{SiO}_2)_6$	5,06
$(\text{SiO}_2)_7\text{O}^-$	$(\text{SiO}_2)_6\text{O}^- + \text{SiO}_2$	5,67	5,02	$(\text{SiO}_2)_7$	5,14

моделларидадан фойдаланиб ҳисобланган $(\text{SiO}_2)_n\text{O}^-$ ларнинг диссоциация энергияларининг қийматлари умуман олганда бир-бирига яқин. 4.Жадвалдан келиб чиқадики, $(\text{Si}_n\text{O}_{2n})\text{O}^-$ нинг диссоциация энергияси абсолют қиймати жихати бўйича ҳам, E_d нинг кластер ўлчами $n=2-7$ га боғлиқлиги бўйича ҳам энг стабил бўлган кластерлар $(\text{SiO}_2)_n$ боғланиш энергиялари билан мос тушади. Кислород киритилган шароитда Xe^+ ионлари билан чанглангантирилган $(\text{SiO}_2)_n\text{O}$ кластерларининг диссоциация энергияларининг қиймати E_d , Si кремний сиртини O_2^+ ионлари билан чанглангантирилганда аниқланган диссоциация энергиялари билан мос тушади. Олинган натижалар бир хил стехиометрияли чангланган $(\text{SiO}_2)_n\text{O}^-$ кластерларнинг айнан бир хиллиги ва олинган натижалар уларнинг ҳосил қилиниш методларига боғлиқ эмас деган муҳим хулосани чиқариш имконини беради. Бошқача қилиб айтганда, сиртни ион билин чанглангантиришда синтез қилинган кластер ионларнинг хусусиятлари бомбардимон қилиш шароити ва параметларига боғлиқ эмас экан.

4.Жадвалда парчаланган ионлар энергия спектрини ўлчаш асосида (9)-

4.Жадвал.Мусбат Si_nO_m^+ кластерларининг диссоциация энергиялари (E_d)

Катион	Канал распада	E_d , эВ	
		KL	RRK
Si_2O_3^+	$\text{Si}_2\text{O}_3^+ \rightarrow \text{SiO}^+ + \text{SiO}_2$	2,26	3,20
Si_3O_2^+	$\text{Si}_3\text{O}_2^+ \rightarrow \text{Si}_2\text{O}^+ + \text{SiO}$	0,75	1,06
Si_3O_3^+	$\text{Si}_3\text{O}_3^+ \rightarrow \text{Si}_2\text{O}_2^+ + \text{SiO}$	1,21	1,30
Si_4O_3^+	$\text{Si}_4\text{O}_3^+ \rightarrow \text{Si}_3\text{O}_2^+ + \text{SiO}$	1,14	1,10
Si_4O_4^+	$\text{Si}_4\text{O}_4^+ \rightarrow \text{Si}_3\text{O}_3^+ + \text{SiO}$	1,82	1,65
Si_4O_5^+	$\text{Si}_4\text{O}_5^+ \rightarrow \text{Si}_3\text{O}_4^+ + \text{SiO}$	2,91	2,54
Si_4O_6^+	$\text{Si}_4\text{O}_6^+ \rightarrow \text{Si}_3\text{O}_5^+ + \text{SiO}$	3,72	3,18
Si_5O_2^+	$\text{Si}_5\text{O}_2^+ \rightarrow \text{Si}_4\text{O}^+ + \text{SiO}$	3,0	2,89
Si_5O_6^+	$\text{Si}_5\text{O}_6^+ \rightarrow \text{Si}_4\text{O}_5^+ + \text{SiO}$	2,95	2,49
Si_5O_7^+	$\text{Si}_5\text{O}_7^+ \rightarrow \text{Si}_4\text{O}_6^+ + \text{iO}$	3,70	3,09

(11) РРК назарияси (РРК) ва “буғлангантирувчи ансамбл ” (KL) методларидадан фойдаланиб, Si_nO_m^+ каби қатор мусбат кластерларнинг диссоциация энергияларининг ҳисобланган натижалари келтирилган. Бу натижалар шуни кўрсатяптики, бир хил таркибга эга бўлган мусбат Si_nO_m^+ ва нейтрал Si_nO_m кластерлари бир хил хусусият ва структурага эга экан.

Турли стехиометрик таркиб ва турли ўлчамли кластерларни синтези масаласини ечиш учун ион чанглангантириш методининг

ноёб имкониятларига қарамасдан чиқаётган кластерларнинг тебранма ғалаёнланиши жавобгар механизм ҳалигача ноаниқлигича қолмоқда. Чангланган заррачаларнинг ғалаёнланиш жараёнларининг бомбардимон қилиш шароитларига боғлиқ бўлиши мумкинлигини аниқлаш учун кучли ички молекуляр боғланишга эга бўлган гетероядроли кластерларда тадқиқотлар ўтказиш талаб қилинади, худди шундай кластерлар сарасига кремний оксиди кластерлари киради.

Кислород киритилган шароитда O_2^+ ва Xe^+ ионлари билан чангланган $(\text{SiO}_2)_n\text{O}^-$ кластерларнинг мономолекуляр фрагментациялари тезлик доимийлари k , масс-спектрометрнинг майдонсиз зоналарида Δt_1 ва Δt_2 вақт оралиқларида бўлинишлар сонини солиштириш орқали (4)-(6) формулалар ёрдамида аниқланди. $(\text{SiO}_2)_n\text{O}^-$ ионларининг ўртача бўлиниш тезликлари

5.Жадвал. Кислород киритилган шароитда O_2^+ ва He^+ ионлари билан чанглангирилган $(SiO_2)_nO^-$ ($n=1-6$) кластерларнинг ўртача бўлиниш реакциялари доимийлари k ва ўртача яшаш вақтлари τ_0 .

Бўлиниш канали	O_2^+		He^+	
	$k, *10^5 c^{-1}$	$\tau_0, *10^{-6} c$	$k, *10^5 c^{-1}$	$\tau_0, *10^{-6} c$
$(SiO_2)O^- \rightarrow SiO_2^- + O$	4,6	2,2	4,0	2,5
$(SiO_2)_2O^- \rightarrow (SiO_2)O^- + SiO_2$	2,4	4,1	2,3	4,4
$(SiO_2)_3O^- \rightarrow (SiO_2)_2O^- + SiO_2$	1,9	5,3	1,8	5,7
$(SiO_2)_4O^- \rightarrow (SiO_2)_3O^- + SiO_2$	1,6	6,4	1,5	6,9
$(SiO_2)_5O^- \rightarrow (SiO_2)_4O^- + SiO_2$	1,3	7,6	1,3	7,5
$(SiO_2)_6O^- \rightarrow (SiO_2)_5O^- + SiO_2$	1,2	8,7		

доимийлари k ва ўртача яшаш вақтлари $\tau_0 \equiv 1/k$ нинг қийматлари 5.Жадвалда келтирилган. $(SiO_2)_nO^-$ ($n=1-6$) кластерларнинг бўлиниш тезликлари доимийларининг ўртача қийматлари, эксперимент аниқлиги даражасида, бомбардимон қилувчи ионларининг тури ва массаларига боғлиқ бўлмайди. Ушбу кластерлар диссоциация энергияларининг тенглиги сабабли, (8) ифодага кўра, уларнинг ғалаёнланиш энергиялари бир хил ва амалга оширилган баҳолашларга асосида 0,6-0,8 эВ/атом ни ташкил қилади. Шундай қилиб, O_2^+ ва He^+ ионлари билан чанглангирилган $(SiO_2)_nO^-$ кластерлар фрагментацияси жараёнларини қиёсий тадқиқ қилиш, бўлиниш тезликлари доимийларининг ўртача қийматлари эксперимент аниқлиги даражасида уларнинг генерацияси (ҳосил бўлиши) усулига боғлиқ эмас деган хулоса чиқаришимизга имкон беради. Каскадлардаги тўкнашишлар энергиялари тақсимотининг бомбардимон қилувчи ионларнинг массаси ва энергияларига боғлиқ бўлишига қарамай, олинадиган $(SiO_2)_nO^-$ кластерларнинг ғалаёнланиш энергиялари уларнинг ҳосил бўлиш жараёнида генерация қилиш усулларига боғлиқ эмас экан. Кислород киритиб He^+ ионлари билан чанглангирилган, мусбат зарядланган $Si_nO_m^+$ кластерларининг чангланган мономолекуляр фрагментациялари тезликлари доимийси k ва ўртача яшаш вақтлари τ ни қиёсий баҳолашлар амалга оширилди. Натижалар шуни кўрсатадики, ушбу параметрларнинг қийматлари, $Si_nO_m^-$ кластерлар учун олинган параметрлар билан бир хил тартибда экан.

Кислород киритилган шароитида, He^+ ионлари билан V ва Nb сиртларини чанглангиритиш жараёнида, $V_nO_m^+$ ва $Nb_nO_m^+$ кластерларининг бўлиниш жараёнлари барча мумкин бўлган стехиометрик йўналишлар бўйича ўрганилди. $V_nO_m^+$ кластерлари фрагментацияларини тадқиқ қилиш натижалари, ушбу кластерлар VO_2 , VO_3 ва V_2O_5 структура бирликларидан ташкил топган кластерлар сифатида қараш мумкин, деган хулоса қилишга имкон берапти. Шунингдек, V^+ атомар иони ҳосил бўлиши билан бўлинадиган тарқалган каналнинг мавжудлиги етарлича катта қизиқиш уйғотади. Ушбу факт(омил) шунингдек шундан далолат берадики, эмиссиядан кейинги $<10^{-9}$ с вақт диапозонида кластерлар бўлиниш жараёнлари чангланган атомар ионлар заряд ҳолатларининг шаклланишига

сезиларли ҳисса қўшар экан. $V_nO_m^-$ кластер ионлари бўлиниш жараёнлари учун нейтрал VO_2 нинг узиб олиниши билан юзага келадиган канал характерли экан. $Nb_nO_m^-$ кластер ионларининг фрагментациялари канали ва эҳтимоллиги шуни кўрсатадики, NbO_2 , NbO_3 и Nb_2O_5 бўлинишлар жараёнида энг катта эҳтимолий нейтрал фрагмент бўлиб, у мос равишда $Nb_nO_m^-$ кластерларнинг структуравий блоклари сифатида қаралиши мумкин. Мусбат $Nb_nO_m^+$ бўлинишининг энг кўп тарқалган маҳсулотлари NbO , NbO_2 , NbO_3 нейтрал молекулалар, шунингдек Nb^+ , NbO^+ ва NbO_2^+ ионлари экан.

Эмиссиядан кейинги $\geq 10^{-5}$ с вақтда иккинчи майдонсиз зонада, стандарт методика бўйича асосий каналлар учун $V_nO_m^\pm$ ва $Nb_nO_m^\pm$ кластерларнинг бўлиниш жараёнларида парчаланган ионлар энергияларининг спектрлари ўлчанди. 6.Жадвалда «буғлантирувчи ансамбл» (1)-(3) ва РРК (9)-(11) назарияларидан фойдаланилган методика бўйича $V_nO_m^\pm$ ва $Nb_nO_m^\pm$ кластерларнинг диссоциация энергияларини ўлчаш асосида ҳисоблаш натижалари келтирилган. 6.Жадвалдан кўриниб турибдики, $V_nO_m^\pm$ ва $Nb_nO_m^\pm$ ларнинг ҳар иккала ёндошувда олинган энергия қийматлари бир-бирига яқин.

Заряд ҳолатининг чангланган кластерларнинг фрагментация ва тебранма ғалаёнланиш жараёнларига таъсирини баҳолаш учун ванадий ва ниобий оксидларининг мусбат ва манфий зарядланган ўртача бўлиниш тезликлари доимийлари қиёсий ўрганилди. Чангланган $V_nO_m^\pm$ ва $Nb_nO_m^\pm$ кластерларининг мономолекуляр фрагментациялари тезликлари доимийларини баҳолаш юқорида баён қилинган методикада (4)-(6) бўйича масс-спектрометрнинг майдонсиз зоналарида Δt_1 ва Δt_2 учиниш вақтида бўлинишлар сонини солиштириш орқали амалга оширилди. Олинган

6.Жадвал. $V_nO_m^\pm$ ва $Nb_nO_m^\pm$ кластерлари бўлиниш каналлари ва диссоциация энергиялари (E_d): КІ — "буғлантириш ансамбли"; РРК — мономолекуляр реакциялар назарияси.

Кластер $V_nO_m^\pm$	Бўлиниш каналли	E_d , эВ		Кластер $Nb_nO_m^\pm$	Бўлиниш каналли	E_d , эВ	
		КІ	РРК			КІ	РРК
$V_2O_4^+$	$VO_2^+ + VO_2$	1,90	2,07	$Nb_2O_5^+$	$Nb_2O_4^+ + O$	3,91	3,79
$V_3O_3^+$	$V_2O_2^+ + VO$	2,97	3,24	$Nb_3O_5^+$	$Nb_2O_4^+ + NbO$	2,98	2,72
$V_3O_4^+$	$V^+ + V_2O_4$	3,40	3,28	$Nb_3O_5^+$	$NbO^+ + Nb_2O_4$	2,77	2,53
$V_3O_4^+$	$V_2O_3^+ + VO$	4,01	3,88	$Nb_3O_5^+$	$Nb_2O_3^+ + NbO_2$	3,13	2,85
$V_3O_6^+$	$VO^+ + V_2O_5$	2,47	2,17	$Nb_3O_7^+$	$NbO_2^+ + Nb_2O_5$	2,47	2,12
$V_4O_5^+$	$V_3O_4^+ + VO$	4,17	3,66	$Nb_4O_6^+$	$Nb_3O_4^+ + NbO_2$	4,43	3,82
$V_4O_6^+$	$V_3O_4^+ + VO_2$	3,68	3,16	$Nb_4O_6^+$	$Nb_3O_5^+ + NbO$	4,74	4,09
$V_4O_6^+$	$V_3O_5^+ + VO$	4,04	3,47	$Nb_4O_7^+$	$Nb_3O_5^+ + NbO_2$	3,74	3,18
VO_4^-	$VO_3^- + O$	4.51	5.39	NbO_4^-	$NbO_3^- + O$	5.7	8.2
$V_2O_5^-$	$VO_3^- + VO_2$	4.98	4.81	$Nb_2O_5^-$	$NbO_3^- + NbO_2$	12.6	12.2
$V_3O_7^-$	$V_2O_5^- + VO_2$	5.03	4.31	$Nb_2O_5^-$	$Nb_2O_4^- + O$	10.1	9.8
$V_4O_9^-$	$V_3O_7^- + VO_2$	3.28	2.73	$Nb_3O_8^-$	$NbO_3^- + Nb_2O_5$	1.4	1.2

натижалардан кўринадик, мусбат зарядланган $V_nO_m^+$ ва $Nb_nO_m^{+-}$ ҳамда манфий зарядланган $V_nO_m^-$ ва $Nb_nO_m^-$ кластерларнинг бўлиниш тезликлари доимийлари ва яшаш вақтлари бир тартибли катталиклар чегарасида ётади, (асосан $k=2\div 4\cdot 10^5\text{ с}^{-1}$ бўлганда) ва сезиларли даражада уларнинг заряд ҳолатига боғлиқ эмас. Мусбат ва манфий кластерли ионлар учун диссоциация энергияларининг қиймати, одатда, бир тартибли катталиклар чегарасида ётади; ванадий ва ниобий кластер оксидлари учун 6.Жадвалдан келиб чиқадигандай. Демак, ванадий ва ниобий оксидларининг мусбат ва манфий кластерлари бўлиниш тезликлари доимийларининг сонли қийматларининг бир-бирига яқинлиги шундан далолат берадики, уларнинг ғалаёнланиш энергиялари (8) га мос равишда бир хил ва заряд ҳолатига боғлиқ эмас.

7.Жадвалда «буғлантирувчи ансамбл» доирасида аниқланган (6.Жадвал) кластерларнинг диссоциация энергияларидан фойдаланган ҳолда, $Nb_nO_m^+$ ва $V_nO_m^{\pm}$ кластерларининг ғалаёнланиш энергияларининг (8) формула орқали ҳисоблаш натижалари келтирилган. Олинган натижалар шундан далолат берадики, $Nb_nO_m^+$ ва $V_nO_m^+$ ларнинг солиштира ғалаёнланиш энергиялари

7.Жадвал. Чанглангилган $Nb_nO_m^+$ ва $V_nO_m^{\pm}$ кластерлари уйғониш энергиялари E_v .

Кластер	Канал распада	E_v , эВ	$E_v/\text{атом}$
$Nb_2O_5^+$	$Nb_2O_4^+ + O$	4,13	0,59
$Nb_3O_5^+$	$Nb_2O_4^+ + NbO$	3,24	0,40
$Nb_3O_5^+$	$NbO^+ + Nb_2O_4$	3,00	0,37
$Nb_3O_5^+$	$Nb_2O_3^+ + NbO_2$	3,40	0,42
$Nb_3O_7^+$	$NbO_2^+ + Nb_2O_5$	2,86	0,29
$Nb_4O_6^+$	$Nb_3O_4^+ + NbO_2$	5,14	0,51
$Nb_4O_6^+$	$Nb_3O_5^+ + NbO$	5,49	0,55
$Nb_4O_7^+$	$Nb_3O_5^+ + NbO_2$	4,48	0,41
$V_2O_4^+$	$VO_2^+ + VO_2$	1,96	0,33
$V_3O_3^+$	$V_2O_2^+ + VO$	3,06	0,51
$V_3O_4^+$	$V^+ + V_2O_4$	3,59	0,51
$V_3O_6^+$	$VO^+ + V_2O_5$	2,76	0,31
$V_4O_5^+$	$V_3O_4^+ + VO$	4,71	0,52
$V_4O_6^+$	$V_3O_4^+ + VO_2$	4,28	0,43
$V_4O_6^+$	$V_3O_5^+ + VO$	4,70	0,47
$V_2O_5^-$	$VO_3^- + VO_2$	5,27	0,75
$V_3O_7^-$	$V_2O_5^- + VO_2$	5,88	0,59
$V_4O_9^-$	$V_3O_7^- + VO_2$	4,25	0,33

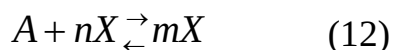
асосан 0,3-0,6 эВ/атом тартибида бўлиб, амалда кластерларнинг ўлчамларига ҳам, уларни ташкил қилувчи атомларнинг турига ҳам боғлиқ эмас экан. 7.Жадвалда шунингдек, $V_nO_m^-$ кластерларининг ғалаёнланиш энергиялари ҳам келтирилган. Ванадий оксидининг қаралаётган мусбат ва манфий кластерли ионларининг ушбу унча катта бўлмаган гуруҳлари учун уларнинг солиштира энергиялари бир-бирига яқин ва заряд ҳолатига сезиларли боғлиқ эмас экан.

«Ион чангланиш жараёнларида кластерлар эмиссияси ва фрагментацияси назарияларининг баъзи

масалалари» номли бешинчи бобда замонавий номувозанатли жараёнлар физикаси тасаввурлари нуктаи назаридан кластерларнинг ҳосил бўлиши ва бўлиниши жараёнларини назарий баён қилишга ҳаракат қилинган. Бомбардимон қилувчи ионларнинг қаттиқ жисм сирти билан ўзаро

таъсирларини ифодалаш учун $\vec{S}$ Умов-Пойнтинг вектори тасаввурларидан фойдаланилди. Агар тажриба шarti (ион нурланиш) $\vec{S} > \vec{v}^* F$, бу ерда $\vec{v}$ - деформациянинг мухитда тарқалиш тезлиги, F - конденсирланган мухитда эластиклик ёки иссиқлик энергияси зичлиги, бўлса у ҳолда мухит бузила бошлайди, яъни унда радиацион шикастланишлар содир бўла бошлайди. Бунда содир бўлаётган жараёнлар ғалаёнланишнинг фрактал тақсимооти тўғрисидаги тасаввурлар асосида таҳлил қилиниши мумкин. «Фрактал кластер» ларнинг шаклланишининг олинган описанияси силжиган атомлар фракталь треклари тасвирларининг шаклланиши жараёнларига ўхшаш.

Ион бомбардимон жараёнида материалларнинг чангланиши ушбу жараёнда кўп сондаги заррачаларнинг иштирок этиши, улар ўзаро таъсирининг ночизиқли характери ва кучли номувозанатли жараёнлар билан характерланиши сабабли чангланиш жараёнларининг ишончли таҳлил базаси сифатида синергетика хизмат қилиши мумкин. Қуйидаги турдаги «реакциялар» тўплами ёрдамида атомлар чангланишини моделлаштириб,



бу ерда A – сирт атомлари, X – чанглангириляётган атомлар, n ва m – бутун сон, асосий кинетик тенгламадан «бир қадамли яқинлашиш» да чангланган атомлар сони (N) эҳтимоллигининг стационар тақсимоотини олиш (N):

$$P_s(N) = P_s(0) \prod_{Z=1}^N \frac{t^+(Z-1)}{t^-(Z)} \quad (13),$$

бу ерда $t^+(Z-1)$ ва $t^-(Z)$ – бир атомли туғилиш ва ҳалок бўлиш эҳтимоллиги, мос равишда $(Z-1)$ ва (Z) лар тўлдирилиш сонлари. (12) мувозанатли реакция силжишлари жараёнида $P_s(N)$ нопуассон характерга эга бўлади (тажрибага мос равишда). Мос тушмайдиган (13) соҳа учун катта N ларда қуйидагини:

$$-\partial \ln P_s(N) / \partial \ln N \equiv \alpha > 1 \quad (14)$$

$Y(N) \sim N^{-\alpha}$ кластерлар чиқиши интенсивлигининг тажрибада олинган тақсимоотига мос равишда. Синергетик ёндошув (12) типдаги тўғри ва тескари реакция доимийларини танлаш йўли билан интеграл ҳолатларни ҳам, кластер чангланиши ҳолатларини ҳам ифодалаш имкониятига эга.

Стохастизация жараёнларини ўрганиш термочўққилар ва чизиқли каскадлар орасида мавжуд оралиқ соҳани тушуниш имконини беради. Ушбу тартибда (режим) жараёнларни тасвирлашда жараёнлар тўллами деб аталувчи- бир актнинг ўзида кўп сондаги заррачаларнинг пайдо бўлиши тасаввурларидан фойдаланиш мумкин. n та заррачани бир вақтда туғилиш:

$$W_n = \frac{2\pi}{\hbar} |M_n|^2 \prod_{i=1}^n \frac{V d\vec{p}_i}{(2\pi)^3} \delta\left(E - \sum_{i=1}^n E_i\right) \quad (15).$$

бу ерда M_n – кўп сондаги жараёнларга мос келувчи матрик элемент, V – заррачалар «туғиладиган» нормаллаштирилган ҳажм, $\vec{p}_i$ - i -чи заррача импульси, E ва E_i – заррачанинг тўла ва парциал энергияси, $\delta(\dots)$ – Дирак дельта-функцияси. Бундай ёндошувга кўра, нурлантираётган заррачанинг сирт билан таъсирлашаётганида энергия «бир зумда» ажралади ва

ғалаёнланиш сохадаги атомга узатилади. Натижада N заррачанинг бир вақтнинг ўзида ғалаёнланиши учун ёзиладиган квантомеханик ифода статистик оғирликлар нисбати $S(N)$ билан алмаштирилади. Қаттиқ жисмдан n атом ва p электроннинг чиқиб кетиши тўғрисидаги масаладан қуйидагини:

$$S(n, p) = \left(\frac{\Omega}{8\pi\hbar^3} \right)^n \left(\frac{dQ}{dE} \right) = \frac{(2\pi)^{\frac{3}{2}(n+p)} (M^n m^p)^{\frac{3}{2}} \Omega^{n+p} (E - nE_a - pE_i)^{\frac{3}{2}(n+p)-1}}{(8\pi^3\hbar^3)^{n+p} \Gamma\left(\frac{3}{2}(n+p)\right)}, \quad (16)$$

бу ерда $\Gamma(x)$ – гамма-функция, Ω геометрик ҳажм сифатида сирт билан бомбардимон қилувчи заррача ўртасидаги тўқнашувда E энергия ажралиб чиқадиган кристалл ҳажми қаралади. Бир вақтнинг ўзида ҳам n атом, ҳам p электроннинг учиб чиқиш эҳтимоллиги:

$$W(n, p) = S(n, p) / \sum_{n,p} S(n, p) \quad (17)$$

Бу ердан атом ва электронлар учун ўртача чиқишни олишимиз мумкин: $\bar{n} = \sum_{n,p} nW(n, p)$ ва $\bar{p} = \sum_{n,p} pW(n, p)$.

«Буғлантирувчи ансамбли» моделлари (1)-(3) дан биргаликда фойдаланишга асосланган, биз томонимиздан ишлаб чиқилган ҳамда юқорида келтирилган методика ва РРК назарияси чангланган кластерларнинг диссоциация энергиялари каби муҳим параметрларини аниқлаш имконини беради. Юқорида келтирилган методиканинг амалда муваффақиятли қўлланилишига қарамай, назарий нуқтаи-назардан чангланган номувозанатли кластер структуралардаги метатурғун (метастабил) атомларнинг тадқиқот натижаларига – уларнинг диссоциация энергиялари E_d га таъсир қилиши эҳтимоллиги масаласи ҳануз ноаниқ.

Сиртни ион бомбардимон қилиш жараёнида эмиттирланган ва синтез қилинган кластерларнинг стабил шаклга эга бўлиш вақтлари номувозанатли кластер турғун конфигурацияга яқин конфигурацияга эга, лекин ундаги баъзи атомларномувозанатли ҳолатда ва атомнинг релаксацияси куч майдони таъсирида τ_d вақт ичидаги дрейф туфайли содир бўлади деб фараз қилиниб баҳоланди. Дрейф вақти қуйидагича баҳоланади:

$$\tau_d \approx (R^2 \tau_0 kT^*) / (a^2 \Delta\mu), \quad (18)$$

$\Delta\mu \sim 1-2$ эВ катталик узилаётган боғланишлар сони билан боғлиқ, $a \approx 5\text{\AA}$ – панжара параметри, $R \approx 100\text{\AA}$ – катта чангланган кластернинг ўлчами, $\tau_0 = 10^{-13}\text{с}$ – атом тебранишлари даври; диффузия температураси $kT^* \sim 1$ эВ/атом уйғотилган кластер тебранишларига мос келади. Бу эса номувозанатли ҳолатдан атомлар дрейфи орқали мувозанатли конфигурацияларнинг ўрнатилиш вақтини $\tau_d \leq 5 \cdot 10^{-11}\text{с}$ беради. Олинган баҳолашлар шундан далолат берадики, кластерлар фрагментацияси жараёнларини экспериментал тадқиқ қилиш ва уларнинг диссоциация энергияларини аниқлаш учун парчаланган ионлар кинетик энергиялари спектрларини ўлчаш эмиссиядан кейинги $10^{-5}-10^{-4}$ вақтда, яъни номувозанатли структуралар релаксациялари тугагандан сўнг амалга оширилди. Айни вақтда кўрсатиб ўтилган номувозанатли кластерлар релаксациялари жараёнлари эмиссиядан кейинги $\tau < 10^{-9}\text{с}$ вақтида

фрагментациялар бўлиниши жараёнида кластерларнинг ҳосил бўлиши билан белгиланадиган алоҳида гуруҳ кластерлар чиқишининг ортиши механизмларини тушунтириб бериши мумкин.

Иқтибос қилинган адабиёт.

1. Harkless J.A.W., Stillinger D.K., Stillinger F.H. Structures and Energies of SiO_2 Clusters. //J. Phys. Chem. - 1996. - vol. 100. - pp. 1098-1103.

ХУЛОСА

Ушбу диссертацион иш ион бомбардимон туфайли ҳосил бўладиган зарядланган кластерларнинг бўлиниш (диссоциация) активация энергиялари, бўлинишнинг ўртача тезлиги доимийси ва ўртача яшаш вақти, ўртача ғалаёнланиш энергиялари каби фундаментал хусусиятларини ниқлашнинг эффектив методларини ишлаб чиқиш ва уларни синовдан ўтказишга бағишланган. Тадқиқот натижалари бўйича хулосаларни чиқариш мумкин:

1. Айнан бир хил тажриба шароитларда Ag , Nb ва Ta сиртларини оғир атомар Xe^+ ва массалари жиҳатдан яқин бўлган SF_5^+ молекуляр ионлар билан тўзғитиш жараёнларида массалар тақсимооти ва кластерлар фрагментациялари жараёнлари қиёсий тадқиқ қилинди. Массалари бир-бирига яқин бўлган атомар ва молекуляр ионлар билан тўзғитилиш жараёнларида, Ag_n^+ ва Nb_n^+ металлларининг гомоядроли кластерларининг чиқиши бир хил, улар интенсивлигида кузатиладиган фарқлар эса тўзғиётган заррачаларнинг ионлашиш эҳтимоллиги билан боғлиқ эканлиги; Ag_n^+ и Nb_n^+ кластерларининг ўртача парчаланиш тезлиги доимийси k ва яшаш вақтлари τ бир хил эканликлари кўрсатиб берилди.

2. Парчаланган ионларнинг кинетик энергиясини ўлчашга асосланган, чанглантирилган кластерли ионларнинг диссоциацияланиш энергияларини баҳолаш ва классик вариантдаги Райс-Рамспергер-Кассель (РРК) ларнинг мономолекуляр реакциялари назарияси доирасида ўлчаш натижаларини қайта ишлашга асосланган методикаси ишлаб чиқилди.

3. Nb_mC_n^+ кластерларнинг Xe^+ ионлари билан чангланишидаги бўлинишларидаги парчаланган ионлар кинетик энергиялари ўлчанди, улар асосида РРК ва «буғлантирувчи ансамбл» назарияларини биргаликда қўллаш натижасида ишлаб чиқилган методика ёрдамида уларнинг диссоциация энергиялари ҳисобланди. Ҳар иккала назария доирасида аниқланган диссоциация энергияларининг бир-бирига ва кузатиладиган Nb_mC_n^+ кластерлар эмиссияси ва фрагментацияси қонуниятлари билан яхши мос келиши кўрсатиб берилган. Чанглантирилган кластерлар диссоциация энергияларини аниқлаш учун ҳар иккала назарий ёндошувлардан фойдаланган ҳолда ишлаб чиқилган ягона ҳисоблаш методикасидан фойдаланишнинг мақсадга мувофиқ эканлиги хулоса қилинди.

4. Бомбардимон қилиш кислород киритилганда ксенон ионлари билан чангланган Si , V ва Nb сиртларида $\text{Si}_n\text{O}_m^{\pm}$ ($n=1-11$, $m=1-23$), $\text{V}_n\text{O}_m^{\pm}$ ($n=1-8$, $m=1-14$) ва $\text{Nb}_n\text{O}_m^{\pm}$ ($n=1-6$, $m=1-13$) кластерларининг масс-спектрал таркиби ўлчанди. Бомбардимон қилиш камерасидаги кислород босими ва бирламчи

ионлар табиатига боғлиқ бўлган кластерлар ҳосил бўлиши ва эмиссиясининг эффектив шарт-шароитлари топилди (аниқланди). Кислород киритилганда сиртни Xe^+ ионлари билан бомбардимон қилиш оксидли кластерларни генерация (ҳосил) қилишнинг самарали методи эканлиги аниқланди.

5. Парчаланган ионлар кинетик энергиялари спектрларини ўлчаш асосида “буғлантирувчи ансамбл” ва Райс-Рамспергер-Кассел (РРК) назариялари доирасида ҳисобланган $\text{Si}_n\text{O}_{2n+1}^-$ ($n=2-7$) ва Si_nO_m^+ кластерлар E_d диссоциацияси энергиялари қийматлари бир хил эканлиги ва O_2^+ ва Xe^+ ионлари билан чангланган $\text{Si}_n\text{O}_{2n+1}^-$ ($n=2-7$) кластерларининг диссоциация энергиялари бир хил эканлиги, яъни ушбу кластерлар структуралари уларнинг генерация усулига боғлиқ эмаслиги кўрсатилди.

6. Чангланган $\text{Si}_n\text{O}_{2n+1}^-$ ($n=2-7$) кластерлар диссоциация энергияларининг топилган сонли қийматлари асосан циклик структурага эга бўлган асосий ҳолатдаги Si_nO_{2n} нейтрал кластерлари диссоциация энергияларининг назарий йўл билан топилган қийматлари билан мос тушиши кўрсатилди.

7. $\text{Si}_n\text{O}_{2n+1}^-$ ($n=1-6$) ва Si_nO_m^+ ($n=1,2$) чангланган кластерларнинг ўртача яшаш вақтлари τ_0 , парчаланиш тезликлари доимийлари k ва ғалаёнланиш энергиялари аниқланди. Кислород киритилганда O_2^+ ва Xe^+ ионлари билан чанглангантирилган $\text{Si}_n\text{O}_{2n+1}^-$ учун бу олинган параметрлари катталиклари, шунингдек чангланган кластерларнинг ғалаёнланиш энергияларининг уларнинг ҳосил бўлиш усулларига боғлиқ эмаслиги кўрсатилди.

8. Кислород киритилган ҳолда V ва Nb ларни Xe^+ ионлари билан чанглангириш жараёнида сиртда $\text{V}_n\text{O}_m^\pm$ ва $\text{Nb}_n\text{O}_m^\pm$ кластерларининг парчаланиши (бўлиниши) тадқиқ қилинди. $\text{V}_n\text{O}_m^\pm$ ва $\text{Nb}_n\text{O}_m^\pm$ ларнинг асосий бўлиниш реакциялари учун парчаланган ионларнинг кинетик энергиялари спектрлари ўлчанди, биринчи марта $\text{V}_n\text{O}_m^\pm$ ва $\text{Nb}_n\text{O}_m^\pm$ ларнинг парчаланган кластерларининг диссоция энергиялари аниқланди.

9. Асосий фрагментация каналлари учун $\text{V}_n\text{O}_m^\pm$ ва $\text{Nb}_n\text{O}_m^\pm$ кластерлар ўртача бўлиниш тезликлари доимийларининг ўртача қийматлари аниқланди. Ўхшаш стехиометрияли кластерлар бўлиниш тезликлари доимийлари сонли қийматларининг уларнинг заряд ҳолатига боғлиқ эмаслиги, чангланган кластерларда ғалаёнланиш солиштирма энергияларининг кластерлардаги атомлар турига боғлиқ эмаслиги кўрсатилди.

10. Ион бомбардимон қилиш жараёнида материалларнинг чангланиши ҳодисасига синергетик ёндошувни қўллаш, чанглангантирилган кластерларнинг кузатиладиган масса тақсимотларини яхшироқ тасвирлаш имконини беради; чангланган атомларнинг ўртача чиқиши учун олинган ифодалардан фойдаланиб, чизиқли каскадлар ва термочўққилар орасидаги оралик соҳаларни тасвирлаб берувчи янги назарий таҳлил методи тавсия қилинди.

11. Тўзғитилган номувозанатли кластерлар релаксация вақтлари назарий жиҳатдан баҳоланди. Ушбу жараёнларнинг РРК мономолекуляр реакциялар ва Клотснинг «буғланиш ансамбли» назариясидан фойдаланиб олинган натижалар аниқлигига таъсир қилмаслиги, лекин $\tau < 10^{-9}$ с вақтида чангланган кластерлар фрагментациялари учун жавобгар эканлиги кўрсатилди.

**НАУЧНЫЙ СОВЕТ DSc.02/30.12.2019.FM.65.01 ПО ПРИСУЖДЕНИЮ
УЧЕНЫХ СТЕПЕНЕЙ ПРИ ИНСТИТУТЕ ИОННО-ПЛАЗМЕННЫХ И
ЛАЗЕРНЫХ ТЕХНОЛОГИЙ**

**ИНСТИТУТ ИОННО-ПЛАЗМЕННЫХ И ЛАЗЕРНЫХ ТЕХНОЛОГИЙ
ИМЕНИ У.А.АРИФОВА
АКАДЕМИИ НАУК РЕСПУБЛИКИ УЗБЕКИСТАН**

МАКСИМОВ СЕРГЕЙ ЕВЛАНТИЕВИЧ

**ФУНДАМЕНТАЛЬНЫЕ СВОЙСТВА КЛАСТЕРНЫХ ИОНОВ,
РАСПЫЛЕННЫХ С ПОВЕРХНОСТИ ПОД ДЕЙСТВИЕМ ИОННОЙ
БОМБАРДИРОВКИ**

01.04.04 – Физическая электроника

**АВТОРЕФЕРАТ ДИССЕРТАЦИИ ДОКТОРА (DSc)
ФИЗИКО-МАТЕМАТИЧЕСКИХ НАУК**

Ташкент–2020

Тема диссертации доктора наук (Doctor of Science) зарегистрирована в Высшей аттестационной комиссии при Кабинете Министров Республики Узбекистан за № B2020.3.DSc/FM138

Диссертация выполнена в Институте ионно-плазменных и лазерных технологий им. У.А.Арифова АН РУз.

Автореферат диссертации на трех языках (узбекский, русский, английский (резюме)) размещён на веб-странице по адресу www.iplt.uz и на Информационно-образовательном портале «Ziynet» по адресу www.ziynet.uz.

Научный консультант:

Ашуров Хатам Бахронович
доктор технических наук, профессор

Официальные оппоненты:

Кремков Михаил Витальевич
доктор физико-математических наук, профессор

Умирзаков Болтахожа Ерматович
доктор физико-математических наук, профессор

Усманов Дилшадбек Турсунбаевич
доктор физико-математических наук, с.н.с.

Ведущая организация:

Национальный Университет Узбекистана

Защита диссертации состоится « 03 » 12 2020г. в 14⁰⁰ часов на заседании Научного совета DSc.02/30.12.2019.FM.65.01 по присуждению ученых степеней при Институте ионно-плазменных и лазерных технологий АН РУз по адресу: 100125, г.Ташкент, ул. Дурмон йули, 33. Тел./Факс: (99871) 262-32-54, e-mail: info@iplt.uz.

С диссертацией можно ознакомиться в Информационно-ресурсном центре Института ионно-плазменных и лазерных технологий (зарегистрирован за № 4). Адрес: 100125, г.Ташкент, ул. Дурмон йули, 33. Тел.: (99871) 262-31-69).

Автореферат диссертации разослан « 26 » 11 2020 года.
(Реестр протокола рассылки 4 от « 26 » 11 2020 года).




С.А.Бахрамов
Зам. председателя научного совета по присуждению ученых степеней, д.ф.-м.н., профессор

И.Д.Ядгаров
Ученый секретарь научного совета по присуждению ученых степеней, д.ф.-м.н., с.н.с

Ш.Д. Пайзиев
Председатель научного семинара при научном совете по присуждению ученых степеней, д.ф.-м.н., с.н.с.

ВВЕДЕНИЕ (аннотация докторской (DSc) диссертации)

Актуальность и востребованность темы диссертации.

Бомбардировка поверхности твёрдых тел ускоренными ионами приводит к эмиссии как нейтральных, так и заряженных атомов мишени, а также отдельных многоатомных фрагментов распыляемого вещества – кластеров (агрегаты атомов или молекул). В последние годы наблюдается существенный рост интереса к изучению природы и свойств кластеров и наночастиц, являющихся переходным состоянием между изолированным атомом и твёрдым телом и представляющих большой интерес как с точки зрения фундаментальных исследований, так и широкого круга прикладных задач. Кластеры могут быть сформированы из атомов одного и того же химического элемента или из двух или более разных типов, а их размеры могут варьироваться от нескольких до тысяч составляющих атомов. Эффекты конечного размера приводят к электронным, оптическим, магнитным, химическим и другим свойствам, которые могут сильно отличаться от свойств того же материала в объёмном виде. С теоретической точки зрения, кластеры используются в качестве моделей для исследования фундаментальных физических аспектов перехода от атомного масштаба к объёмному материалу.

Ионная обработка материалов является одним из методов решения многочисленных исследовательских и промышленных задач, в котором атомные и молекулярные кластеры широко применяются в течение последних десятилетий. Особо важную роль кластерные ионные пучки играют во вторично-ионной масс-спектрометрии (ВИМС), в частности, при анализе органических соединений и получении с высоким разрешением профилей распределения примесей по глубине.

Генерация кластеров при распылении материалов ускоренными ионами занимает особое место среди других методов их получения, поскольку путём подбора распыляемого материала и сорта бомбардирующих частиц возможно получать гомо- и гетероядерные кластеры, которые в ряде случаев трудно или вообще невозможно синтезировать другими способами, а высокая доля заряженных и возбужденных кластеров даёт возможность проведения исследований их фундаментальных свойств в рамках единых с процессами образования экспериментов, т.к. не требуется дополнительных средств для их возбуждения, ионизации и фрагментации. Однако, несмотря на уникальные возможности данного метода, до сих пор отсутствует комплексная методика определения наиболее важных свойств кластеров, распыленных ионной бомбардировкой, а природа процессов образования и эмиссии кластеров при ионном распылении до сих пор остаётся во многом неясной. Очевидно, что поиск новых перспективных кластеров и исследование их фундаментальных свойств является **актуальной** проблемой не только физической электроники и физики малых частиц, но и современных нанотехнологий и материаловедения.

Данная диссертационная работа в определенной степени соответствует задачам, предусмотренных в Указе Президента Республики Узбекистан № УП-4947 «О Стратегии действий по дальнейшему развитию Республики Узбекистан» от 07-февраля 2017 года². Данное диссертационное исследование в определенной степени служит выполнению задач, предусмотренных в Постановлении Президента Республики Узбекистан ПП-1442 «О приоритетных направлениях развития индустрии Республики Узбекистан на 2011-2015 гг.» от 15 декабря 2015 года, № УП-4947 «Стратегия действий по пяти приоритетным направлениям развития Республики Узбекистан в 2017-2021 годах» от 7 февраля 2017 года и №ПП-2789 «О мерах по дальнейшему совершенствованию деятельности Академии наук, организации, управления и финансирования научно-исследовательской деятельности» от 17 февраля 2017 года, а также в других нормативно-правовых документах, принятых в Республике за последние годы в данной сфере.

Соответствие исследования приоритетным направлениям развития науки и технологий Республики Узбекистан.

Данная исследовательская работа выполнена в соответствии с приоритетными направлениями развития науки и технологий Республики Узбекистан: II «Физика, астрономия, энергетика и машиностроение», III «Энергетика, энергоресурс сбережение, транспорт, машиностроение и приборостроение, развитие современной электроники, микроэлектроники, фотоники, электронного приборостроения».

Обзор зарубежных научных исследований по теме диссертации³

Научные исследования в области образования и эмиссии кластерных частиц под действием ионной бомбардировки и в области взаимодействия кластеров с различными материалами (поверхности твёрдых тел, плёнки, адсорбаты, органические и биоорганические материалы) проводятся в ведущих научных центрах, в том числе: Argonne National Laboratory (США), Pennsylvania State University (США), Texas A&M University (США), University of Kaiserslautern (ФРГ), University of Duisburg-Essen (ФРГ), University of Rostock (ФРГ), University of Hyogo (Япония), Japan Atomic Energy Research Institute (Япония), Universite Paris Sud (Франция), Université Catholique de Louvain (Бельгия), Technion - Israel Institute of Technology (Израиль), Wuhan University (КНР), University of Helsinki (Финляндия), Jagiellonian University (Польша), Московский государственный университет (Россия), НИЯФ МИФИ (Россия), Северный (Арктический) Федеральный университет (Россия), Институт ионно-плазменных и лазерных технологий АН РУз (Узбекистан).

²Стратегия действий по пяти приоритетным направлениям развития Республики Узбекистан в 2017-2021 годах // приложение № 1 к Указу Президента Республики Узбекистан от 7 февраля 2017 года № УП-4947, п. 3.2.

³Обзор зарубежных научных исследований по теме диссертации разработан на основе: www.sciencedirect.com, www.springerlink.com, www.elsevier.com, www.scopus.com, www.nature.com, www.oxfordjournals.org, www.sciencemag.org, www.northcarolina.edu, www.umb.edu, www.osu.edu, www.stonybrook.edu, www.bw.edu, www.msu.ru, и других источников.

В настоящее время над этой проблемой интенсивно работают многочисленные учёные во всем мире, среди которых можно отметить группы, научное руководство которыми осуществляют М.Пеллин, Б.Гаррисон, Н.Виноград, Э.Швейкерт, А.Вухер, Х.Гназер, Х.Урбассек, К.-Х.Майвес-Брёер, Х.Ямамото, А.Делькорте, Э.Колодный, Д.Фу, К.Нордлунд, З.Постава, Е.С.Машкова, В.Е.Юрасова, В.С.Черныш, А.М.Борисов, Ф.Г.Джурабекова, В.И.Матвеев.

Целью проводимых исследований взаимодействия кластеров с поверхностью и тонкими плёнками является их применение для создания и модификации материалов осаждением из кластерных пучков, осуществление специфических химических реакций при взаимодействии кластеров с поверхностью, управляемого изменения рельефа поверхности, а также проведение ионной имплантации с созданием большого градиента распределения легирующей примеси. Особое место кластерные пучки занимают в решении задач вторично-ионной масс спектроскопии (ВИМС) для распыления органических материалов и получения с высоким разрешением профилей распределения примесей по глубине. Следует особо отметить высокий уровень международного научного сотрудничества исследовательских групп из различных стран, в первую очередь, при проведении комплексных исследований, включающих как экспериментальное изучение вопроса, так и компьютерное моделирование соответствующих многоатомных процессов.

Степень изученности проблемы. Исследования процессов кластерной эмиссии при ионном распылении проводятся с конца 50-х годов прошлого века. Эксперименты, выполненные в 60-80-е годы, были посвящены закономерностям эмиссии заряженных кластеров при различных условиях ионной бомбардировки. Работы, проведённые в 80-90-е годы, были связаны в большей степени с изучением нейтральной кластерной компоненты, распыленной в различных режимах. Со второй половины 90-х годов началось интенсивное изучение процессов эмиссии как заряженных, так и нейтральных кластеров под действием бомбардировки полиатомными ионами, тесно связанное с началом широкого применения кластерных пучков в различных приложениях ионных технологий.

Особое место в исследованиях кластерного распыления принадлежит ташкентской школе Института электроники Академии Наук Узбекистана, экспериментальные и теоретические исследования которой, выполненные в 70-90-е годы, носят во многом пионерский характер. Фундаментальное значение имело открытие в середине 80-х годов Н.Х.Джемилевым, У.Х.Расулевым и С.В.Верхотуровым явления фрагментации распыленных кластеров. В дальнейшем в 80-90 годы были проведены исследования процессов распада распыленных кластерных ионов и разработаны методики определения их важнейших параметров, которые являются во многих отношениях уникальными. Применение данных методик позволило определить такие характеристики ряда заряженных кластеров, как

распределения по константам скорости фрагментации и временам жизни, а также энергиям возбуждения. Разработанная на основе теоретической модели «испарительного ансамбля» методика определения энергии диссоциации гомоядерных кластерных ионов даёт возможность оценить стабильность распыленных частиц и найти, в частности, структуры с повышенной стабильностью. Данная методика была в дальнейшем модифицирована нами для её применения к гетероядерным кластерам. Однако, вопрос о том, возможно ли использовать модель «испарительного ансамбля» для определения энергий диссоциации любых распыленных гетероядерных кластеров независимо от стехиометрического состава и возможной структуры, остался, вообще говоря, открытым.

Следует отметить также, что несмотря на проведённые к настоящему времени обширные экспериментальные и теоретические исследования, природа процессов образования и эмиссии кластеров при ионной бомбардировке поверхности остаётся во многом неясной, а созданные многочисленные теоретические модели и механизмы, как правило, адекватно описывают лишь отдельные наблюдаемые закономерности явления.

Связь диссертационного исследования с планами научно-исследовательских работ высшего образовательного или научно-исследовательского учреждения, где выполнена диссертационная работа. Диссертационное исследование выполнено в рамках плана научно-исследовательских работ следующих проектов института Ионно-плазменных и лазерных технологий: 2/98 ГКНТ «Изучение физико-химических свойств сверхстабильных металл-углеродных кластеров, синтезированных ионным распылением» (1998-2000); № 40-02 ФПФИ «Исследование образования и эмиссии кластерных частиц под действием бомбардировки молекулярными ионами» (2002-2003), № 44-04 ФПФИ «Распыленные кластерные ионы: кинетические энергии распада и механизм возбуждения» (2004-2005); № 57-06 ФПФИ «Исследование эволюции масс- и энергетических распределений вторичных ионов в процессе фрагментации кластеров, распыленных ионной бомбардировкой» (2006-2007); № Ф-2-1-30 «Исследование образования и фундаментальных свойств кластеров оксидов металлов, синтезированных ионной бомбардировкой: исследования с точки зрения создания новых материалов» (2003-2007); № ФА-Ф2-Ф096 «Исследование кинетических энергий распада, стабильности и механизма образования молекулярных кластеров оксидов металлов, синтезированных ионной бомбардировкой» (2007-2011); № Ф2-ФА-Ф157 «Механизмы образования, возбуждения и мономолекулярного распада металлических, полупроводниковых и оксидных полимерных кластеров при ионной бомбардировке» (2012-2016); ОТ-Ф3-11 «Исследование процессов переноса и релаксации в структурах кремния и его оксида различной размерности с точки зрения материалов для альтернативной энергетики и наноэлектроники» (2017-2020).

Целью исследования является разработка и апробация эффективной методики определения фундаментальных свойств распыленных ионной

бомбардировкой заряженных кластеров, включая энергии активации распадов (диссоциации).

В соответствии с поставленной целью сформулированы следующие **задачи**:

провести в идентичных условиях экспериментов при распылении поверхностей пучками тяжёлых атомарных ионов Xe^+ и близких им по массе молекулярных ионов SF_5^+ сравнительные исследования масс-распределений и процессов фрагментации кластеров Ag_n^+ , Nb_n^+ и Ta_n^+ ;

разработать в рамках классического варианта теории мономолекулярных реакций Райса-Рамспергера-Касселя (РРК) методику оценки энергий диссоциации распыленных кластерных ионов, основанную на измерении спектров кинетических энергий осколочных ионов, и оценить с её использованием энергии диссоциации кластеров Nb_mC_n^+ , распыленных ионами Xe^+ с поверхности карбида ниобия;

разработать эффективную методику генерации при распылении поверхностей Si, Nb и V оксидных кластеров $\text{Si}_n\text{O}_m^\pm$, $\text{V}_n\text{O}_m^\pm$ и $\text{Nb}_n\text{O}_m^\pm$ с различным числом атомов n и m;

для основных каналов фрагментации имеющих наибольшие выходы распыленных кластеров $\text{Si}_n\text{O}_m^\pm$ измерить спектры кинетических энергий их осколочных ионов и рассчитать на основе проведённых измерений численные значения энергий диссоциации данных кластеров в рамках моделей “испарительного ансамбля” и теории Райса-Рамспергера-Касселя (РРК), определить для этих кластеров $\text{Si}_n\text{O}_m^\pm$ средние константы скорости распада и средние времена жизни;

исследовать при распылении поверхностей V и Nb процессы фрагментации кластеров $\text{V}_n\text{O}_m^\pm$ и $\text{Nb}_n\text{O}_m^\pm$, для главных реакций распада $\text{V}_n\text{O}_m^\pm$ и $\text{Nb}_n\text{O}_m^\pm$ измерить спектры кинетических энергий осколочных кластерных ионов, обработкой результатов этих измерений в рамках теорий «испарительного ансамбля» и мономолекулярных реакций РРК определить энергии диссоциации данных кластеров; для основных каналов фрагментации кластеров $\text{V}_n\text{O}_m^\pm$ и $\text{Nb}_n\text{O}_m^\pm$ определить значения средних констант скорости распада и средние энергии возбуждения;

разработать основы теоретических подходов к качественному описанию процессов образования кластеров при ионном распылении с точки зрения представлений физики сильно неравновесных процессов, теоретически оценить время релаксации распыленных неравновесных кластерных структур и их возможное влияние на результаты, полученные с использованием теорий «испарительного ансамбля» Клотса и мономолекулярных реакций РРК.

Объектом исследования являются распыленные кластерные ионы Ag_n^+ , Nb_n^+ , Ta_n^+ , Nb_nC_m^+ , $\text{Si}_n\text{O}_m^\pm$, $\text{V}_n\text{O}_m^\pm$ и $\text{Nb}_n\text{O}_m^\pm$.

Предметом исследования являются процессы эмиссии и фрагментации кластерных ионов Ag_n^+ , Nb_n^+ , Ta_n^+ , Nb_nC_m^+ , $\text{Si}_n\text{O}_m^\pm$, $\text{V}_n\text{O}_m^\pm$ и $\text{Nb}_n\text{O}_m^\pm$, распыленных с поверхностей материалов при ионной бомбардировке.

Методы исследования: вторично-ионная масс-спектрометрия; теория «испарительного ансамбля»; теория мономолекулярных реакций.

Научная новизна исследования заключается в следующем:

показано, что при распылении в идентичных условиях экспериментов поверхностей Ag, Nb и Ta пучками тяжёлых атомарных ионов Xe^+ и близких по массе молекулярных ионов SF_5^+ выходы кластеров гомоядерных кластеров металлов Ag_n и Nb_n одинаковы, а наблюдаемые различия в интенсивностях связаны с вероятностью ионизации распыленных частиц;

определены средние константы скорости распада и времена жизни ряда распыленных кластеров Ag_n^+ , Au_n^+ , Cu_n^+ , Nb_n^+ и Ta_n^+ , определены средние энергии возбуждения ряда кластеров Nb_n^+ и Ta_n^+ ; показано, что средние константы скорости распада и времена жизни кластеров, распыленных близкими по массе атомарными и молекулярными ионами, одинаковы;

разработана методика оценки энергий диссоциации распыленных заряженных кластеров, основанная на измерении спектров кинетических энергий осколочных ионов и обработки результатов измерений в рамках классического варианта теории мономолекулярных реакций Райса-Рамспергера-Касселя (РРК), с использованием которой оценены энергии диссоциации распыленных ионами Xe^+ ряда кластеров Nb_mC_n^+ ; обоснована целесообразность применения для определения энергий диссоциации распыленных кластеров разработанной единой расчётной методики на основе совместного использования теорий «испарительного ансамбля» и РРК;

определены эффективные условия образования и эмиссии кластеров $\text{Si}_n\text{O}_m^\pm$, $\text{V}_n\text{O}_m^\pm$ и $\text{Nb}_n\text{O}_m^\pm$ при распылении поверхностей Si, V и Nb ионами ксенона и напуске кислорода в камеру бомбардировки;

показано, что численные значения энергий диссоциации кластеров $\text{Si}_n\text{O}_{2n+1}^-$ ($n=2-7$) и Si_nO_m^+ , рассчитанные в рамках теорий «испарительного ансамбля» и РРК на основе проведённых измерений спектров кинетических энергий осколочных ионов, идентичны в пределах точности методик, и что энергии диссоциации E_d кластеров $\text{Si}_n\text{O}_{2n+1}^-$ ($n=2-7$), распыленных ионами O_2^+ и Xe^+ с напуском кислорода, одинаковы, т.е. структуры данных кластеров не зависят от способа их генерации;

определены средние константы скорости распада и средние времена жизни кластеров $\text{Si}_n\text{O}_{2n+1}^-$ ($n=1-6$) и Si_nO_m^+ , ($n=1,2$);

исследованы процессы фрагментации кластеров $\text{V}_n\text{O}_m^\pm$ и $\text{Nb}_n\text{O}_m^\pm$, распыленных с поверхностей V и Nb ионами Xe^+ с напуском кислорода на поверхности; измерены для главных реакций распада ряда $\text{V}_n\text{O}_m^\pm$ и $\text{Nb}_n\text{O}_m^\pm$ спектры кинетических энергий осколочных ионов, на основании которых в рамках разработанной методики с использованием теорий «испарительного ансамбля» и РРК определены их энергии диссоциации; определены значения средних констант скорости распада распыленных кластеров $\text{V}_n\text{O}_m^\pm$ и $\text{Nb}_n\text{O}_m^\pm$ для основных каналов фрагментации; показано, что численные значения констант скорости распада кластеров сходной стехиометрии не зависят от их

зарядового состояния, а удельная энергия возбуждения в распыленных кластерах не зависит ни от типа атомов в кластерах, ни от их заряда;

показано теоретически, что формирование пространственной картины трека смещённых атомов в линейном каскаде может быть описано аналогично процессу образования «фрактального кластера», а применение синергетического подхода к явлению распыления материалов при ионной бомбардировке позволяет качественно описать формирование наблюдаемых масс-распределений распыленных кластеров; предложен новый метод теоретического анализа, описывающий область, промежуточную между линейными каскадами и термопиком;

определено теоретически время релаксации распыленных неравновесных кластерных структур; показано, что данные процессы не влияют на точность результатов, полученных с использованием теорий «испарительного ансамбля» Клотса и мономолекулярных реакций РРК, но могут быть ответственными за фрагментацию распыленных кластеров во временном диапазоне $\tau < 10^{-9}$ с.

Практические результаты исследования:

разработана методика определения энергий диссоциации, основанная на измерении спектров кинетических энергий осколочных ионов с последующей обработкой результатов с совместным использованием теорий «испарительного ансамбля» и мономолекулярных реакций РРК, которая рекомендована для определения стабильности распыленных кластерных ионов, представляющих интерес для развития ионных технологий;

разработан для решения практических задач эффективный метод генерации оксидных кластеров при распылении поверхностей пучками тяжёлых атомарных ионов с одновременным напуском кислорода на бомбардируемую поверхность;

впервые определены численные значения энергий диссоциации ряда кластеров $Nb_n C_m^+$, $Si_n O_m^{\pm}$, $V_n O_m^{\pm}$ и $Nb_n O_m^{\pm}$, которые могут быть использованы для оценки возможности использования данных кластеров в различных приложениях ионных технологий.

Достоверность результатов исследований обоснована применением современных методов вторично-ионной масс-спектрометрии, детальным и полным анализом условий и статистики экспериментов, использованием высокоточных современных измерительных приборов; полученные экспериментальные результаты базируются на тщательно проведенных расчётах и обработаны с использованием статистических методов с учётом возможных погрешностей; полученные экспериментальные и теоретические результаты и сделанные выводы согласуются с данными современных исследований, посвященных изучению эмиссии и фрагментации распыленных кластеров, природы и свойств полиатомных частиц.

Научная и практическая значимость результатов исследования.

Научная значимость результатов сравнительных исследований эмиссии и фрагментации кластеров при распылении близкими по массе

моноатомными и полиатомными частицами состоит в определении идентичности происходящих в этих условиях процессов независимо от числа частиц в бомбардирующем ионе.

Научная значимость разработанной методики определения энергий диссоциации кластеров, основанная на измерении спектров кинетических энергий осколочных ионов с последующей обработкой результатов с совместным использованием теорий «испарительного ансамбля» и мономолекулярных реакций РРК, состоит в возможности определения данного фундаментального параметра кластерных частиц; практическая значимость указанной методики состоит в возможности её применения для определения стабильности распыленных кластерных ионов, непосредственно используемых в современных ионных технологиях.

Научная значимость идентичности процессов фрагментации и численных значения энергий диссоциации кластеров $\text{Si}_n\text{O}_{2n+1}^-$ ($n=2-7$), распыленных ионами O_2^+ и Xe^+ с напуском кислорода, состоит в указании на то, что структуры распыленных кластеров не зависят от способа их генерации.

Научная и практическая значимость определения энергий диссоциации ряда кластеров Nb_nC_m^+ , $\text{Si}_n\text{O}_m^\pm$, $\text{V}_n\text{O}_m^\pm$ и $\text{Nb}_n\text{O}_m^\pm$ состоит в возможности использования найденных численных значений как в фундаментальных исследованиях, так и в практических приложениях.

Научная значимость определения средних констант скорости распада распыленных кластеров $\text{V}_n\text{O}_m^\pm$ и $\text{Nb}_n\text{O}_m^\pm$ состоит в возможности сделать вывод, что удельная энергия возбуждения в распыленных кластерах не зависит ни от типа атомов в кластерах, ни от их заряда.

Научная значимость использованных теоретических подходов состоит в возможности их дальнейшего использования для комплексного аналитического описания процессов образования и эмиссии кластеров в различных условиях ионного распыления поверхностей материалов.

Внедрение результатов исследования.

Полученные численные значения энергий диссоциации распыленных кластеров V_mO_n^+ , опубликованные в статье «Investigating the dissociation energies of niobium and vanadium oxides clusters synthesized by ion sputtering» (Bulletin of the Russian Academy of Sciences. Physics. 2012. vol. 76. N.5. pp. 527-530) использованы в исследовательской группе под руководством проф. Д.Фу в Университете г.Ухань (КНР) (Dr. Professor Fu Dejun, Accelerator Laboratory, School of Physics and Technology, Wuhan University) при выполнении Проектов Уханьского научно-технического Управления и Сучжоуского научно-технического Управлени Китая (Wuhan Science and Technology Bureau and Suzhou Science and Technology Bureau of China), Грант №2016030409020210 под названием “Research on cluster ion beam equipment for fabrication of ultra shallow junction devices” и Грант №ZXG201448 под названием “Cluster ion beam nanofabrication device”, и позволили получить пучки положительных кластерных ионов оксида ванадия с необходимой

стехиометрией и другими рабочими параметрами (Справка Wuhan University от 09.10.2020).

Результаты оценки энергий диссоциации распыленных кластеров оксида кремния, опубликованные в статье «Fragmentation of sputtered Si_nO_m^+ clusters: Release kinetic and dissociation energies» (Bulletin of the Russian Academy of Sciences: Physics, 2008, 72(7), 910–914), были использованы в научном проекте Министерства энергетики США Грант №DE-AC02-06CH11357 под названием «Directed Energy Interactions with Surfaces», выполняемом в Мичиганском институте плазменных исследований и инженерии (Michigan Institute of Plasma Science and Engineering, Michigan State University) для интерпретации измеренных масс-спектров с точки зрения количества кластеров и их относительной интенсивности (Справка Michigan State University от 30.09.2020).

Разработанный нами на основе концепций радиационной синергетики теоретический метод анализа, изложенный в статьях «Синергетика распыления материалов при ионной бомбардировке», журнал «Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования», 2013, №4, С.42-47 и «Множественные процессы при распылении материалов ионной бомбардировкой», журнал «Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования», 2013, №6, С.60-64, применён в Физико-технологическом институте Уральского федерального университета (Россия) при изучении радиационно-индуцированных эффектов в рамках выполнения научно-исследовательских проектов: Госзадание 3.1485.2017/4.6 Министерства науки и высшего образования РФ «Дефектная структура, возбуждённые состояния и конверсия излучения УФ-ИК диапазона в разупорядоченных оксидах РЗЭ с пониженной размерностью» (2017-2019 гг.), и Гранта РФФИ №20-42-660012 «Электронная структура, дефекты и фотоиндуцированные процессы в ионно-имплантированных материалах» (2019-2021 гг.) (Справка Физико-технологического института Уральского федерального университета №33.05-32/64 от 05.10.2020).

Материалы диссертации могут быть включены в учебную программу в соответствующих направлениях и специальностях университетов, как новые достижения в области ионного распыления и физики малых частиц.

Апробация результатов исследования. Основные результаты исследований были обсуждены на 26 международных и 3 республиканских научно-практических конференциях.

Опубликованность результатов исследования. Полученные результаты по теме диссертации изложены в 59 научных трудах, из них 21 научная статья, в том числе 12 в зарубежных и 9 в республиканских журналах, рекомендованных Высшей аттестационной комиссией Республики Узбекистан для публикации основных научных результатов докторских диссертаций.

Структура и объем диссертации. Структура диссертации состоит из введения, пяти глав, заключения, списка использованной литературы и

приложения. Объём диссертации составляет 192 страницы текста, включает 38 рисунков и 20 таблиц.

ОСНОВНОЕ СОДЕРЖАНИЕ ДИССЕРТАЦИИ

Во введении обоснованы актуальность и востребованность темы диссертации, определено соответствие исследований приоритетным направлениям развития науки и технологий Республики Узбекистан, приведена степень изученности проблемы, сформулированы цели и задачи, выявлены объекты, предметы и методы исследования, изложены научная новизна и практические результаты исследования, обоснована достоверность полученных результатов, раскрыта их научная и практическая значимость, приведены краткие сведения о внедрении в практику результатов исследования и апробации работы, а также сведения об объёме и структуре диссертации.

В первой главе диссертации **«Краткий обзор исследований эмиссии кластеров при ионном распылении и процессов их взаимодействия с поверхностью»** представлено современное состояние работ по изучению образования кластеров при ионном распылении и взаимодействия кластерных пучков с материалами в различных режимах. Кратко описаны основные закономерности эмиссии кластеров при бомбардировке твёрдых тел пучками атомарных ионов. Указаны наиболее важные типы взаимодействия кластеров с поверхностью в зависимости от их вида и энергии частиц. Особое внимание уделено основным закономерностям процессов распыления пучками кластерных ионов, в том числе с точки зрения их применения во вторично-ионной масс-спектрометрии. В частности, указывается на использование данных особенностей для распыления органических материалов и для получения профилей распределения примесей по глубине в приповерхностной области твёрдых тел. Рассмотрены неаддитивные эффекты при бомбардировке поверхностей кластерными ионами. Детально описаны работы по изучению мономолекулярной фрагментации кластерных ионов при распылении твёрдых тел и применяемых при этом экспериментальных и аналитических методик. Проведено обсуждение состояния вопроса и сделана постановка задачи исследований диссертационной работы.

Во второй главе **«Экспериментальное оборудование и методика исследований»** рассмотрен используемый в исследованиях экспериментальный прибор - масс-спектрометр с двойной фокусировкой обратной геометрии, дано описание его основных узлов и конструктивных особенностей. Обоснован выбор материалов для проведения экспериментов и описаны условия их проведения. Описана методика исследований масс-распределений кластеров при распылении поверхностей пучками ионов Xe^+ , Ar^+ , O_2^+ и SF_5^+ . Энергии первичных ионов составляли 8,5 кэВ и 18,5 кэВ при изучении положительной и отрицательной компонент продуктов распыления

Абсолютные величины токов первичных ионов составляли: при работе с дуоплазматроном - 400-700 нА для ионов Xe^+ и 700-800 нА для O_2^+ , для источника ионов с электронным ударом - 700 нА для ионов Xe^+ и $\sim 1,2$ мкА для SF_5^+ и Ar^+ , с соответствующими плотностями токов $1-3 \cdot 10^{-3}$ А/см².

Описан метод исследования фрагментации кластеров в первой S_1 и второй S_2 бесполовых зонах масс-спектрометра. Представлена методика измерения спектров кинетических энергий осколочных ионов, образующихся при распадах кластеров во второй бесполовой зоне прибора, и расчёта на основе полученных данных энергий диссоциации распыленных кластеров с использованием теоретической модели “испарительного ансамбля”. Для данной модели спектр кинетических энергий осколочных ионов в системе центра масс описывается выражением:

$$dN/dE \propto E^l \cdot \exp[-E/k_B T^{++}] \quad (1),$$

где k_B - постоянная Больцмана, параметр l принимает значения между нулем и единицей, T^{++} - температура возбужденного кластера, соответствующая удельной энергии (на степени свободы). Энергия диссоциации кластера в рамках данной теории связана с температурой T^{++} следующим образом:

$$E_d(T^{++}) = (\gamma(n) \cdot k_B \cdot T^{++}) / \left(1 - \frac{\gamma(n)}{2C(n)} + \frac{1}{12} \cdot \left[\frac{\gamma(n)}{2C(n)} \right]^2 + \dots \right) \quad (2),$$

где

$$\gamma(n) = -\ln \left[1 / \left(10^{13} \cdot n^{2/3} \cdot \exp \left(6/n^{2/3} \right) \cdot \bar{t}(n) \right) \right] \quad (3)$$

-параметр Гспанна, зависящий от количества атомов в кластере n и соответствующего времени жизни кластера $\bar{t}(n)$, определяемого из эксперимента, $C(n) = 3 \cdot n - 1$ - теплоемкость кластера (в единицах постоянной Больцмана k_B). Приведено описание методики преобразования кинетических энергий осколочных ионов, измеренных в лабораторной системе, в спектр кинетических энергий в системе центра масс.

Описана процедура математической обработки результатов и оценки точности экспериментов.

В третьей главе «Разработка методик определения фундаментальных свойств кластеров, распыленных с поверхности материалов ионной бомбардировкой» приведены результаты сравнительного исследования масс-распределений и процессов фрагментации кластерных ионов при распылении поверхностей Ag , Nb и Ta пучками близких по массе атомарных ионов Xe^+ и молекулярных SF_5^+ , а также Ar^+ . Полученные масс-спектры кластеров Ag_n^+ и Nb_n^+ свидетельствуют (рис.1), что для Ag_n^+ ($n=1-12$) наблюдаются большие различия в интенсивностях выходов в зависимости от типа первичных ионов. Наибольшие значения интенсивности кластерных ионов Ag_n^+ имеют при бомбардировке молекулярными пучками SF_5^+ , превышая выходы соответствующих кластеров, распыленных Ar^+ , примерно в 160-170 раз. Интенсивности кластеров Ag_n^+ (рис.1а) при бомбардировке пучком Xe^+

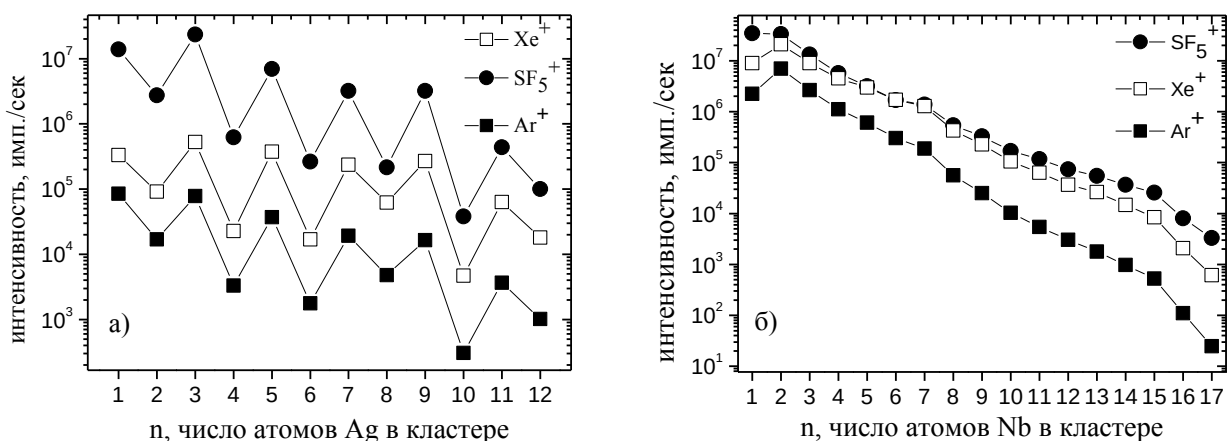


Рис.1. Масс-спектры положительных гомоядерных кластерных ионов при распылении поверхностей Ag (а) и Nb (б) ионами SF_5^+ , Xe^+ и Ar^+ .

имеют промежуточные значения, превышающие выходы этих кластеров при распылении аргоном, но меньшие, чем при бомбардировке ионами SF_5^+ . Масс-распределения Nb_n^+ ($n=1-17$) (рис.1б), распыленных данными первичными пучками, показывают монотонный спад интенсивностей с увеличением числа атомов в кластере n при $n>2$. Выходы Nb_n^+ с $n=4-8$ слабо отличаются при бомбардировке SF_5^+ и Xe^+ . Во многом неожиданным является характер масс-распределений кластеров Ta_n^+ ($n=1-8$), распыленных ионами SF_5^+ , Xe^+ и Ar^+ . Наибольшие значения выходов кластерных ионов получены здесь при бомбардировке пучком Xe^+ . При бомбардировке молекулярными SF_5^+ выходы кластеров Ta_n^+ значительно выше, чем при распылении аргоном, но уступают интенсивностям под действием Xe^+ .

Для выяснения влияния на выходы кластерных ионов числа частиц в

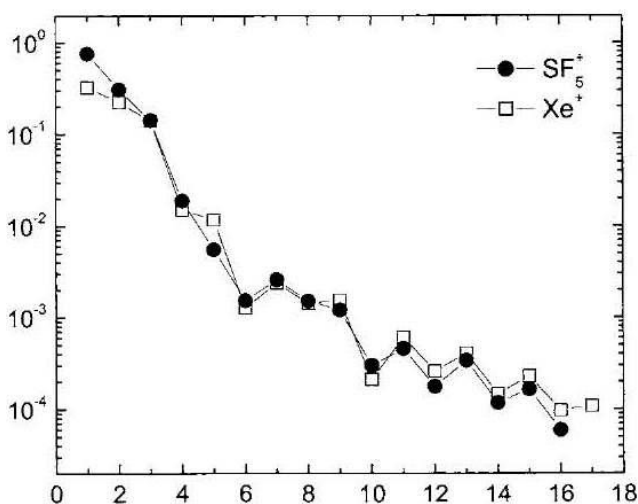


Рис.2. Масс-спектры нейтральных кластеров Ag_n , распыленных с поверхности серебра ионами Xe^+ и SF_5^+ с энергией 10кэВ.

Xe^+ и SF_5^+ с энергиями 10 кэВ при вакууме $3 \cdot 10^{-12}$ Торр. Результаты свидетельствуют (рис.2), что переход от распыления атомарными ионами Xe^+ к молекулярным ионам SF_5^+ приводит к незначительному увеличению

первичном пучке и степени ионизации распыленных кластеров нами были проведены с исследовательской группой Университета г.Эссен (Германия) совместные эксперименты по изучению эмиссии нейтральных кластеров Ag_n при распылении в идентичных условиях поверхности Ag ионами Xe^+ и молекулярными ионами SF_5^+ . Эксперименты проводились на времяпролетном

масс-спектрометре рефлектронного типа с лазерной постиионизацией при

бомбардировке серебра пучками

выхода нейтральных атомов серебра и их димеров. В то же время, интенсивности выходов кластеров Ag_n с $n \geq 3$ остаются практически неизменными. Анализ этих данных и сравнение с рис.1 позволяют сделать два основных вывода. Во-первых, увеличение выходов кластерных ионов Ag_n^+ при бомбардировке SF_5^+ по сравнению с He^+ связано с увеличением вероятности ионизации распыленных частиц, а не с увеличением распыления. Во-вторых, эффекты нелинейного усиления кластерного выхода при распылении полиатомными ионами отсутствуют, по крайней мере, в исследованной области энергий и размеров бомбардирующих частиц.

Результаты исследований распадов кластеров Ag_n^+ , Nb_n^+ и Ta_n^+ при распылении He^+ и SF_5^+ показывают, что вероятности распадов для обоих типов первичных пучков одинаковы в пределах точности измерений. Процессы фрагментации распыленных кластеров могут быть охарактеризованы их константами скоростей распада $k \equiv 1/\tau$, где τ – среднее время жизни кластера. Для определения средних констант скорости распада k и времён жизни τ распыленных кластеров нами использована методика, основанная на сравнении количества распадов за времена пролета Δt_1 и Δt_2 бесполовых зон масс-спектрометра S_1 и S_2 в предположении, что количество метастабильных кластеров ΔN_1 и ΔN_2 , фрагментирующих за эти времена, пропорционально исходному числу N_1 и N_2 ионов на входе в данные зоны. Закон распада имеет вид

$$N = N_0 \exp(-k\Delta t), \quad (4)$$

где k – константа скорости распада, N – число метастабильных ионов, не испытавших распада по прошествии Δt , N_0 – исходное число метастабильных ионов. Для каждой из бесполовых зон S_1 и S_2 масс-спектрометра имеем:

$$\Delta N_1 = N_0 \exp(-kt_1)[1 - \exp(-k\Delta t_1)]; \quad \Delta N_2 = N_0 \exp(-kt_2)[1 - \exp(-k\Delta t_2)], \quad (5)$$

где t_1 и t_2 – времена полета до соответствующих зон, определяемые из геометрии прибора, Δt_1 и Δt_2 – времена пролёта данных зон. Определив из эксперимента ΔN_1 для первой бесполовой зоны и ΔN_2 для второй, по их отношению находим среднюю константу k скорости распада из уравнения:

$$\Delta N_1 / \Delta N_2 = \exp k(t_2 - t_1)[1 - \exp(-k\Delta t_1)] / [1 - \exp(-k\Delta t_2)]. \quad (6)$$

Рассчитанные по (4)-(6) средние константы скорости распадов k и времена жизни $\tau \equiv 1/k$ для ряда кластерных ионов Ag_n^+ , Nb_n^+ , Ta_n^+ , Au_n^+ и Cu_n^+ показывают, что их численные значения для кластеров различных металлов, распыленных молекулярными ионами SF_5^+ и атомарными ионами He^+ , совпадают, т.е. внутренние энергии колебательного возбуждения данных кластеров не зависят от числа атомов в первичном бомбардирующем ионе.

Одной из теорий, описывающей фрагментацию возбуждённых молекул и многоатомных комплексов, является теория мономолекулярных реакций Райса-Рамспергера-Касселя (РРК). Согласно ей, константа скорости реакции

$$k(E) = A[(E - E_0)/E]^{s-1} \quad (7),$$

где A – константа, предэкспоненциальный высокотемпературный Аррениусовский множитель. Таким образом, в рамках классического

варианта РРК возможны оценки энергий возбуждения $E \equiv E_{excit}$ распыленных кластеров. Описание мономолекулярного распада кластеров в рамках РРК (в классическом приближении) даёт зависимость среднего времени жизни τ от энергии колебательного возбуждения E_{excit} при энергии активации реакции диссоциации E_d с учётом найденных значений констант скорости распада:

$$E_{excit} = E_d(n) / [1 - (k_r/v_0)^{1/s-1}], \quad (8)$$

где $v_0 \approx 10^{13} \text{ с}^{-1}$ - частотный фактор, n – число частиц в кластере, $s=3n-6$ – число гармонических осцилляторов в нём.

Нами оценены средние энергии возбуждения распыленных кластеров по

Таблица 1. Средние энергии возбуждения (эВ) распыленных кластеров Nb_n^+ и Ta_n^+ .

Ион	Распад	E_d	E_{excit}	$E_{excit}/\text{атом}$
Nb_5^+	$Nb_4^+ + Nb$	5,69	5,76	1,15
Nb_8^+	$Nb_7^+ + Nb$	5,84	6,31	0,79
Nb_9^+	$Nb_8^+ + Nb$	5,87	6,54	0,73
Nb_{10}^+	$Nb_9^+ + Nb$	6,88	7,93	0,79
Ta_5^+	$Ta_4^+ + Ta$	7,02	7,10	1,42
Ta_6^+	$Ta_5^+ + Ta$	5,52	5,68	0,95
Ta_7^+	$Ta_6^+ + Ta$	8,34	8,78	1,25

формуле (8) с учётом средних констант скорости распада, определяемых по (4) – (6), и данных по энергиям диссоциации соответствующих кластеров. Результаты оценок средних энергий возбуждения ряда кластеров Nb_n^+ и Ta_n^+ представлены в таблице 1.

Ранее разработанная методика позволяет определить в рамках теории

«испарительного ансамбля» по формулам (1) – (3) энергии диссоциации распыленных кластерных ионов на основе измерений спектров кинетических энергий осколочных ионов, образующихся при их фрагментации. В то же время, возможные ограничения на использование теории «испарительного ансамбля» в общем случае остаются неясными. В этой связи является актуальной разработка дополнительной методики оценки энергий диссоциации кластеров, позволяющей провести сравнение с данными, получаемыми с помощью теории «испарительного ансамбля». Для решения этой задачи нами разработана поверочная методика оценки энергий диссоциации кластеров на основе теории РРК. В рамках данной методики для кластеров, фрагментирующих во второй бесполовой зоне S_2 , предполагается, что энергия возбуждения равна сумме энергий диссоциации и избыточной энергии, связанной с кинетической энергией осколочных ионов: $E_{excit} \equiv E_v = E_d + E_e$. Тогда

$$E_d = [(v_0/k)^{1/s-1} - 1] E_e, \quad (9)$$

где v_0 – частотный фактор, s – число осцилляторов, E_v – внутренняя энергия кластера,

$$E_e = s/c, \quad (10)$$

c – значение седловидной точки, определяемое из эксперимента:

$$c = 1/[2(w/2)^2 \chi], \quad (11)$$

где w — ширина на полувысоте максимума спектра распределения по кинетическим энергиям осколочных ионов, аппроксимированного распределением Гаусса, χ – коэффициент пересчёта энергий из лабораторной

системы координат в систему центра масс. Необходимо отметить, однако, что найденные таким образом с использованием классической теории РРК энергии диссоциации E_d являются оценочными, во-первых, из-за определённой произвольности выбора параметра c , и, во-вторых, вследствие ограниченной точности самой теории. Эта методика (9)-(11) оценки энергий активации диссоциации распыленных кластерных ионов, таким образом, может считаться поверочной контрольной методикой по отношению к основной (1)-(3), базирующейся на теории «испарительного ансамбля».

Для проверки возможностей методики (9)-(11) оценки энергий диссоциации распыленных кластерных ионов на основе теории РРК необходимо проведение с её использованием исследований гетероядерных кластерных структур. В этой связи интерес представляют ниобий-углеродные кластеры, свойства которых были предметом ряда экспериментальных и теоретических работ. Исследования эмиссии и фрагментации кластеров $Nb_m C_n^+$ проводились при распылении карбида ниобия ионами He^+ . Анализ полученных масс-распределений показывает, что $Nb_m C_n^+$ регистрируются в широком диапазоне чисел атомов $m=1-9$ и $n=1-12$. Результаты исследования фрагментации $Nb_m C_n^+$ свидетельствуют, что какие-либо общие каналы распада для положительных ниобий-углеродов отсутствуют, и для большинства из них характерна фрагментация по нескольким каналам.

Оценки энергий диссоциации ниобий-углеродных кластеров были выполнены на базе исследований при их фрагментации спектров кинетических энергий осколочных ионов (рис.3) с обработкой полученных

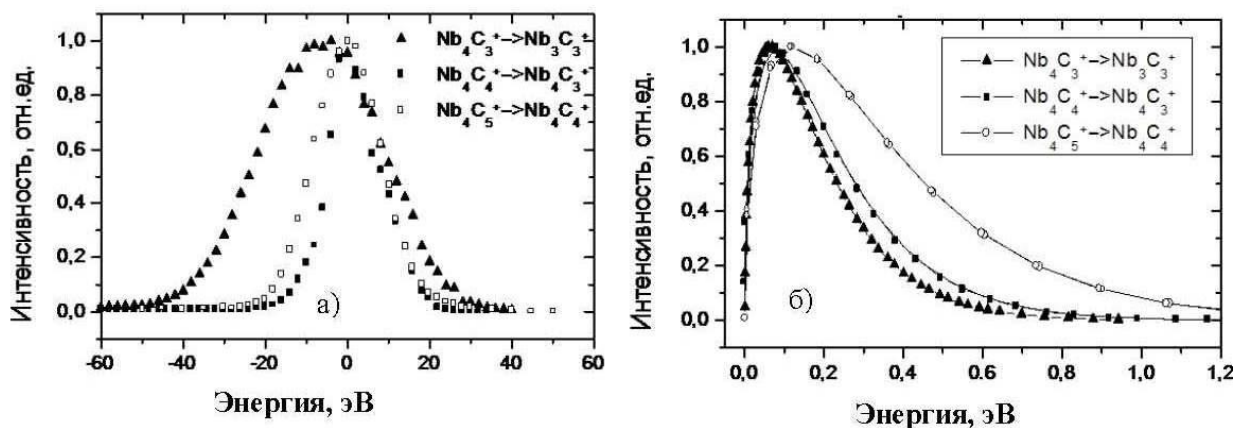


Рис.3. Нормированные спектры кинетических энергий осколочных ионов при распадах кластеров $Nb_m C_n^+$ во второй бесполовой зоне прибора: а) – лабораторная система; б) – система центра масс.

данных как по методике (1)-(3) на основе модели «испарительного ансамбля», так и по разработанной методике (9)-(11), основанной на классической теории РРК. Рассчитанные на основе проведённых измерений в рамках обеих методик энергии диссоциации ряда кластеров $Nb_m C_n^+$

Таблица 2. Энергии диссоциации E_d (эВ) кластеров $Nb_m C_n^+$: KI - теория "испарительного ансамбля"; RRK - теория РРК

Кластер	Канал распада	E_d (эВ)	
		KI	RRK
$Nb_2 C_3^+$	$Nb_2 C_3^+ \rightarrow Nb^+ + Nb C_3^0$	2.20	2,72
$Nb_2 C_4^+$	$Nb_2 C_4^+ \rightarrow Nb^+ + Nb C_4^0$	4.31	4,26
$Nb_2 C_5^+$	$Nb_2 C_5^+ \rightarrow Nb_2 C^+ + C_4^0$	2.40	2,15
$Nb_2 C_5^+$	$Nb_2 C_5^+ \rightarrow Nb_2 C_2^+ + C_3^0$	4.99	4,47
$Nb_2 C_6^+$	$Nb_2 C_6^+ \rightarrow Nb_2 C_2^+ + C_4^0$	2,07	1,77
$Nb_3 C_3^+$	$Nb_3 C_3^+ \rightarrow Nb^+ + Nb_2 C_3^0$	4.60	4,56
$Nb_3 C_4^+$	$Nb_3 C_4^+ \rightarrow Nb_3 C_3^+ + C_1^0$	7.56	6,79
$Nb_4 C_2^+$	$Nb_4 C_2^+ \rightarrow Nb_3 C_2^+ + Nb^0$	5.20	5,18
$Nb_4 C_5^+$	$Nb_4 C_5^+ \rightarrow Nb_4 C_4^+ + C_1^0$	7.22	6,84
$Nb_5 C^+$	$Nb_5 C^+ \rightarrow Nb_4 C^+ + Nb^0$	6.17	6,16
$Nb_5 C_2^+$	$Nb_5 C_2^+ \rightarrow Nb_4 C_2^+ + Nb^0$	5.34	4,82
$Nb_5 C_3^+$	$Nb_5 C_3^+ \rightarrow Nb_4 C_3^+ + Nb^0$	4.71	4,04

даны в табл.2. Из представленных данных видно, что энергии диссоциации $Nb_m C_n^+$, определённые в рамках теории "испарительного ансамбля" и теории РРК, в основном близки. Результаты свидетельствуют также о целесообразности применения разработанной единой расчётной методики с использованием обоих теоретических подходов для определения энергий диссоциации распыленных кластерных ионов.

В четвёртой главе «Исследование эмиссии, фрагментации и

фундаментальных свойств кластеров оксидов кремния, ванадия и ниобия, синтезированных ионной бомбардировкой» приведены результаты изучения масс-распределений и распадов распыленных кластеров $Si_n O_m^{\pm}$, $V_n O_m^{\pm}$ и $Nb_n O_m^{\pm}$ для определения с использованием разработанной методики их базовых характеристик. Важной экспериментальной задачей является нахождение оптимального способа синтеза оксидных кластеров различного размера и различной стехиометрии. Для генерации оксидных кластеров нами применена методика распыления поверхностей как ионами кислорода, так и пучками инертных газов с одновременным напуском кислорода на бомбардируемые поверхности. Ионные токи составляли 0,7-0,8 мкА для O_2^+ и 0,4-0,5 мкА для He^+ при плотности тока $\sim 10^{-4}$ А·см⁻² с развёрткой первичного пучка в растр. Для исследований изменения выходов различных групп оксидных кластеров в зависимости от давления кислорода была разработана система напуска, позволяющая изменять давление от $P=2 \cdot 10^{-6}$ Па (остаточный вакуум) до $P=5 \cdot 10^{-3}$ Па.

Исследования эмиссии отрицательных кластерных ионов при распылении поверхности Si ионами O_2^+ показывают, что в этом случае наблюдается выход как гомоядерных кремниевых кластеров Si_n^- , так и гетероядерных кремний-кислородных кластеров $Si_n O_m^-$. В каждой кластерной серии наблюдаются аномально высокие выходы ионов $Si_n O_m^-$ с определенным отношением Si к O, таким, как $Si_n O_{2n}^-$ и $Si_n O_{2n+1}^-$, описанные в литературе. При напуске в камеру O_2 концентрация атомов кислорода в распыляемой области возрастает, и выходы данных «магических» кластеров увеличиваются, достигая максимума при $P=4-5 \cdot 10^{-3}$ Па. В то же время, наибольшие выходы кластеров $Si_n O_m^-$ наблюдаются (рис.4) при напуске

кислорода и бомбардировке поверхности ионами Xe^+ вследствие более высокого коэффициента распыления, несмотря на меньшие величины ионных токов. Эта методика использована в дальнейших исследованиях для генерации при распылении гетероядерных оксидных кластерных ионов.

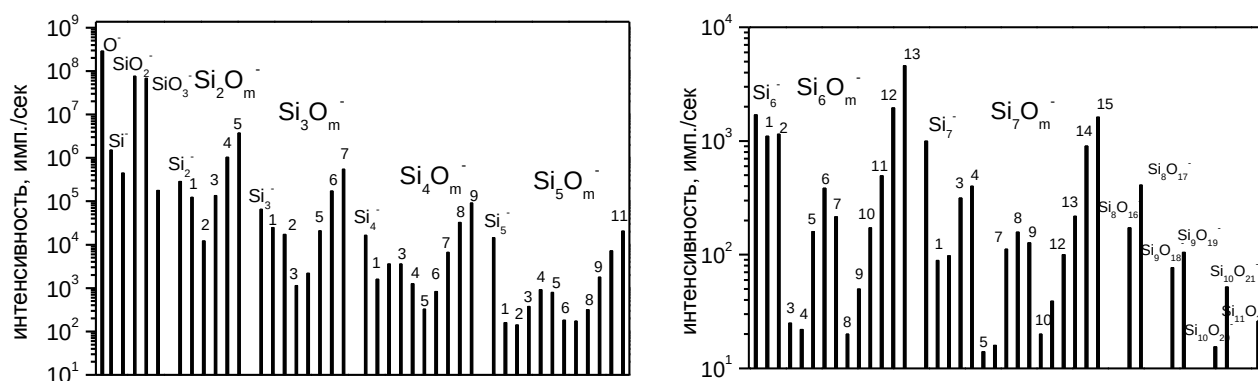


Рис.4. Диаграмма выходов отрицательных кластерных ионов при распылении поверхности Si ионами Xe^+ и напуске O_2 до давления $P=5 \cdot 10^{-3}$ Па, сгруппированная в зависимости от числа атомов кремния n и атомов кислорода m

Исследования эмиссии положительных кластеров при распылении кремния ионами Xe^+ и напуске кислорода свидетельствуют, что в этом случае наблюдается интенсивная эмиссия как гомоядерных Si_n^+ , так и гетероядерных Si_nO_m^+ кластеров с различным числом атомов кремния n и кислорода m. Для положительных Si_nO_m^+ практически отсутствуют какие-либо кластеры, явно выделенные по своей относительной интенсивности. Наибольшие интенсивности в спектре Si_nO_m^+ имеют такие кластеры, выход которых у отрицательных кластеров Si_nO_m^- минимален.

Изучение эмиссии отрицательных V_nO_m^- показывает, что с ростом размера кластерных ионов (n и m) интенсивность их выхода быстро падает. Однако, в каждой кластерной серии наблюдаются пики ионов V_nO_m^- с определённым отношением числа атомов V к O, такие, как V_2O_m^- (m=3-6), V_3O_m^- (m=5-8) и т.д., а кластеры с малым соотношением O к V представлены слабо или отсутствуют. Измеренное распределение выходов положительных гомоядерных V_n^+ и гетероядерных V_nO_m^+ кластеров приведено на рис.5. Спектр масс в этом случае существенно более развит по сравнению с отрицательными ионами, и регистрируются кластеры V_nO_m^+ с n=1-8. В отличие от V_nO_m^- , наблюдается интенсивная эмиссия гомоядерных кластеров V_n^+ . Слабо представлены или полностью отсутствуют оксидные кластеры, обогащённые кислородом, которые явно доминируют в спектре отрицательных ионов, такие как V_2O_5^- , V_3O_7^- , V_4O_9^- , и т.д. В то же время, спектр положительных ионов V_nO_m^+ по сравнению с отрицательными кластерами V_nO_m^- обогащён интенсивными пиками кластеров с малым отношением числа атомов кислорода к атомам металла.

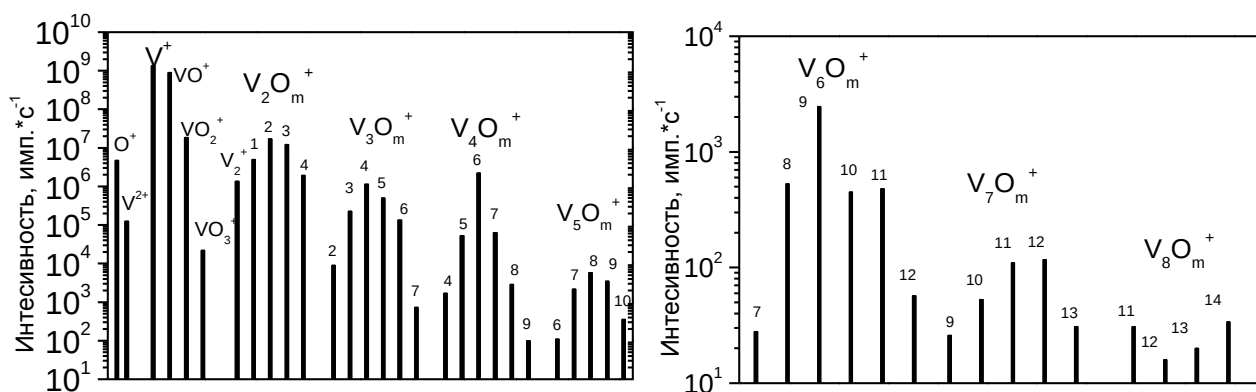


Рис.5. Диаграмма выходов положительных кластеров $V_nO_m^+$ при распылении V ионами He^+ и напуске O_2 до давления $P=5 \cdot 10^{-3}$ Па.

Исследования эмиссии отрицательных кластеров оксида ниобия $Nb_nO_m^-$ ($n=1-5$) свидетельствуют, что как и у $V_nO_m^-$, в каждой кластерной серии наблюдаются высокие выходы ионов $Nb_nO_m^-$ с определенным отношением атомов Nb к O, такие, как $Nb_2O_m^-$ ($m=3-6$), $Nb_3O_m^-$ ($m=6-8$) и др., а кластеры с малым соотношением O к Nb представлены слабо. Изучение положительно заряженных кластеров оксида ниобия $Nb_nO_m^+$ показывает, что спектр масс в этом случае существенно более развит по сравнению с отрицательными ионами, и регистрируются кластеры $Nb_nO_m^+$ с $n=1-6$, $m=1-12$. По сравнению с $Nb_nO_m^-$, у ионов $Nb_nO_m^+$ наиболее интенсивными являются пики кластеров, имеющих в своем составе меньшее число атомов кислорода m.

Оценки энергий диссоциации кластеров $Si_nO_m^\pm$ были выполнены на базе измерений спектров кинетических энергий осколочных ионов при распадах распыленных кластеров с использованием разработанной расчётной методики на основе совместного использования модели «испарительного ансамбля» по формулам (1)-(3), и классической теории РПК (9)–(11). На рис.6 представлены характерные спектры энергий осколочных ионов для

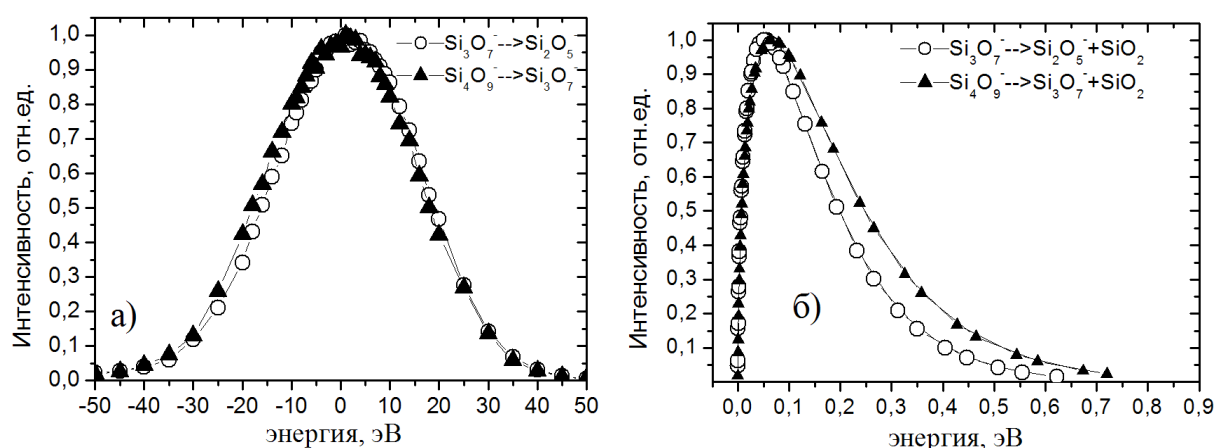


Рис.6. Спектры кинетических энергий осколочных ионов при распадах отрицательных кластерных ионов $Si_nO_{2n+1}^- \rightarrow Si_{n-1}O_{2n-2}^- + SiO_2$: а) лабораторная система (сплошная линия – аппроксимация гауссианом); б) система центра масс.

распадов кластеров Si_3O_7^- и Si_4O_9^- с выбросом SiO_2 . Результаты вычислений энергий диссоциации E_d отрицательных заряженных «магических» кластеров $\text{Si}_n\text{O}_{2n+1}^-$ ($n=2-7$), распыленных ионами Xe^+ с напуском кислорода, полученные на основе измерений и рассчитанные по формулам (1)-(3) и (9)-(11), даны в табл. 3. Для сравнения приведены литературные теоретические данные по энергиям диссоциации нейтральных Si_nO_{2n} , вычисленным МД-моделированием [1, р. 1101]. Из полученных данных видно, что энергии диссоциации $(\text{SiO}_2)_n\text{O}^-$, рассчитанные с использованием модели «испарительного ансамбля» и теории РРК, в целом близки. Из табл.4 также следует, что энергии диссоциации $(\text{Si}_n\text{O}_{2n})\text{O}^-$ как по абсолютной величине, так и зависимости E_d от размера кластера $n=2-7$ очень хорошо совпадают с энергиями связи наиболее стабильных кластеров $(\text{SiO}_2)_n$.

Таблица 3. Энергии диссоциации (E_d) анионов $(\text{SiO}_2)_n\text{O}^-$ и энергии разрыва связи (E_b) нейтральных кластеров $(\text{SiO}_2)_n$ [1, р. 1101]: (KL) – модель «испарительного ансамбля»; (RRK) – теория мономолекулярных реакций.

Анион	Канал распада	E_d , эВ		Нейтральный кластер [1, р. 1101]	E_b , эВ
		KL	RRK		
$(\text{SiO}_2)_2\text{O}^-$	$(\text{SiO}_2)\text{O}^- + \text{SiO}_2$	2,82	2,38	$(\text{SiO}_2)_2$	2,67
$(\text{SiO}_2)_3\text{O}^-$	$(\text{SiO}_2)_2\text{O}^- + \text{SiO}_2$	3,75	3,23	$(\text{SiO}_2)_3$	3,80
$(\text{SiO}_2)_4\text{O}^-$	$(\text{SiO}_2)_3\text{O}^- + \text{SiO}_2$	4,27	3,72	$(\text{SiO}_2)_4$	4,26
$(\text{SiO}_2)_5\text{O}^-$	$(\text{SiO}_2)_4\text{O}^- + \text{SiO}_2$	4,66	4,09	$(\text{SiO}_2)_5$	4,62
$(\text{SiO}_2)_6\text{O}^-$	$(\text{SiO}_2)_5\text{O}^- + \text{SiO}_2$	4,82	4,25	$(\text{SiO}_2)_6$	5,06
$(\text{SiO}_2)_7\text{O}^-$	$(\text{SiO}_2)_6\text{O}^- + \text{SiO}_2$	5,67	5,02	$(\text{SiO}_2)_7$	5,14

Найденные нами для распыленных ионами Xe^+ с напуском кислорода значения E_d кластеров $(\text{SiO}_2)_n\text{O}^-$ в пределах экспериментальных ошибок совпадают со значениями энергий диссоциации этих же кластеров, определёнными при распылении поверхности Si ионами O_2^+ . Эти результаты позволяют сделать важный вывод об идентичности распыленных кластеров $(\text{SiO}_2)_n\text{O}^-$ одинаковой стехиометрии независимо от метода их генерирования. Иными словами, свойства кластерных ионов, синтезированных при ионном распылении, не зависят от условий и параметров процесса бомбардировки.

В таблице 4 приведены полученные на основе измерений спектров энергий осколочных ионов результаты расчётов энергий диссоциации ряда положительных кластеров Si_nO_m^+ с использованием методики (1)-(3) на основе модели «испарительного ансамбля» (KL) и теории РРК (9)-(11) (RRK). Эти данные указывают на подобие структуры и свойств положительных Si_nO_m^+ и нейтральных Si_nO_m кластеров одинакового состава.

Несмотря на уникальные возможности метода ионного распыления для решения задач синтеза кластеров различного размера и стехиометрического состава, механизм, ответственный за колебательное возбуждение эмиттированных кластеров, до сих пор остаётся до конца неясным. Для определения возможной зависимости процессов возбуждения распыленных частиц от условий бомбардировки представляется важным проведение

Таблица 4. Энергии диссоциации (E_d) положительных кластеров Si_nO_m^+

Катион	Канал распада	E_d , эВ	
		KL	RRK
Si_2O_3^+	$\text{Si}_2\text{O}_3^+ \rightarrow \text{SiO}^+ + \text{SiO}_2$	2,26	3,20
Si_3O_2^+	$\text{Si}_3\text{O}_2^+ \rightarrow \text{Si}_2\text{O}^+ + \text{SiO}$	0,75	1,06
Si_3O_3^+	$\text{Si}_3\text{O}_3^+ \rightarrow \text{Si}_2\text{O}_2^+ + \text{SiO}$	1,21	1,30
Si_4O_3^+	$\text{Si}_4\text{O}_3^+ \rightarrow \text{Si}_3\text{O}_2^+ + \text{SiO}$	1,14	1,10
Si_4O_4^+	$\text{Si}_4\text{O}_4^+ \rightarrow \text{Si}_3\text{O}_3^+ + \text{SiO}$	1,82	1,65
Si_4O_5^+	$\text{Si}_4\text{O}_5^+ \rightarrow \text{Si}_3\text{O}_4^+ + \text{SiO}$	2,91	2,54
Si_4O_6^+	$\text{Si}_4\text{O}_6^+ \rightarrow \text{Si}_3\text{O}_5^+ + \text{SiO}$	3,72	3,18
Si_5O_2^+	$\text{Si}_5\text{O}_2^+ \rightarrow \text{Si}_4\text{O}^+ + \text{SiO}$	3,0	2,89
Si_5O_6^+	$\text{Si}_5\text{O}_6^+ \rightarrow \text{Si}_4\text{O}_5^+ + \text{SiO}$	2,95	2,49
Si_5O_7^+	$\text{Si}_5\text{O}_7^+ \rightarrow \text{Si}_4\text{O}_6^+ + \text{iO}$	3,70	3,09

соответствующих исследований на гетероядерных кластерах с сильной внутримолекулярной связью, какими и являются кластеры оксида кремния.

Оценки констант скорости k мономолекулярной фрагментации кластеров $(\text{SiO}_2)_n\text{O}^-$, распыленных ионами O_2^+ и Xe^+ с напуском кислорода, выполнены по формулам (4)-(6) сравнением количества распадов за времена пролета Δt_1 и Δt_2 бесполовых зон масс-спектрометра. Полученные средние константы скорости

распадов k и времена жизни $\tau_0 \equiv 1/k$ ионов $(\text{SiO}_2)_n\text{O}^-$ даны в табл.5. Константы скорости распада кластеров $(\text{SiO}_2)_n\text{O}^-$ ($n=1-6$) в пределах точности эксперимента не зависят от массы и сорта бомбардирующих ионов.

Таблица 5. Средние константы скорости распадов k и средние времена жизни τ_0 кластеров $(\text{SiO}_2)_n\text{O}^-$ ($n=1-6$), распыленных ионами O_2^+ и Xe^+ с напуском кислорода.

Канал распада	O_2^+		Xe^+	
	$k, *10^5 \text{c}^{-1}$	$\tau_0, *10^{-6} \text{c}$	$k, *10^5 \text{c}^{-1}$	$\tau_0, *10^{-6} \text{c}$
$(\text{SiO}_2)\text{O}^- \rightarrow \text{SiO}_2^- + \text{O}$	4,6	2,2	4,0	2,5
$(\text{SiO}_2)_2\text{O}^- \rightarrow (\text{SiO}_2)\text{O}^- + \text{SiO}_2$	2,4	4,1	2,3	4,4
$(\text{SiO}_2)_3\text{O}^- \rightarrow (\text{SiO}_2)_2\text{O}^- + \text{SiO}_2$	1,9	5,3	1,8	5,7
$(\text{SiO}_2)_4\text{O}^- \rightarrow (\text{SiO}_2)_3\text{O}^- + \text{SiO}_2$	1,6	6,4	1,5	6,9
$(\text{SiO}_2)_5\text{O}^- \rightarrow (\text{SiO}_2)_4\text{O}^- + \text{SiO}_2$	1,3	7,6	1,3	7,5
$(\text{SiO}_2)_6\text{O}^- \rightarrow (\text{SiO}_2)_5\text{O}^- + \text{SiO}_2$	1,2	8,7		

Поскольку энергии диссоциации данных кластеров равны, это в соответствии с (8) свидетельствует о том, что их энергии возбуждения также одинаковы, и составляют, по выполненным оценкам, 0,6-0,8 эВ/атом. Таким образом, сравнительное исследование фрагментации кластеров $(\text{SiO}_2)_n\text{O}^-$, распыленных ионами O_2^+ и Xe^+ , позволяют сделать вывод, что средние значения констант скорости распада в пределах точности эксперимента не зависят от способа их генерации. Хотя распределение энергии в каскадах столкновений зависит от массы и энергии бомбардирующих ионов, энергия возбуждения, получаемая кластерами $(\text{SiO}_2)_n\text{O}^-$ при образовании, не зависит от метода их генерирования. Аналогичные оценки констант скорости k мономолекулярной фрагментации и средних времён жизни τ распыленных

положительно заряженных кластеров Si_nO_m^+ были выполнены при распылении ионами Xe^+ с напуском кислорода. Результаты показывают, что значения этих параметров имеют тот же порядок величины, что и у Si_nO_m^- .

Распады кластеров $\text{V}_n\text{O}_m^\pm$ и $\text{Nb}_n\text{O}_m^\pm$ по всем стехиометрически возможным направлениям были изучены при распылении V и Nb ионами Xe^+ с напуском кислорода. Результаты исследований фрагментации V_nO_m^+ позволяют сделать вывод, что эти кластеры могут быть представлены как составленные из структурных единиц VO_2 , VO_3 и V_2O_5 . Интерес представляет также наличие распада с образованием атомарного иона V^+ . Это свидетельствует, что значительный вклад в формирование зарядового состояния распыленных атомарных ионов вносят процессы распада кластеров во временном диапазоне $<10^{-9}$ с после эмиссии. Для распада кластерных ионов V_nO_m^- характерен канал с отрывом нейтрального VO_2 . Каналы и вероятности фрагментации кластерных ионов Nb_nO_m^- показывают, что NbO_2 , NbO_3 и Nb_2O_5 являются наиболее вероятными нейтральными фрагментами при распадах, и, соответственно, могут рассматриваться как структурные блоки кластеров Nb_nO_m^- . Наиболее распространенными продуктами распадов положительных Nb_nO_m^+ являются нейтральные молекулы NbO , NbO_2 , NbO_3 , а также ионы Nb^+ , NbO^+ и NbO_2^+ .

Спектры энергий осколочных ионов при распадах $\text{V}_n\text{O}_m^\pm$ и $\text{Nb}_n\text{O}_m^\pm$ были измерены для основных каналов по стандартной методике во второй бесполовой зоне временном окне $\geq 10^{-5}$ с после эмиссии. В табл.6 даны

Таблица 6. Каналы распада и энергии диссоциации (E_d) кластеров $\text{V}_n\text{O}_m^\pm$ и $\text{Nb}_n\text{O}_m^\pm$: KI — модель "испарительного ансамбля"; RRK — теория мономолекулярных реакций.

Кластер $\text{V}_n\text{O}_m^\pm$	Канал распада	E_d , эВ		Кластер $\text{Nb}_n\text{O}_m^\pm$	Канал распада	E_d , эВ	
		KI	RRK			KI	RRK
V_2O_4^+	$\text{VO}_2^+ + \text{VO}_2$	1,90	2,07	Nb_2O_5^+	$\text{Nb}_2\text{O}_4^+ + \text{O}$	3,91	3,79
V_3O_3^+	$\text{V}_2\text{O}_2^+ + \text{VO}$	2,97	3,24	Nb_3O_5^+	$\text{Nb}_2\text{O}_4^+ + \text{NbO}$	2,98	2,72
V_3O_4^+	$\text{V}^+ + \text{V}_2\text{O}_4$	3,40	3,28	Nb_3O_5^+	$\text{NbO}^+ + \text{Nb}_2\text{O}_4$	2,77	2,53
V_3O_4^+	$\text{V}_2\text{O}_3^+ + \text{VO}$	4,01	3,88	Nb_3O_5^+	$\text{Nb}_2\text{O}_3^+ + \text{NbO}_2$	3,13	2,85
V_3O_6^+	$\text{VO}^+ + \text{V}_2\text{O}_5$	2,47	2,17	Nb_3O_7^+	$\text{NbO}_2^+ + \text{Nb}_2\text{O}_5$	2,47	2,12
V_4O_5^+	$\text{V}_3\text{O}_4^+ + \text{VO}$	4,17	3,66	Nb_4O_6^+	$\text{Nb}_3\text{O}_4^+ + \text{NbO}_2$	4,43	3,82
V_4O_6^+	$\text{V}_3\text{O}_4^+ + \text{VO}_2$	3,68	3,16	Nb_4O_6^+	$\text{Nb}_3\text{O}_5^+ + \text{NbO}$	4,74	4,09
V_4O_6^+	$\text{V}_3\text{O}_5^+ + \text{VO}$	4,04	3,47	Nb_4O_7^+	$\text{Nb}_3\text{O}_5^+ + \text{NbO}_2$	3,74	3,18
VO_4^-	$\text{VO}_3^- + \text{O}$	4.51	5.39	NbO_4^-	$\text{NbO}_3^- + \text{O}$	5.7	8.2
V_2O_5^-	$\text{VO}_3^- + \text{VO}_2$	4.98	4.81	Nb_2O_5^-	$\text{NbO}_3^- + \text{NbO}_2$	12.6	12.2
V_3O_7^-	$\text{V}_2\text{O}_5^- + \text{VO}_2$	5.03	4.31	Nb_2O_5^-	$\text{Nb}_2\text{O}_4^- + \text{O}$	10.1	9.8
V_4O_9^-	$\text{V}_3\text{O}_7^- + \text{VO}_2$	3.28	2.73	Nb_3O_8^-	$\text{NbO}_3^- + \text{Nb}_2\text{O}_5$	1.4	1.2

результаты расчётов на базе измерений энергий диссоциации кластеров $V_nO_m^\pm$ и $Nb_nO_m^\pm$ по методике с использованием теории «испарительного ансамбля» (1)-(3) и РРК (9)-(11). Как видно из табл.6, энергии $V_nO_m^\pm$ и $Nb_nO_m^\pm$, полученные в рамках двух подходов, близки между собой.

Для оценки влияния зарядового состояния на процессы колебательного возбуждения и фрагментации распыленных кластеров было проведено сравнительное изучение средних констант скорости распада положительно и отрицательно заряженных кластеров оксидов ванадия и ниобия. Оценки констант скорости k мономолекулярной фрагментации распыленных кластеров $V_nO_m^\pm$ и $Nb_nO_m^\pm$ выполнены по формулам (4)-(6) сравнением количества распадов за времена пролета Δt_1 и Δt_2 бесполых зон масс-спектрометра. Результаты указывают, что значения констант скорости распада и времён жизни положительных $V_nO_m^+$ и $Nb_nO_m^+$ и отрицательных $V_nO_m^-$ и $Nb_nO_m^-$, находятся в пределах одного порядка величины, в основном, с $k=2\div4\cdot10^5\text{ с}^{-1}$, и не зависят существенно от их зарядового состояния. Энергии диссоциации E_d для положительных и отрицательных кластерных ионов, как правило, лежат в пределах одного порядка величины; для кластеров оксидов ванадия и ниобия, как это следует из данных табл.6. Следовательно, близость констант скорости распада положительных и отрицательных кластеров оксидов ванадия и ниобия свидетельствует, что их энергии возбуждения в соответствии с (8) примерно одинаковы и не зависят от заряда состояния.

Таблица 7. Энергии возбуждения E_v распыленных кластеров $Nb_nO_m^+$ и $V_nO_m^\pm$.

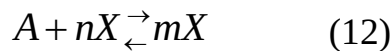
Кластер	Канал распада	E_v , эВ	$E_v/\text{атом}$
$Nb_2O_5^+$	$Nb_2O_4^+ + O$	4,13	0,59
$Nb_3O_5^+$	$Nb_2O_4^+ + NbO$	3,24	0,40
$Nb_3O_5^+$	$NbO^+ + Nb_2O_4$	3,00	0,37
$Nb_3O_5^+$	$Nb_2O_3^+ + NbO_2$	3,40	0,42
$Nb_3O_7^+$	$NbO_2^+ + Nb_2O_5$	2,86	0,29
$Nb_4O_6^+$	$Nb_3O_4^+ + NbO_2$	5,14	0,51
$Nb_4O_6^+$	$Nb_3O_5^+ + NbO$	5,49	0,55
$Nb_4O_7^+$	$Nb_3O_5^+ + NbO_2$	4,48	0,41
$V_2O_4^+$	$VO_2^+ + VO_2$	1,96	0,33
$V_3O_3^+$	$V_2O_2^+ + VO$	3,06	0,51
$V_3O_4^+$	$V^+ + V_2O_4$	3,59	0,51
$V_3O_6^+$	$VO^+ + V_2O_5$	2,76	0,31
$V_4O_5^+$	$V_3O_4^+ + VO$	4,71	0,52
$V_4O_6^+$	$V_3O_4^+ + VO_2$	4,28	0,43
$V_4O_6^+$	$V_3O_5^+ + VO$	4,70	0,47
$V_2O_5^-$	$VO_3^- + VO_2$	5,27	0,75
$V_3O_7^-$	$V_2O_5^- + VO_2$	5,88	0,59
$V_4O_9^-$	$V_3O_7^- + VO_2$	4,25	0,33

В таблице 7 даны результаты расчётов по формуле (8) энергий возбуждения кластеров $Nb_nO_m^+$ и $V_nO_m^\pm$ с использованием их энергий диссоциации E_d , в рамках модели «испарительного ансамбля» (табл. 6). Видно, что удельные энергии возбуждения $Nb_nO_m^+$ и $V_nO_m^+$ составляют, в основном, порядка 0,3-0,6 эВ/атом, и практически не зависят ни от размера кластеров, ни от типа составляющих их атомов. В таблице 7 приведены также энергии возбуждения некоторых кластеров $V_nO_m^-$. У данной небольшой группы положительных и

отрицательных кластерных ионов оксида ванадия их удельные энергии возбуждения близки и не зависят существенно от зарядового состояния.

В пятой главе диссертационной работы **«Некоторые вопросы теории эмиссии и фрагментации кластеров при ионном распылении»** намечен подход к теоретическому описанию процессов образования и распада кластеров с точки зрения современных представлений физики неравновесных процессов. Для качественного описания взаимодействия бомбардирующих ионов с поверхностью твёрдых тел использованы представление о векторе Умова-Пойнтинга $\vec{S}$. Если условия эксперимента (ионное облучение) таковы, что $\vec{S} > \vec{v} * F$, где $\vec{v}$ - скорость распространения деформации в среде, F - плотность упругой или тепловой энергии в конденсированной среде, то при этом среда будет разрушаться, т.е. будет происходить её радиационное повреждение. Происходящие при этом процессы могут быть проанализированы на основе представлений о фрактальном распределении возбуждений. Получаемое описание образования «фрактального кластера» адекватно формированию фрактальной картины трека смещённых атомов.

Поскольку распыление материалов под действием ионной бомбардировки характеризуется участием в процессах многих частиц, нелинейным характером их взаимодействия и сильной неравновесностью процессов, надёжной базой анализа распыления может служить синергетика. 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):

$$P_s(N) = P_s(0) \prod_{Z=1}^N \frac{t^+(Z-1)}{t^-(Z)} \quad (13),$$

где $t^+(Z-1)$ и $t^-(Z)$ – вероятности одноатомного рождения и гибели соответственно $(Z-1)$ и (Z) чисел заполнения. При сдвиге равновесий реакций (12) $P_s(N)$ имеет непуассоновский характер (в соответствии с экспериментом). Для ниспадающего участка (13) при больших N имеем:

$$-\partial \ln P_s(N) / \partial \ln N \equiv \alpha > 1 \quad (14)$$

в согласии с экспериментальным распределением выходов $Y(N) \sim N^{-\alpha}$. Подбором констант прямых и обратных реакций (12) синергетический подход может описать и интегральное, и кластерное распыление.

Изучение стохастизации позволяет понять существование области, промежуточной между линейными каскадами и термопиком. Для описания процессов в данном режиме может быть использовано представление о рождении большого числа частиц в едином акте – так называемом множественном процессе. Вероятность одновременного рождения n частиц:

$$W_n = \frac{2\pi}{\hbar} |M_n|^2 \prod_{i=1}^n \frac{V d\vec{p}_i}{(2\pi)^3} \delta\left(E - \sum_{i=1}^n E_i\right) \quad (15).$$

Здесь M_n – ответствующий множественному процессу матричный элемент, V – нормировочный объём, где происходит рождение частиц, $\vec{p}_i$ – импульс i -той частицы, E и E_i – полная и парциальная энергия частиц, $\delta(\dots)$ – дельта-функция Дирака. Согласно такому подходу, энергия при взаимодействии облучающей частицы с поверхностью «мгновенно» выделяется, и возбуждение передаётся атомам энергизованной области. В результате квантовомеханическое выражение для вероятности одновременного возбуждения N частиц заменяется отношением статистических весов $S(N)$. В задаче о вылете из твёрдого тела n атомов и p электронов получаем:

$$S(n, p) = \left(\frac{\Omega}{8\pi\hbar^3} \right)^n \left(\frac{dQ}{dE} \right) = \frac{(2\pi)^{\frac{3}{2}(n+p)} (M^n m^p)^{\frac{3}{2}} \Omega^{n+p} (E - nE_a - pE_i)^{\frac{3}{2}(n+p)-1}}{(8\pi^3\hbar^3)^{n+p} \Gamma\left(\frac{3}{2}(n+p)\right)}, \quad (16)$$

где $\Gamma(x)$ – гамма-функция, а в качестве геометрического объёма Ω подразумевается объём кристалла, где произошло выделение энергии E при столкновении бомбардирующей частицы с приповерхностной областью. Вероятность одновременного вылета n атомов и p электронов:

$$W(n, p) = S(n, p) / \sum_{n,p} S(n, p) \quad (17)$$

Отсюда средний выход атомов и электронов: $\bar{n} = \sum_{n,p} nW(n, p)$ и $\bar{p} = \sum_{n,p} pW(n, p)$.

Разработанная нами и приведённая выше методика, основанная на совместном использовании модели «испарительного ансамбля» (1)-(3) и теории РРК, даёт возможность определять такой параметр кластеров, как энергии диссоциации. Но несмотря на успешное практическое использование методики, с теоретической точки зрения остаётся неясным вопрос о возможном влиянии метастабильных атомов в распыленных неравновесных кластерных структурах на результат – величину их энергий диссоциации E_d .

Время установления стабильной формы кластера, синтезированного и эмиттированного при ионной бомбардировке поверхности, оценено в предположении, что неравновесный кластер имеет конфигурацию, близкую к стабильной, но в которой некоторые из атомов находятся в неравновесном положении, и релаксация атома происходит вследствие дрейфа за время τ_d под действием силового поля. Время дрейфа оценено как:

$$\tau_d \approx (R^2 \tau_0 k T^*) / (a^2 \Delta \mu), \quad (18)$$

Величина $\Delta \mu \sim 1-2$ эВ связана с числом разрываемых связей, $a \approx 5 \text{ \AA}$ – параметр решётки, $R \approx 100 \text{ \AA}$ – характерный размер большого распыленного кластера, $\tau_0 = 10^{-13} \text{ с}$ – период атомных колебаний; температура диффузии $kT^* \sim 1$ эВ/атом соответствует колебаниям возбуждённого кластера. Это даёт время установления равновесной конфигурации путём дрейфа атома из неравновесного состояния $\tau_d \leq 5 \cdot 10^{-11} \text{ с}$. Полученные оценки свидетельствуют, что экспериментальные исследования процессов фрагментации распыленных кластеров и измерения спектров кинетических энергий осколочных ионов для определения их энергии диссоциации производятся во временном

диапазоне порядка 10^{-5} - 10^{-4} с после эмиссии, т.е. в момент времени, когда релаксация неравновесных структур заведомо завершена. В то же время, процессами релаксации неравновесных кластерных структур могут быть объяснены возможные механизмы увеличения выходов отдельных групп атомарных и кластерных ионов, обусловленные процессами их образования при распадах фрагментации во временном диапазоне $\tau < 10^{-9}$ с после эмиссии.

Цитируемая литература.

1.Harkless J.A.W., Stillinger D.K., Stillinger F.H. Structures and Energies of SiO₂ Clusters. //J. Phys. Chem. - 1996. - vol. 100. - pp. 1098-1103.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Данная диссертационная работа посвящена разработке и апробации эффективной методики определения энергий активации распадов (диссоциации), средних констант скорости распада и средних времён жизни, средних энергий возбуждения. По результатам выполненных исследований можно сделать следующие выводы.

1. В идентичных условиях экспериментов проведены сравнительные исследования масс-распределений и процессов фрагментации кластеров при распылении поверхностей Ag, Nb и Ta пучками тяжёлых атомарных ионов Xe⁺ и близких по массе молекулярных ионов SF₅⁺. Показано, что выходы кластеров гомоядерных кластеров металлов Ag_n⁺ и Nb_n⁺ при распылении близкими по массе атомарными и молекулярными ионами одинаковы, а наблюдаемые различия в интенсивностях связаны с вероятностью ионизации распыленных частиц; средние константы скорости распада k и времена жизни τ кластеров Ag_n⁺ и Nb_n⁺ одинаковы.

2. Разработана методика оценки энергий диссоциации распыленных кластерных ионов, основанная на измерении спектров кинетических энергий осколочных ионов и обработки результатов измерений в рамках классического варианта теории мономолекулярных реакций Райса-Рамспергера-Касселя (РРК).

3. Измерены спектры кинетических энергий осколочных ионов при распадах распыленных ионами Xe⁺ кластеров Nb_mC_n⁺, на основе которых рассчитаны их энергии диссоциации на основе разработанной методики при совместном использовании теорий «испарительного ансамбля» и РРК. Показано хорошее соответствие численных значений энергий диссоциации, определённых в рамках обеих теорий, и их соответствие наблюдаемым закономерностям эмиссии и фрагментации кластеров Nb_mC_n⁺. Сделан вывод о целесообразности применения разработанной единой расчётной методики с использованием обоих теоретических подходов для определения энергий диссоциации распыленных кластеров.

4. При распылении поверхностей Si, V и Nb ионами ксенона при напуске кислорода измерен масс-спектральный состав кластеров Si_nO_m[±] (n=1-11, m=1-23), V_nO_m[±] (n=1-8, m=1-14) и Nb_nO_m[±] (n=1-6, m=1-13). Найдены эффективные условия образования и эмиссии кластеров в зависимости от давления

кислорода и природы первичного пучка. Установлено, что бомбардировка поверхности ионами Xe^+ при напуске кислорода является наиболее эффективным методом генерации оксидных кластеров.

5. Показано, что значения энергий диссоциации E_d кластеров $\text{Si}_n\text{O}^-_{2n+1}$ ($n=2-7$) и Si_nO_m^+ , рассчитанные в рамках моделей “испарительного ансамбля” и теории РРК на основе проведённых измерений спектров кинетических энергий осколочных ионов, идентичны, и что энергии диссоциации кластеров $\text{Si}_n\text{O}^-_{2n+1}$ ($n=2-7$), распыленных ионами O_2^+ и Xe^+ с напуском кислорода, одинаковы, т.е. структуры данных кластеров не зависят от способа их генерации.

6. Показано, что найденные численные значения энергий диссоциации E_d распыленных отрицательных кластеров $\text{Si}_n\text{O}^-_{2n+1}$ ($n=2-7$) совпадают с теоретическими значениями энергии диссоциации нейтральных кластеров Si_nO_{2n} в основном состоянии, имеющими циклическую структуру.

7. Определены средние константы скорости распада k , средние времена жизни τ_0 и энергии возбуждения распыленных кластеров $\text{Si}_n\text{O}^-_{2n+1}$ ($n=1-6$) и Si_nO_m^+ ($n=1,2$). Показано, что данные параметры кластеров $\text{Si}_n\text{O}^-_{2n+1}$, распыленных ионами O_2^+ и Xe^+ с напуском кислорода, а также энергии возбуждения распыленных кластеров не зависят от способа их генерации.

8. При распылении V и Nb ионами Xe^+ с напуском кислорода на поверхности исследованы распады кластеров $\text{V}_n\text{O}_m^\pm$ и $\text{Nb}_n\text{O}_m^\pm$. Для главных реакций распада $\text{V}_n\text{O}_m^\pm$ и $\text{Nb}_n\text{O}_m^\pm$ измерены спектры кинетических энергий осколочных ионов, впервые экспериментально определены энергии диссоциации ряда распыленных кластеров $\text{V}_n\text{O}_m^\pm$ и $\text{Nb}_n\text{O}_m^\pm$.

9. Определены значения средних констант скорости распада распыленных кластеров $\text{V}_n\text{O}_m^\pm$ и $\text{Nb}_n\text{O}_m^\pm$ для основных каналов фрагментации. Показано, что численные значения констант скорости распада кластеров сходной стехиометрии не зависят от их зарядового состояния, а удельная энергия возбуждения в распыленных кластерах не зависит от типа атомов в кластерах.

10. Применение синергетического подхода к явлению распыления материалов при ионной бомбардировке позволило качественно описать формирование наблюдаемых масс-распределений распыленных кластеров; предложен новый метод теоретического анализа, описывающий область, промежуточную между линейными каскадами и темопиком, с использованием которого получено выражение для среднего выхода распыленных атомов.

11. Теоретически оценено время релаксации распыленных неравновесных кластерных структур. Показано, что данные процессы не влияют на точность результатов, полученных с использованием теорий «испарительного ансамбля» Клотса и мономолекулярных реакций РРК, но могут быть ответственными за фрагментацию распыленных кластеров во временном диапазоне $\tau < 10^{-9}$ с.

**SCIENTIFIC COUNCIL DSc.02/30.12.2019.FM.65.01 ON AWARD OF
SCIENTIFIC DEGREES AT THE INSTITUTE OF ION-PLASMA AND
LASER TECHNOLOGIES**

**ACADEMY OF SCIENCES OF THE REPUBLIC OF UZBEKISTAN
INSTITUTE OF ION-PLASMA AND LASER TECHNOLOGIES NAMED
AFTER U.A.ARIFOV**

MAKSIMOV SERGEY YEVLANIYEVICH

**FUNDAMENTAL PROPERTIES OF CLUSTER IONS SPUTTERED FROM SURFACE
UNDER ACTION OF ION BOMBARDMENT**

01.04.04 – Physical electronics

**ABSTRACT OF DOCTORAL DISSERTATION (DSc)
ON PHYSICAL AND MATHEMATICAL SCIENCES**

TASHKENT – 2020

The subject of doctoral dissertation is registered at the Supreme Attestation Commission at the Cabinet of Ministers of the Republic of Uzbekistan under number №B2019.2.DSc/FM138.

Dissertation has been prepared at the Institute of ion-plasma and laser technologies named after U.A.Arifov of the Academy of Sciences of the Republic of Uzbekistan.

The abstract of the dissertation in three languages (Uzbek, Russian, English (resume)) has been posted on the website of the Scientific Council (<http://fti.uz/>) and on Information-educational portal «ZiyoNet» (<http://www.ziynet.uz/>).

Scientific consultant: **Ashurov Khatam Bakhronovich**
doctor of physical and mathematical sciences, professor

Official opponents: **Kremkov Mikhail Vitaliyevich**
doctor of physical and mathematical sciences, professor

Umirzakov Boltakhodja Ermatovich
doctor of physical and mathematical sciences, professor

Usmanov Dilshadbek Tursunbaevich
doctor of physical and mathematical sciences, senior researcher

Leading organization: Uzbekistan National University

The defense will take place on « 03 » 12 2020 at 14⁰⁰ at the meeting of the Scientific Council number DSc.02/30.12.2019.FM.65.01 at the Institute of Ion-Plasma and Laser Technologies (Address: 100125, Uzbekistan. Tashkent city, 33, Durmon yuli str., Phone: (99871) 262-42-54, e-mail: info@iplt.uz).

The doctoral dissertation is can be looked through in the Information-Resource Centre of Ion-Plasma and Laser Technologies (is registered № 4) (Address: 100125, Uzbekistan. Tashkent city, 33, Durmon yuli str., Phone: (99871) 262-32-54).

The abstract of the dissertation is sent out on « 26 » 11 2020.
(Mailing report № 4 on « 26 » 11 2020).



S. Bakhramov **S.A.Bakhramov**
Vice-Chairman of the Scientific Council on award of
Scientific Degrees, Doctor of Physical and
Mathematical Sciences, Professor

I.D. Yadgarov
Scientific Secretary of Scientific Council on award
of Scientific Degrees, Doctor of Physical and
Mathematical Sciences, senior researcher

Sh. D. Payziev
Chairman of scientific Seminar under Scientific
Council on award of Scientific Degrees, Doctor of
Physical and Mathematical Sciences, senior
researcher

INTRODUCTION (abstract of DSc thesis)

Topicality and necessity of the thesis. Ionic treatment of materials is one of the methods for solving of many research and industrial problems, in which atomic and molecular clusters have been widely used over the past decades. Particularly, cluster ion beams play an important role in secondary ion mass spectrometry (SIMS). The generation of clusters under sputtering of materials by accelerated ions has a special place among other methods of their production, allowing to obtain by selecting of the sputtered material and the type of bombarding particles the homo- and heterogeneous clusters, which in some cases are difficult or even impossible to synthesize by other methods. However, despite the unique possibilities of sputtering, there is still no comprehensive method for determination of the most important properties of clusters sputtered by ion bombardment, and the nature of the processes of formation and emission of clusters is still unclear.

Conformity of the research to the priority areas of science and technology development of the Republic of Uzbekistan. This research work was carried out in accordance with priority directions of development of science and technologies of the Republic of Uzbekistan: II “Physics, astronomy, energetic and engineering”, III “Energetics, energy saving, transport, engineering and electronic instrumentation”.

Review of international scientific research on the topic of the dissertation. Scientific research in the fields of formation and emission of cluster particles under ion bombardment and interaction of clusters with various materials are carried out in leading research centers, including: Argonne National Laboratory (USA), Pennsylvania State University (USA), Texas A&M University (USA), University of Kaiserslautern (Germany), University of Duisburg-Essen (Germany), University of Rostock (Germany), Universite Paris Sud (France), Université Catholique de Louvain (Belgium), Technion-Israel Institute of Technology (Israel), Wuhan University (China), University of Helsinki (Finland), Moscow State University (Russia), Institute of ion-plasma and laser technologies of the Academy of Sciences of the Republic of Uzbekistan (Uzbekistan) and others.

Problem development status is study of the properties of clusters sputtered under ion bombardment.

Relevance of the dissertation research to the plans and scientific-research works. The research presented in the dissertation was carried out in accordance with the approved research work plans of the Institute of ion-plasma and laser technologies in the frameworks of the State Research and Development Programs of the Republic of Uzbekistan.

The purpose of the research is the development and test of the effective method of determination of the fundamental properties of charged clusters sputtered by ion bombardment, including their energies of activation of decays (dissociation).

Task of research work is the study of the fundamental properties of charged clusters sputtered by ion bombardment, including their dissociation energies.

The objects of the research are the sputtered Ag_n^+ , Nb_n^+ , Ta_n^+ , Nb_nC_m^+ , $\text{Si}_n\text{O}_m^\pm$, $\text{V}_n\text{O}_m^\pm$ и $\text{Nb}_n\text{O}_m^\pm$ cluster ions.

The subject of the study are the processes of emission and fragmentations of Ag_n^+ , Nb_n^+ , Ta_n^+ , Nb_nC_m^+ , $\text{Si}_n\text{O}_m^\pm$, $\text{V}_n\text{O}_m^\pm$ и $\text{Nb}_n\text{O}_m^\pm$ cluster ions sputtered from the surfaces of materials under ion bombardment.

Methods of the research are the secondary ion mass spectrometry, theory of the "evaporative ensemble", theory of unimolecular reactions.

Scientific novelty of the research work consists of the following results:

it is shown that the yields of Ag_n and Nb_n clusters under sputtering of Ag and Nb surfaces by close in masses atomic Xe^+ and molecular SF_5^+ ions are the same, and the observed differences in intensities are associated with the probability of their ionization; the fragmentation channels and the decay probabilities of Ag_n^+ , Nb_n^+ and Ta_n^+ clusters sputtered by atomic and molecular ions are the same;

it is shown that the average decay rate constants and lifetimes of metal clusters sputtered by atomic and molecular ions of similar mass are the same;

the method of estimation of the dissociation energies of sputtered cluster ions has been developed, based on measuring of the kinetic energy spectra of fragment ions and processing of the measurement results within the framework of the unimolecular reactions theory (RRK), using which the dissociation energies of Nb_mC_n^+ clusters are estimated; the expediency of using of the developed unified calculation technique based on the combined use of the "evaporation ensemble" and RRK theories to determine the dissociation energies of sputtered clusters has been substantiated;

the effective conditions for the formation and emission of $\text{Si}_n\text{O}_m^\pm$, $\text{V}_n\text{O}_m^\pm$ and $\text{Nb}_n\text{O}_m^\pm$ clusters were determined when the surfaces of Si, V and Nb are sputtered by Xe^+ ions with oxygen inlet into the bombardment chamber;

it is shown that the dissociation energies of the $\text{Si}_n\text{O}_{2n+1}^-$ ($n=2-7$) and Si_nO_m^+ clusters, calculated within the framework of the "evaporation ensemble" and RRK theories based on the measurements of the kinetic energy spectra of fragmentation ions, are identical, and that the dissociation energies of the $\text{Si}_n\text{O}_{2n+1}^-$ ($n=2-7$) clusters sputtered by O_2^+ and Xe^+ ions with oxygen inlet are the same, i.e. cluster structures do not depend on the method of their generation; the average decay rate constants and the average lifetimes of the $\text{Si}_n\text{O}_{2n+1}^-$ ($n=1-6$) and Si_nO_m^+ ($n=1,2$) clusters have been determined;

the processes of fragmentation of $\text{V}_n\text{O}_m^\pm$ and $\text{Nb}_n\text{O}_m^\pm$ clusters were investigated; the spectra of the kinetic energies of fragment ions were measured for the main decays of $\text{V}_n\text{O}_m^\pm$ and $\text{Nb}_n\text{O}_m^\pm$, on the basis of which their dissociation energies were determined within the framework of the developed method using the theories of the "evaporation ensemble" and the RRK; the average decay rate constants of sputtered clusters $\text{V}_n\text{O}_m^\pm$ and $\text{Nb}_n\text{O}_m^\pm$ were determined for the main fragmentation channels; it is shown that the decay rate constants for clusters of similar stoichiometry do not depend on their charge state, and the specific excitation energy in sputtered clusters does not depend on the type of atoms in the clusters, or on their charge;

it is shown theoretically that the formation of the spatial pattern of the track of displaced atoms in a linear cascade can be described similarly to the formation of a "fractal cluster", and the use of a synergetic approach to the phenomenon of sputtering of materials during ion bombardment makes it possible to qualitatively describe the formation of the distributions of sputtered clusters and develop a unified approach to processes of elastic displacements and thermospikes based on the concepts of nonlinear dynamics; a new method of theoretical analysis is proposed that describes the area intermediate between linear cascades and thermospikes;

the relaxation times of sputtered nonequilibrium cluster structures were determined theoretically; it is shown that these processes do not affect the accuracy of the results obtained using the "evaporative ensemble" and RRK theories, but can be responsible for fragmentation of sputtered clusters in the times $\tau < 10^{-9}$ s.

Practical results of research work: for the first time, the dissociation energies of Nb_nC_m^+ , $\text{Si}_n\text{O}_m^\pm$, $\text{V}_n\text{O}_m^\pm$ and $\text{Nb}_n\text{O}_m^\pm$ clusters have been determined, which can be used to estimate the possibility of using of these clusters in various applications of ion technologies.

Reliability of the obtained results of research is justified by the use of modern methods of secondary ion mass spectrometry, by detailed and complete analysis of the conditions and statistics of experiments and by the use of high-precision modern measuring devices.

Scientific and practical value of the research results. The scientific significance of the developed technique for determining the dissociation energies of clusters, based on measuring of the kinetic energies spectra of fragment ions with subsequent processing of the results with the combined use of the of "evaporation ensemble" and unimolecular reactions theories, consists in the possibility of determination of this fundamental parameter of cluster particles; the practical significance of this technique is in its application to determine the stability of sputtered cluster ions used in modern ion technologies.

Application of researches results. The obtained values of the dissociation energies of sputtered V_mO_n^+ clusters were used in Wuhan University (Accelerator Laboratory, School of Physics and Technology) and allowed to obtain the beams of positive vanadium oxide cluster ions with the required stoichiometry and other operating parameters (Letter from Wuhan University dated 09.10.2020).

Results of estimation of dissociation energies of sputtered silicon oxide clusters were used in Michigan Institute of Plasma Science and Engineering (Michigan State University) to interpret the measured mass spectra in terms of the yields of clusters and their relative intensity (Letter of Michigan State University dated 09.30.2020).

The developed theoretical method of analysis based on the concepts of radiation synergetics has been applied in the Physico-Technological Institute of the Ural Federal University (Russia) in the study of radiation-induced effects (Letter from Physico-Technological Institute of the Ural Federal University dated 05.10.2020).

Approbation of research results. Results of the research work have been discussed at twenty nine (29) international and republican scientific conferences.

Publication of the results. The results obtained for the topic of the dissertation is published in 59 scientific papers, including 21 articles in international and national journals.

Structure and volume of the dissertation. The dissertation work consists of introduction, five chapters, conclusion, list of published scientific works, list of references and appendix. It presented on 193 pages of typewritten text, including 38 figures and 20 tables.

ЭЪЛОН ҚИЛИНГАН ИШЛАР РЎЙХАТИ
СПИСОК ОПУБЛИКОВАННЫХ РАБОТ
LIST OF PUBLISHED SCIENTIFIC WORKS

I бўлим (I часть; part I)

- 1A. Ghalab S., Staudt C., Maksimov S.E., Mazarov P., Tugushev V.I., Dzhemilev N.Kh., Wucher A. Formation of sputtered silver clusters under bombardment with SF_5^+ ions. // Nucl.Instr.Meth. - 2002. - V.B197. - P.43-48. (№1.Web of Science; IF=1,27).
- 2A. Dzhemilev N.Kh., Bekkerman A.D., Maksimov S.E., Tugushev V.I. The unimolecular decay of Al_n^+ and Si_n^+ sputtered clusters. // Appl.Surf.Sci. - 2003. - V.203-204. - P.118-121. (№1.Web of Science; IF=6,182).
- 3A. Максимов С.Е., Верхотуров С.В., Соломко В.В. Исследование эмиссии и фрагментации ниобий-углеродных кластеров, распыленных ксеноном с поверхности карбида ниобия. // Узбекский физический журнал. - 2004. - Т.6. - № 2. - С.96-105. (01.00.00.№5).
- 4A. Джемилев Н.Х., Лифанова Л.Ф., Максимов С.Е., Хожиев Ш.Т. Распыленные кластеры $(\text{SiO}_2)_n\text{O}^-$: константы скорости распада и энергии возбуждения // Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования. - 2006. - № 7. - С. 68-71. (№1.Web of Science; IF=0.648).
- 5A. Джемилев Н.Х., Лифанова Л.Ф., Максимов С.Е., Тукфатуллин О.Ф., Хожиев Ш.Т. Распыленные кластеры Si_nO_m^- : кинетические энергии распада, энергии диссоциации и структуры // Узбекский физический журнал. - Ташкент, 2007. - Т.9. - № 5-6. - С. 325-336. (01.00.00.№5).
- 6A. Джемилев Н.Х., Коваленко С.Ф., Лифанова Л.Ф., Максимов С.Е., Хожиев Ш.Т. Фрагментация распыленных кластеров Si_nO_m^+ : кинетические энергии распада и энергии диссоциации // Известия РАН, сер.физ. - 2008. - Т. 72. - № 7. - С. 962-966. (№1.Web of Science; IF=0.33).
- Dzhemilev N.Kh., Kovalenko S.F., Lifanova L.F., Maksimov S.E., Khojiev Sh.T. Fragmentation of sputtered Si_nO_m^+ clusters: Release kinetic and dissociation energies // Bulletin of the Russian Academy of Sciences: Physics. - 2008. - vol. 72. - N 7. - pp. 910–914. (№1.Web of Science; IF=0.33).
- 7A. Хожиев Ш.Т., Джемилев Н.Х., Максимов С.Е., Коваленко С.Ф., Тукфатуллин О.Ф. Масс-распределения, каналы фрагментации и энергии диссоциации распыленных кластеров Nb_nO_m^+ . // Узбекский физический журнал. – Ташкент, 2010. - Т. 12. - № 1-2. - С. 96-102. (01.00.00.№5).
- 8A. Максимов С.Е., Оксенгендлер Б.Л., Тураев Н.Ю. Фрактальная концепция радиационного повреждения материалов. // Узбекский физический журнал. - 2011. - Т. 13. - №1. – С. 18-22. (01.00.00.№5).
- 9A. Максимов С.Е., Оксенгендлер Б.Л., Тураев Н.Ю. Синергетический подход к изучению кластерного распыления материалов при ионной бомбардировке. // ДАН Республики Узбекистан. – 2011. - №6. – С.24-26. (01.00.00, №7).
- 10A. Максимов С.Е., Коваленко С.Ф., Тукфатуллин О.Ф., Хожиев Ш.Т., Джемилев Н.Х. Исследования энергий диссоциации кластеров оксидов

- ниобия и ванадия, синтезированных ионным распылением // Известия РАН, серия физическая. - 2012. - Т. 76. - № 5. - С. 593-597. (№1.Web of Science; IF=0.33).
- Maksimov S.E., Kovalenko S.F., Tukfatullin O.F., Khojiev Sh.T., Dzhemilev N.Kh. Investigating the dissociation energies of niobium and vanadium oxides clusters synthesized by ion sputtering // Bulletin of the Russian Academy of Sciences. Physics. – 2012. - vol. 76. - N. 5. - pp. 527-530. (№1.Web of Science; IF=0.33).
- 11А. Максимов С.Е., Оксенгендлер Б.Л., Тураев Н.Ю. Синергетика распыления материалов при ионной бомбардировке. // Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования. - 2013. - №4. – С. 42-47. (№1.Web of Science; IF=0.52).
- S.E.Maksimov, B.L.Oksengendler, N.Yu.Turaev. Synergetic Approach to Studying Material Sputtering under Ion Bombardment. // Journal of Surface Investigation. X-ray, Synchrotron and Neutron Techniques. – 2013. - vol. 7. - №2. – pp. 333–338. DOI: 10.1134/S1027451013020407 (№1.Web of Science; IF=0.52).
- 12А. Оксенгендлер Б.Л., Максимов С.Е., Тураева Н.Н., Тураев Н.Ю. Множественные процессы при распылении материалов ионной бомбардировкой. // Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования. - 2013. - №6. – С.60-64; (№1.Web of Science; IF=0.52).
- Oksengendler B.L., Maksimov S.E., Turaeva N.N., Turaev N.Yu. Multiple Processes during the Sputtering of Materials by Ion Bombardment. // Journal of Surface Investigation. X-ray, Synchrotron and Neutron Techniques. - 2013. – vol. 7. - №3. – pp. 557–561. (№1.Web of Science; IF=0.52).
- 13А. Максимов С.Е., Джемилев Н.Х., Оксенгендлер Б.Л., Войцеховский И.А. Неравновесные структуры и процессы распада кластеров, распыленных ионной бомбардировкой. // Письма в ЖТФ. - 2013. - Т.39. - №11. - С.38-44. (№1.Web of Science; IF=0.791).
- Maksimov S.E., Dzhemilev N.Kh., Oksengendler B.L., Wojciechowski I.A. Nonequilibrium structures and decay processes of clusters sputtered under ion bombardment. // Technical Physics Letters. - 2013. – vol. 39. - № 6. – pp. 514–516. (№1.Web of Science; IF=0.791).
- 14А Джемилев Н.Х., Верхотуров С.В., Соломко В.В., Максимов С.Е. Спектры кинетических энергий распада и стабильность ниобий-углеродных кластеров, распыленных с поверхности карбида ниобия ионами ксенона // Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования. - 2013. - №10. - С. 89-94. (№1.Web of Science; IF=0.52).
- Maksimov S.E., Verkhoturov S.V., Solomko V.V., Dzhemilev N. Kh. Kinetic-Energy Release Distributions and Stability of Niobium–Carbon Clusters Sputtered from the Surface of Niobium Carbide by Xenon Ions // Journal of

- Surface Investigation. X-ray, Synchrotron and Neutron Techniques. - 2013. - vol. 7, N 5. - pp. 996–1000. (№1.Web of Science; IF=0.52).
- 15А. Джемилев Н.Х., Коваленко С.Ф., Максимов С.Е., Тукфатуллин О.Ф., Хожиев Ш.Т. Эмиссия и фрагментация распыленных кластеров $Nb_nO_m^-$ и $V_nO_m^-$ // Узбекский физический журнал. – 2013. - Т. 15. - №1-2. - С. 1-7. (01.00.00.№5).
- 16А. Максимов С.Е., Джемилев Н.Х., Коваленко С.Ф., Тукфатуллин О.Ф., Хожиев Ш.Т. Константы скорости распада распыленных кластеров оксида ванадия // Известия РАН, сер. физ. - 2014. - Т.78. - № 6. - С. 710-713. (№1.Web of Science; IF=0.33).
- Maksimov S.E., Dzhemilev N.Kh., Kovalenko S.F., Tukfatullin O.F., Khozhiev Sh.T. Decay Rate Constants of Sputtered Vanadium Oxide Clusters // Bulletin of the Russian Academy of Sciences. Physics. - 2014. - vol. 78, N 6. - pp. 508-511. (№1.Web of Science; IF=0.33).
- 17А. Максимов С.Е., Джемилев Н.Х., Коваленко С.Ф., Тукфатуллин О.Ф., Хожиев Ш.Т. Константы скорости распада распыленных кластеров оксида ниобия // Узбекский физический журнал. –2015. - Т. 17. - № 3.- С. 171-177. (01.00.00.№5)
- 18А. Максимов С.Е., Джемилев Н.Х., Коваленко С.Ф., Тугушев В.И., Тукфатуллин О.Ф., Хожиев Ш.Т. Средние константы скорости распада и энергии возбуждения кластеров металлов, распыленных ионами SF_5^+ и инертных газов // Известия РАН, сер. физ. - 2016. - Т.80. - №2. - С.114–117. (№1.Web of Science; IF=0.33).
- S.E.Maksimov, N.Kh.Dzhemilev, S.F.Kovalenko, V.I.Tugushev, O.F.Tukfatullin, Sh.T.Khojiev. Average decay rate constants and excitation energies of metal clusters sputtered by SF_5^+ and inert gas ions. // Bulletin of the Russian Academy of Sciences. Physics. - 2016. – vol. 80. - № 2. - pp. 101–104. (№1.Web of Science; IF=0.33).
- 19А Джемилев Н.Х., Коваленко С.Ф., Максимов С.Е., Тукфатуллин О.Ф., Хожиев Ш.Т. Сравнительное исследование масс-распределений и процессов фрагментации кластерных ионов при распылении поверхностей ниобия и тантала пучками SF_5^+ , He^+ и Ar^+ . // Узбекский физический журнал. - 2016. - Т. 18. - № 2. - С. 124-132. (01.00.00.№5)
- 20А. Джемилев Н.Х., Коваленко С.Ф., Максимов С.Е., Тукфатуллин О.Ф., Хожиев Ш.Т. Энергии возбуждения кластеров $V_nO_m^+$ и $Nb_nO_m^+$, распыленных ионной бомбардировкой. // Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования. - 2018. - № 1. - С. 60–64. (№1.Web of Science; IF=0.52).
- S.E.Maksimov, N.Kh.Dzhemilev, S.F.Kovalenko, O.F.Tukfatullin, Sh.T.Khozhiev. Excitation energies of $V_nO_m^+$ and $Nb_nO_m^+$ clusters sputtered under ion bombardment. // Journal of Surface Investigation: X-ray, Synchrotron and Neutron Techniques. - 2018. - vol. 12, №1. - pp. 50-53. (№1.Web of Science; IF=0.52).

- 21А. Максимов С.Е., Ашуров Х.Б., Адилов М.М., Коваленко С.Ф., Тукфатуллин О.Ф., Хожиев Ш.Т. Структуры кластеров Si_nO_m^+ , распыленных ионной бомбардировкой. // Узбекский физический журнал. - 2019. - Т. 21. - №. 5. - С. 283-292. (01.00.00.№5)

II бўлим (II часть; part II)

- 22А. Джемилев Н.Х., Максимов С.Е., Тугушев В.И., Коваленко С.Ф. Исследование эмиссии и фрагментации кластерных ионов при бомбардировке поверхностей Nb, Ta и Ag ионами Ar^+ , Xe^+ и SF_5^+ . // III Республиканская конференция по физической электронике: Тез. докл. Ташкент, Шахрисабз, 6-8 ноября 2002. -Ташкент. - 2002. - С.93.
- 23А. Dzhemilev N.Kh., Maksimov S.E., Tugushev V.I.. Emission of metal clusters under SF_5^+ molecular ion bombardment // 3rd European Workshop on Secondary Ion Mass Spectrometry. SIMS Europe 2002. September 15-17, 2002, Münster, Germany. Final Program and Book of Abstracts. - Münster. -2002. - P.89.
- 24А. Джемилев Н.Х., Максимов С.Е., Коваленко С.Ф., Тугушев В.И. Эмиссия и фрагментация кластерных ионов, распыленных с поверхностей металлов ионами SF_5^+ // Взаимодействие ионов с поверхностью (ВИП-2003): Материалы XVI Международной конференции. - Звенигород, Москва, 2003. - Т. 1. - С. 367-370.
- 25А. Джемилев Н.Х., Лифанова Л.Ф., Максимов С.Е., Хожиев Ш.Т. Распыленные кластеры $(\text{SiO}_2)_n\text{O}^-$: константы скорости распада и энергии возбуждения. // Взаимодействие ионов с поверхностью ВИП-2005: Труды XVII межд. конф., 25-29 августа 2005 г. - Звенигород, Москва, 2005. - Т.1. - С.391-394.
- 26А. Лифанова Л.Ф., Максимов С.Е., Тукфатуллин О.Ф., Джемилев Н.Х. Измерение кинетических энергий распада распыленных кластеров $(\text{SiO}_2)_n\text{O}^-$ и энергии диссоциации // Физическая электроника: Тез. докл. IV Респ. конф. 2-4 ноября 2005. – Ташкент, 2005 - С. 96.
- 27А. Максимов С.Е., Коваленко С.Ф., Хожиев Ш.Т., Джемилев Н.Х. Эмиссия и фрагментация распыленных $\text{V}_n\text{O}_m^\pm$ кластеров // Физическая электроника: Тез. докл. IV Респ. конф. 2-4 ноября 2005. –Ташкент, 2005. - С. 97.
- 28А. Максимов С.Е., Лифанова Л.Ф., Тукфатуллин О.Ф., Джемилев Н.Х. Реакции распада и структуры распыленных Si_nO_m^- кластеров // Физическая электроника: Тез. докл. IV Респ. конф. 2-4 ноября 2005. - Ташкент, 2005. - С. 98.
- 29А. Максимов С.Е., Хожиев Ш.Т., Джемилев Н.Х. Исследование эмиссии и фрагментации кластеров Si_nO_m^+ , распыленных с поверхности кремния ионами ксенона // IV Республиканская конференция по физической электронике: Тез. докл. 2-4 ноября 2005. - Ташкент, 2005. - С. 99
- 30А. Maksimov S.E., Khojiev Sh.T., Lifanova L.F., Tukfatullin O.F., Dzhemilev N.Kh. Influence of the bombardment conditions on dissociation and excitation energies of $\text{Si}_n\text{O}_{2n+1}^-$ sputtered clusters. // 5nd European Workshop on Secondary

- Ion Mass Spectrometry. SIMS Europe 2006. September 24-26, 2006, Münster, Germany. Final Program and Book of Abstracts. - Münster. - 2006. - P.17.
- 31.А Джемилев Н.Х., Коваленко С.Ф., Лифанова Л.Ф., Максимов С.Е., Хожиев Ш.Т. Фрагментация распыленных кластеров Si_nO_m^+ : кинетические энергии распада и энергии диссоциации // Взаимодействие ионов с поверхностью ВИП-2007: XVIII Межд. конф. 24-28 августа 2007. - Звенигород, Москва, 2007. - Т. 2. - С. 159-162.
 - 32.А. Максимов С.Е., Джемилев Н.Х., Лифанова Л.Ф., Тукфатуллин О.Ф., Хожиев Ш.Т. Масс-распределения и константы скорости распада распыленных кластеров Si_nO_m^+ // Взаимодействие ионов с поверхностью ВИП-2007: XVIII Межд. конф. 24-28 августа 2007. - Звенигород, Москва, 2007. - Т. 2. - С. 181-184.
 - 33.А. Maksimov S.E., Khojiev Sh.T., Dzhemilev N.Kh. Emission and fragmentation of sputtered $\text{V}_n\text{O}_m^\pm$ clusters // Final Program and Book of Abstracts of the 6th European Workshop on Secondary Ion Mass Spectrometry. SIMS Europe 2008. September 14-16, 2008. - Münster (Germany), 2008. - P. 18.
 - 34.А. Максимов С.Е., Коваленко С.Ф., Тукфатуллин О.Ф., Хожиев Ш.Т. Исследования эмиссии и фрагментации распыленных V_nO_m^+ кластеров // Взаимодействие ионов с поверхностью ВИП-2009: Труды XIX межд. конф., 21-25 августа 2009. - Звенигород, Москва, 2009. - Т. 1. - С. 414-417.
 - 35.А. Хожиев Ш.Т., Джемилев Н.Х., Максимов С.Е., Коваленко С.Ф., Тукфатуллин О.Ф. Масс- распределения, каналы фрагментации и энергии диссоциации распыленных кластеров Nb_nO_m^+ . // Физическая электроника UzPES-5: Тез. докладов V конф. 28-30 октября 2009. –Ташкент, 2009. - С. 91.
 - 36.А. Dzhemilev N.Kh., Khojiev Sh.T., Maksimov S.E., Rotstein V.M., Tukfatullin O.F. SIMS Simulation of Monomolecular Transition of Si_nO_m^- ($n = 1-7$ and $m = 1-15$) Clusters: Composition and Structures // Final Program and Book of Abstracts of the 7th European Workshop on Secondary Ion Mass Spectrometry. SIMS Europe 2010. September 19-21, 2010. - Münster (Germany), 2010. – P. 23
 - 37.А. Dzhemilev N.Kh., Khojiev Sh.T., Maksimov S.E., Rotstein V.M., Tukfatullin O.F. Fragmentation of Sputtered $(\text{SiO}_2)_n\text{O}^-$ ($n = 2-7$) Magic Clusters: Release, Kinetic and Dissociation Energies // Final Program and Book of Abstracts of the 7th European Workshop on Secondary Ion Mass Spectrometry. SIMS Europe 2010. September 19-21, 2010. - Münster, (Germany), 2010. – P. 24.
 - 38.А. Максимов С.Е., Оксенгендлер Б.Л., Тураев Н.Ю. Синергетика распыления материалов при ионной бомбардировке. // Тезисы докладов XLI международной конференции по физике взаимодействия заряженных частиц с кристаллами. Москва. 2012. Под ред. проф. М.И.Панасюка. - М.: Университетская книга, 2011. - С. 91.
 - 39.А. Максимов С.Е., Коваленко С.Ф., Тукфатуллин О.Ф., Хожиев Ш.Т., Джемилев Н.Х. Исследования энергий диссоциации кластеров оксидов

- ниобия и ванадия, синтезированных ионным распылением // Взаимодействие ионов с поверхностью ВИП-2011: Труды XX Международной конференции, 25-29 августа 2011. - Звенигород, Москва, 2011. – Т. 1. - С. 328-331.
- 40A. Maksimov S.E., Oksengendler B.L., Turaev N.Yu., Verkhoturov S.V. Cluster emission under ion bombardment: synergetic approach. // "SIMS XVIII: XVIIIth International Conference on Secondary Ion Mass Spectrometry. Riva del Garda, Italy, September 18-23, 2011. Book of Abstracts."- p. 207.
- 41A. Maksimov S.E., Khojiev Sh.T., Kovalenko S.F., Tukfatullin O.F., Verkhoturov S.V., Dzhemilev N.Kh. Emission and fragmentation of sputtered $V_nO_m^+$ and $Nb_nO_m^+$ clusters // Book of Abstracts of the XVIIIth International Conference on Secondary Ion Mass Spectrometry (SIMS XVIII). September 18-23, 2011. Riva del Garda (Italy), 2011. - P. 339.
- 42A. Maksimov S.E., Solomko V.V., Verkhoturov S.V., Dzhemilev N.Kh. SIMS investigations of niobium-carbon clusters sputtered by ion bombardment // Book of Abstracts of the XVIIIth International Conference on Secondary Ion Mass Spectrometry (SIMS XVIII). September 18-23, 2011. -. - Riva del Garda (Italy), 2011. - P. 340.
- 43A. Джемилев Н.Х., Верхотуров С.В., Соломко В.В., Максимов С.Е. Спектры кинетических энергий распада и стабильность ниобий-углеродных кластеров, распыленных с поверхности карбида ниобия ионами ксенона // XLII межд. Тулиновская конф. по физике взаимодействия заряженных частиц с кристаллами: Тез. докл. 29 мая – 31 мая 2012. – Москва, 2012. - С. 113.
- 44A. Оксенгендлер Б.Л., Максимов С.Е., Тураева Н., Тураев Н.Ю. Множественные процессы при распылении материалов ионной бомбардировкой. // Тезисы докладов XLII международной Тулиновской конференции по физике взаимодействия заряженных частиц с кристаллами (Москва 29 мая – 31 мая 2012) – Москва, 2012. - С.123.
- 45A. Maksimov S.E., Dzhemilev N.Kh., Oksengendler B.L., Wojciechowski I.A. Relaxation processes of nonequilibrium clusters sputtered by ion bombardment. // 8nd European Workshop on Secondary Ion Mass Spectrometry. SIMS Europe 2012. September 9-11, 2012, Münster, Germany. Final Program and Book of Abstracts. - Münster. - 2012. – p.121.
- 46A. Maksimov S.E., Oksengendler B.L., Turaeva N.N. Synergy of radiation cascades. // «International Conference «Nuclear science and its application». September 25-28, 2012. Samarkand (Uzbekistan). Book of Abstracts». Tashkent. 2012. - pp.252-253.
- 47A. Джемилев Н.Х., Коваленко С.Ф., Максимов С.Е., Тукфатуллин О.Ф., Хожиев Ш.Т. Эмиссия и фрагментация распыленных кластеров $Nb_nO_m^-$ // Актуальные проблемы физической электроники: Межд. конф. 28 ноября 2012. Ташкент, 2012. - С. 9.
- 48A. Оксенгендлер Б.Л., Максимов С.Е., Войцеховский И.А. Релаксация неравновесных структур и фрагментация кластеров, эмиттированных при

- ионном распылении. // Тезисы докладов XLIII международной Тулиновской конференции по физике взаимодействия заряженных частиц с кристаллами (Москва 28 мая – 30 мая 2013). – Москва. - 2013. - С.91.
- 49А. Максимов С.Е., Джемилев Н.Х., Коваленко С.Ф., Тукфатуллин О.Ф., Хожиев Ш.Т. Константы скорости распада распыленных кластеров оксида ванадия // Взаимодействие ионов с поверхностью ВИП-2013: Труды XXI Межд. конф. 22-26 августа 2013 – Ярославль (Россия), 2013. - Т. 1. - С. 453-456.
- 50А. Maksimov S.E., Dzhemilev N.Kh., Kovalenko S.F., Khojiev Sh.T., Tukfatullin O.F., Oksengendler B.L., Wojciechowski I.A. Relaxation of nonequilibrium structures and decay processes of clusters generated under ion sputtering of surfaces // Proceedings of International Conference «Low-Dimensional Nanoscale Systems», November 6-7 2012. - Tashkent, 2012. -pp. 6-23.
- 51А. Maksimov S.E., Kovalenko S.F., Tukfatullin O.F., Khojiev Sh.T., Dzhemilev N.Kh. SIMS investigations of sputtered $V_nO_m^-$ and $Nb_nO_m^-$ clusters // Final Program and Book of Abstracts of the 9th European Workshop on Secondary Ion Mass Spectrometry. SIMS Europe 2014. September 7-9, 2014. - Munster (Germany), 2014. - p. 73.
- 52А. Джемилев Н.Х., Коваленко С.Ф., Максимов С.Е., Тугушев В.И., Тукфатуллин О.Ф., Хожиев Ш.Т. Эмиссия и фрагментация кластеров при бомбардировке поверхностей Nb, Ta и Ag ионами SF_5^+ и инертных газов. // Тезисы докладов XLV международной Тулиновской конференции по физике взаимодействия заряженных частиц с кристаллами (Москва 26 мая – 28 мая 2015) Москва 2015. - С. 137.
- 53А. Максимов С.Е., Джемилев Н.Х., Коваленко С.Ф., Тугушев В.И., Тукфатуллин О.Ф., Хожиев Ш.Т. Средние константы скорости распада и энергии возбуждения кластеров металлов, распыленных ионами SF_5^+ и инертных газов // Взаимодействие ионов с поверхностью ВИП-2015: Труды XXII Межд. конф. 20-24 августа 2015 г. - Москва, 2015. -Т. 1. - С.127-130.
- 54А. Оксенгендлер Б.Л., Ашуров Х.Б., Максимов С.Е., Тураев Н.Ю. Фрактальная концепция в радиационной физике твёрдого тела. // «Труды XXV Международной Конференции «Радиационная физика твёрдого тела» (Севастополь, 6-11 июля 2015 г.)». - С. 617-627
- 55А. Джемилев Н.Х., Коваленко С.Ф., Максимов С.Е., Тукфатуллин О.Ф., Хожиев Ш.Т. Энергии возбуждения кластеров $V_nO_m^+$ и $Nb_nO_m^+$, распыленных ионной бомбардировкой. // Тезисы докладов XLVI международной Тулиновской конференции по физике взаимодействия заряженных частиц с кристаллами (Москва 31 мая – 2 июня 2016) Москва 2016. - С.102.
- 56А. Джемилев Н.Х., Коваленко С.Ф., Максимов С.Е., Тукфатуллин О.Ф., Хожиев Ш.Т. ВИМС исследования энергий диссоциации кластеров $V_nO_m^-$ и $Nb_nO_m^-$, распыленных ионной бомбардировкой. // Тезисы докладов

- XLVII международной Тулиновской конференции по физике взаимодействия заряженных частиц с кристаллами (Москва 30 мая – 1 июня 2017) Москва 2017. - С.86.
- 57А. Оксенгендлер Б.Л., Максимов С.Е., Хугаев А.В. Радиационная синергетика: концепции и эффекты. // «Труды XXVII Международной конференции «Радиационная физика твёрдого тела» (Севастополь, 10 июля – 15 июля 2017 г.)». - С. 510-519.
- 58А. Maksimov S.E., Ashurov Kh.B., Dzhemilev N.Kh., Kovalenko S.F., Tukfatullin O.F., Khojiev Sh.T. SIMS investigations of fundamental properties of clusters. // IV International Conference on modern problems in physics of surfaces and nanostructures. Book of abstracts. Yaroslavl, Russia. 26-29 August 2019. - p.111.
- 59А. Максимов С.Е., Ашуров Х.Б., Джемилев Н.Х., Коваленко С.Ф., Тукфатуллин О.Ф., Хожиев Ш.Т. Исследование методом ВИМС фундаментальных свойств распыленных кластерных ионов. // Республиканская конференция по физической электронике и фотонике. 23 октября 2019. Ташкент, Узбекистан. Сборник тезисов докладов. - С.6-7.