

01;10;11
©1995

НЕАДДИТИВНОСТЬ СТЕПЕНИ ОТРИЦАТЕЛЬНОЙ ИОНИЗАЦИИ ПРИ РАССЕЯНИИ МОЛЕКУЛ

И. Войцеховский, М. Медведева, В. Ферлегер

При рассеянии молекулярных ионов с энергией $E_0 \approx 1$ кэВ поверхностью большинство их диссоциирует при первом же столкновении с атомом поверхности [1]. Далее атомы, входившие в состав молекулы, взаимодействуют с веществом независимо. Однако некоторые характеристики вторично-эмиссионных явлений при определенных условиях являются неаддитивными величинами [1-7]. (Неаддитивность некоторой характеристики I эмиссионного процесса, инициированного бомбардировкой ионами A_n^+ (n — число атомов в молекулярном ионе) означает, что величины I в пересчете на один атом A в случае бомбардировки пучком моноатомных (A_1^+) и молекулярных ионов (A_n^+) различны).

Одна из причин неаддитивности, характерная для скользящей бомбардировки или для рассеяния тяжелых частиц, связана с тем, что атомы, входившие в состав одной молекулы, после соударения с поверхностью с некоторой вероятностью претерпевают на отлете упругие и неупругие столкновения между собой, что аналогично процессам взаимодействия после столкновения атомов в газовой фазе [8].

В настоящей работе оценивается степень неаддитивности вероятности отрицательной ионизации атомов водорода при скользящем рассеянии ионов H_2^+ на металле за счет взаимодействия $H \rightarrow H^+$, либо $H \rightarrow H$, образованных при диссоциации одного иона H_2^+ в приповерхностной области.

Такое взаимодействие приводит к возникновению следующих дополнительных (по сравнению со случаем моноатомной бомбардировки, где действует только электронный обмен) каналов образования и разрушения отрицательных ионов:

а. Квазирезонансный переход электрона из атома, который находится вблизи поверхности металла ($s \leq 5\text{Å}$, этот атом из-за экранировки заряда ядра электронами проводимости приповерхностной области имеет только один электронный уровень с энергией ионизации $J \approx 1$ эВ [9]) на уровень электронного сродства атома, находящегося на расстоянии $s \geq 5 - 10\text{Å}$.

б. Разрушение отрицательного иона, образованного путем электронного обмена с поверхностью при столкновении с атомом или ионом.

в. Отрицательная ионизация атома при столкновении с другим рассеянным атомом за счет неадиабатического перехода.

Процесс *в* требует сближения атомов на расстояния порядка атомных, поэтому его сечение существенно меньше, чем процессов *а* и *б* [8].

Оценим величину Q^- — вероятность образования иона H^- при скользящем рассеянии иона H_2^+ , учитывая как электронный обмен отлетающего атома с поверхностью металла, так и вклад процессов *а* и *б*.

Величину Q^- , усредненную по траекториям атомов молекулы, можно записать в виде

$$Q^- = \int q^-(v_1, v_2, \Delta t, \Delta \chi) F(v_1, v_2, \Delta t, \Delta \chi) d\xi, \quad (1)$$

где ξ — совокупность переменных интегрирования, указанных в скобках; v_1 и v_2 — скорости атомов в момент вылета, Δt — промежуток времени между пересечениями поверхности первым и вторым атомами молекулы; $\Delta \chi$ — расстояние между ними на поверхности; $q^-(\xi)$ — вероятность эмиссии иона H^- для двух данных конкретных траекторий атомов; $F(\xi)$ — функция распределения, описывающая относительную вероятность таких траекторий.

Используя для коэффициента рассеяния атома $R(v, \chi)$ выражение, полученное в [10], и учитывая, что рассеяние атомов происходит независимо, получим: $F(\xi) = R(v_1, \chi_1) \times R(v_2, \chi_2)$.

Величина $q^-(\xi)$ есть решение кинетического уравнения

$$v_{\perp} \frac{dq^-}{ds} = -(\omega_c^s + \omega_c^a) q^- + (1 - q^-) (\omega_1^s + \omega_1^a) \quad (2)$$

при начальном условии $q^-(s = s_a) = 0$ (s_a — расстояние атома от поверхности, на котором появляется уровень сродства [11]), v_{\perp} — нормальная составляющая скорости атома, отлетающего от поверхности, ω_c^a и ω_1^a — частоты процессов *а* и *б* соответственно, ω_c^s и ω_1^s — частоты процессов электронного обмена с поверхностью, захвата электрона на уровень сродства и потери электрона с этого уровня соответственно.

Для расчета частоты ω_c^a атом вблизи поверхности, как и в работе [7], моделировался атомом, кулоновский потенциал

ядра которого заменен потенциалом Хюльтена:

$$V(r) = -V_0 \frac{\exp(-ra^{-1})}{1 - \exp(-ra^{-1})}, \quad (3)$$

где r — расстояние между электроном и ядром. Постоянная a имеет смысл радиуса экранирования $a = a(s)$, $V_0 = a^{-1}$ (а. е.).

Короткодействующий потенциал, определяющий систему уровней отрицательного иона, также аппроксимируется потенциалом Хюльтена с радиусом экранировки, дающим известное значение энергии средства H^- .

Учитывая лишь надбарьерные переходы, частоту ω_c^a запишем в виде

$$\omega_c^a \approx \begin{cases} \frac{u}{R+r} \left[1 + \left[\frac{S_2 - s^-}{\Delta s} \right]^2 \right]^{-1} & R \leq R_k, \\ 0 & R > R_k \end{cases}, \quad (4)$$

где u — скорость электрона на уровне средства, r — сумма радиусов атомов, Δs определяется шириной уровня, характеризующей электронный обмен с поверхностью, s^- — расстояние от поверхности, на котором энергия ионизации атома равна энергии средства, $R_k \approx 5.4 \text{ \AA}$ — расстояние, на котором исчезает потенциальный барьер между атомом и ионом.

Частота процесса b ω_l^a аппроксимируется выражением [12]:

$$\omega_l^a(R) = \begin{cases} \frac{\sqrt{2}}{3} \frac{\alpha^2}{(1-q)^2} q^{\frac{3}{2}} & R \leq R_1, \\ 0 & R > R_1 \end{cases}, \quad (5)$$

где $q = 1 - R \cdot R_1^{-1}$, $\alpha^{-1} = R_1 \approx 6$ а. е.

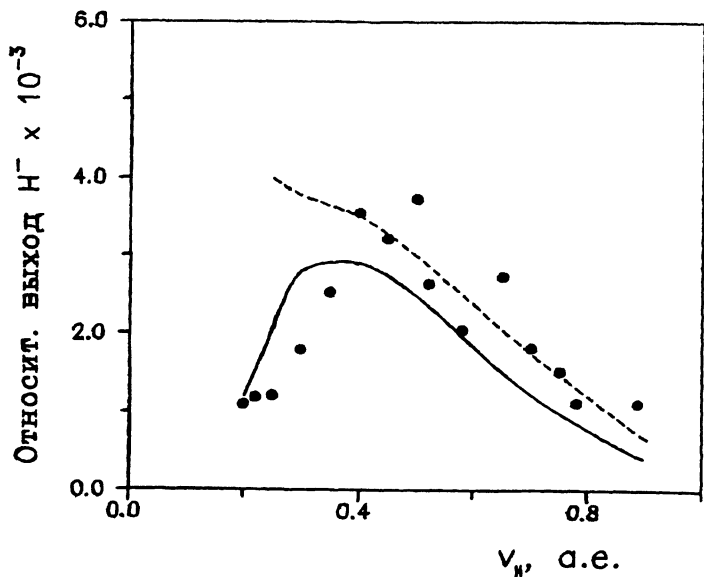
Зависимость $\omega_{c,l}^s$ от расстояния s до поверхности выбиралась в виде

$$\omega_{c,l}^s = A_{c,l} \exp(-\alpha_{c,l}s), \quad (6)$$

где A и α — константы, зависящие от типа процесса, а также от параллельной (v_{\parallel}) и нормальной (v_{\perp}) составляющих скорости отлетающей частицы [11].

Степень неаддитивности эмиссии ионов H^- оценивалась путем расчета зависимости выхода этих ионов от v_{\parallel} .

На рисунке показаны зависимости относительного выхода ионов H^- от v_{\parallel} , измеренные экспериментально для $v_{\perp} = 0.02$ а. е. [13], рассчитанные в работе [11] для случая



Зависимости относительного выхода ионов H^- от параллельной составляющей скорости первичного пучка. Точки (данные эксперимента [13]) и сплошная линия (расчет в работе [11]) — для рассеяния атомов H , штриховая линия — расчет по формулам (1, 2, 4, 5) для рассеяния молекул H_2^+ .

рассеяния атомов H и полученные в данной работе для рассеяния ионов H_2^+ по формулам (1, 2, 4, 5). В случае молекулярного пучка за счет вклада процессов a и b имеет место существенное увеличение выхода ионов H^- . При уменьшении $v_{||}$ уменьшается время взаимодействия атома с поверхностью. В результате уменьшается расстояние между точками пересечения поверхности атомами, что приводит к увеличению вклада межатомных электронных процессов в эмиссию H^- .

Если ионами H_2^+ бомбить диэлектрик, то из-за низкой электронной плотности у поверхности положение уровней атомов, образованных при диссоциации H_2^+ , не будет существенно отличаться от положения уровней свободных атомов. При этих условиях процесс a невозможен, а разрушение ионов H^- в процессе b приведет к уменьшению выхода последних по сравнению с атомарной бомбардировкой. Следовательно, неаддитивность в случае диэлектрика носит инверсный характер.

Отметим также, что различие в выходе отрицательных ионов при атомарной и молекулярной бомбардиров-

ках должно особенно сильно проявляться при рассеянии медленных ($E_0 \leq 1$ кэВ) тяжелых частиц на большие углы. В этом случае взаимодействие атомов молекулы после рассеяния происходит столь быстро, что атомы не успевают разойтись, малые параметры столкновения становятся достижимы, вследствие чего вклад процесса в резко увеличивается. Процесс в пороговый, что должно проявляться в резком росте выхода отрицательных ионов в зависимости от начальной энергии молекул [14].

Данная работа была частично поддержана Международным научным фондом, грант N RU 2000.

Список литературы

- [1] Heiland W., Beitath U., Taglauer E. // Phys. Rev. 1979. V. 19. P. 1677-1682.
- [2] Willerding B., Heiland W., Snowdon K. // Phys. Rev. Lett. 1984. V. 53. P. 2031-2034.
- [3] Евстигнеев С.А., Зюонков С., Чичеров В. // ЖЭТФ. 1982. Т. 82. С. 1091-1102.
- [4] Christensen C.H., Jensen J.O., Lefmann K. // Nucl. Instrum. and Meth. 1986. V. B13. P. 230-241.
- [5] Бутенский И.С., Гуленко Я.С., Парилус Э.С. // ЖЭТФ. 1988. Т. 94. С. 66-75.
- [6] Bitensky I.S., Parilis E.S., Wojciechowski I.A. // Nucl. Instrum. and Meth. 1993. V. B73. P. 333-340.
- [7] Baltakov A.S., Ferleger V.Kh., Medvedeva M.V., Wojciechowski I.A. // Nucl. Instrum. and Meth. 1994. V. B94. P. 59-65.
- [8] Никитин Е.Е., Смирнов Б.М. Атомно-молекулярные процессы в задачах с решениями. Москва, 1988. 303 с.
- [9] Трубников Б.А., Явлинский Ю.И. // ЖЭТФ. 1965. Т. 48. С. 1618-1619.
- [10] Ремизович В., Рязанов М., Тулинин И. // ДАН СССР. 1980. Т. 251. С. 848-851.
- [11] Borisov A. // Thesis. Orsay. 1992. P. 226.
- [12] Демков Ю.Н., Друкарев Г.Ф., Кучинский В.В. // ЖЭТФ. 1970. Т. 58. С. 944-951.
- [13] Wyputta F., Zimny R., Winter H. // Nucl. Instrum. and Meth. 1991. V. B58. P. 379-385.
- [14] Reijnen P.H.F., Kleyn A.W., Imke U., Snowdon K.J. // Nucl. Instrum. and Meth. 1988. V. B33. P. 451-454.

Институт электроники
им. У.А. Арифова
Ташкент, Узбекистан

Поступило в Редакцию
28 октября 1994 г.