

$$\beta = \frac{q^2}{k_B T} \left[\frac{N_T}{8\pi^2 (\epsilon'_k)^2 \epsilon_{kq}} \right]^{1/4}.$$

Здесь q — заряд электрона; k_B — постоянная Больцмана; T — температура; ϵ_k и ϵ'_k — статическая и высокочастотная диэлектрическая проницаемости кристалла; N_T — концентрация глубоких центров, определяющих пространственный заряд обедненной области. Экспериментальные значения β лежат в интервале от 4.8 до 6.4 В^{-1/4}, что достаточно хорошо согласуется с оценкой для кристаллов $\text{Bi}_{12}\text{SiO}_{20}$ $\beta=5$ В^{-1/4}, полученной при следующих значениях параметров: $N_T=7.5 \cdot 10^{24}$ м⁻³ [2], $\epsilon'_k=6\epsilon_0$ [5], $\epsilon_k=56\epsilon_0$ (ϵ_0 — диэлектрическая проницаемость вакуума).

Интересный результат дала обработка ВАХ, снятых при различных освещенностях образцов. Оказалось, что J_{Σ} растет с увеличением интенсивности падающего света. При этом наблюдается близкая к линейной зависимость J_{Σ} от интенсивности при малых освещенностях ($\ll 10^{-3}$ Вт/см²), переходящая в сублинейную по мере роста интенсивности света (рис. 2, 6). Причину данного эффекта следует, по-видимому, искать в зависимости высоты барьера контакта от освещения, возникающей вследствие перезарядки поверхностных состояний, определяющих величину поверхностного изгиба зон в кристаллах силленитов [6]. Отметим здесь, что с точки зрения работы ПВМС ПРИЗ важным является вопрос о скорости перезарядки поверхностных состояний, который пока остается открытым.

В заключение отметим важность полученных результатов для дальнейшей оптимизации параметров ПВМС ПРИЗ, конечно, при учете возможных поправок на существенную нестационарность процессов переноса заряда в модуляторе в обычном рабочем режиме.

Список литературы

- [1] Родерик Э. Х. Контакты металл—полупроводник. М.: Радио и связь, 1982.
- [2] Грачев А. И. // ФТТ. 1984. Т. 26. Вып. 1. С. 227—232.
- [3] Ильинский А. В., Астратов В. Н. // ФТТ. 1982. Т. 24. Вып. 1. С. 108—115.
- [4] Гудаев О. А., Гусев В. А., Детинченко В. А. и др. // Автометрия. 1981. № 5. С. 38—47.
- [5] Реза А. А., Сенулене Д. Б., Беляев В. А., Леонов Е. И. // Письма в ЖТФ. 1979. Т. 5. Вып. 6. С. 465—468.
- [6] Грачев А. И., Красинькова М. В. // ЖТФ. 1983. Т. 53. Вып. 11. С. 2293—2295.

Физико-технический институт
им. А. Ф. Иоффе АН СССР
Ленинград

Поступило в Редакцию
15 июля 1987 г.
В окончательной редакции
10 июня 1988 г.

О РЕГИСТРАЦИИ РАССЕЯННЫХ МОЛЕКУЛЯРНЫХ ИОНОВ

В. Н. Кирикашвили, О. Б. Фирсов

Насколько нам известно, в [1] впервые наблюдались молекулярные ионы H_2^+ в рассеянном пучке H_2^+ от поверхности на угол $\pi/2$ при энергии 30 кэВ. Относительное количество их было, конечно, много меньше 1 % (по отношению к H^+). В дальнейшем более подробное исследование проводилось в [2] по рассеянию, в котором исследовалась зависимость относительного количества неразвалившихся молекулярных ионов при рассеянии от поверхности кристалла, при скользящих углах падения и различных ориентациях кристалла. Теоретический расчет этого эффекта был проведен в [3] и более детально в [4].

В этих работах рассматривалось рассеяние молекулярных ионов типа A_2^+ на атомах при киловольтных энергиях, считая, что атомы, на которых происходит рассеяние, закреплены (бесконечная масса), а для диссоциации молекулярного иона выполняется условие

$$E_{\text{от}} \geq E_{\text{дис}} \quad (1)$$

Будет показано, что на самом деле условие (1) недостаточно для регистрации всех диссоциированных молекулярных ионов, поскольку нужно учесть, что молекулярный ион при-

обретает вращение, а при малых углах рассеяния почти вся приобретенная энергия относительного движения атомов заключается во вращении

$$E_{\perp \text{ от}} = \frac{E\Delta^2(1-\alpha^2)}{2}, \quad E_{\parallel \text{ от}} = \frac{E\Delta^2\alpha^2}{2}, \quad \frac{E_{\perp \text{ от}}}{E_{\parallel \text{ от}}} = \frac{1-\alpha^2}{\alpha^2},$$

где $E = P_0^2/2m$ — энергия одного атома в молекулярном ионе, α — угол рассеяния одного атома, Δ — разница углов рассеяния атомов молекулярного иона.

Для регистрации всех распавшихся молекулярных ионов приобретенная энергия относительного движения должна быть больше энергии диссоциации на величину или на часть величины «центробежного барьера». Дело в том, что в зависимости от полученной энергии время прохождения молекулярным ионом «центробежного барьера» разное. Поэтому, может оказаться, что это время τ больше времени t для пролета иона до регистрации ($t \sim 50 \text{ см}/5 \times 10^7 \text{ см/с} = 10^{-6} \text{ с}$), в этом случае прибор будет регистрировать эти молекулярные ионы как неразвалившиеся. В статье использованы атомные единицы измерения.

Чтобы оценить высоту «центробежного барьера», аппроксимируем потенциал взаимодействия атомов в молекулярном ионе в виде

$$U = A \left(\frac{R_0}{R} \right)^{2n+2} - B \left(\frac{R_0}{R} \right)^{n+2}, \quad (2)$$

тогда эффективный потенциал имеет вид

$$V = A \left(\frac{R_0}{R} \right)^{2n+2} - B \left(\frac{R_0}{R} \right)^{n+2} + E_{\text{вр}} \left(\frac{R_0}{R} \right)^2$$

(такой вид потенциала взят для удобства: при дифференцировании по R^{-2} получается квадратичное выражение). Здесь R_0 — равновесное расстояние между атомами в молекулярном ионе, $E_{\text{вр}}$ — вращательная энергия, A , B и n — константы, которые можно вычислить из следующих условий: 1) $U'(R) = 0$ при $R = R_0$, 2) $U(R) = U_{\text{мин}} = -E_{\text{дис}}$ при $R = R_0$, 3) $(U''(R)/\mu)^{1/2} = \omega$ при $R = R_0$, где $E_{\text{дис}}$, μ , ω — известные энергии диссоциации, приведенная масса и частота колебания молекулярного иона.

С помощью первых двух условий находим коэффициенты A и B

$$A = \frac{n+2}{n} E_{\text{дис}}, \quad B = \frac{2(n+1)}{n} E_{\text{дис}}$$

а третье условие дает возможность вычислить n

$$n = -1.5 + 0.5 \left(1 + \frac{2\omega^2 R_0^2 \mu}{E_{\text{дис}}} \right)^{1/2}.$$

Конкретно для молекулярного иона азота N_2^+ получили следующие значения коэффициентов: $A = 0.75$, $B = 1.07$, $n = 1.5$.

Надо отметить, что потенциальная кривая для N_2^+ , построенная с помощью выражения (2), хорошо совпадает с кривой, приведенной в справочнике [6].

В зависимости от того, какая доля энергии, передаваемая молекулярному иону в процессе столкновения, переходит во вращение последнего, кривые эффективного потенциала будут иметь разные максимумы и минимумы. Если молекулярному иону передается энергия E , то энергию, переходящую во вращение, можно записывать в виде $E_{\text{вр}} = \eta E$, где $0 \leq \eta \leq 1$. Чем больше η (т. е. чем большая энергия переходит во вращение), тем больше высота «потенциального барьера», вместе с этим возрастает время жизни молекулярного иона. Высота «потенциального барьера» равняется

$$V_{\text{max}} = E_{\text{дис}} \left[\frac{n}{n+1} \eta K - \frac{1}{2} + \frac{1}{2} \left(1 - \frac{4n\eta K}{(n+1)(n+2)} \right)^{1/2} \right] \times \\ \times \left[\frac{1}{2} - \frac{1}{2} \left(1 - \frac{4n\eta K}{(n+1)(n+2)} \right)^{1/2} \right]^{2/n}, \quad K = \frac{E}{E_{\text{дис}}}.$$

Вычислим ту минимальную энергию, которую должен получить молекулярный ион, чтобы он диссоциировал сразу в зависимости от того, какая доля энергии переходит во вращение. Для этого надо решить уравнение

$$-E_{\text{двс}} + E = V_{\text{max}},$$

$$K - 1 = \left[\frac{n}{n+1} \eta K - \frac{1}{2} + \frac{1}{2} \left(1 - \frac{4n\eta K}{(n+1)(n+2)} \right)^{1/2} \right] \times$$

$$\times \left[\frac{1}{2} - \frac{1}{2} \left(1 - \frac{4n\eta K}{(n+1)(n+2)} \right)^{1/2} \right]^{2/n}. \quad (3)$$

В этом уравнении для конкретного молекулярного иона известно n ; меняя η от 0 до 1, получаем значение K (рис. 1) и вычисляем нужную энергию

$$E = KE_{\text{двс}}.$$

В случае, когда вся передаваемая энергия переходит во вращение $\eta=1$ (а это встречается при рассеянии на малые углы), из формулы (3) для N_2^+ получаем $K=1.06$. Значит, минимальная передаваемая энергия, которая необходима для распада молекулярного иона N_2^+ сразу, равняется $E=1.06 \cdot 0.32 \approx 0.339$ ($E_{\text{двс}}=0.32$), а высота «потенциального барьера» равна 0.019 (рис. 2).

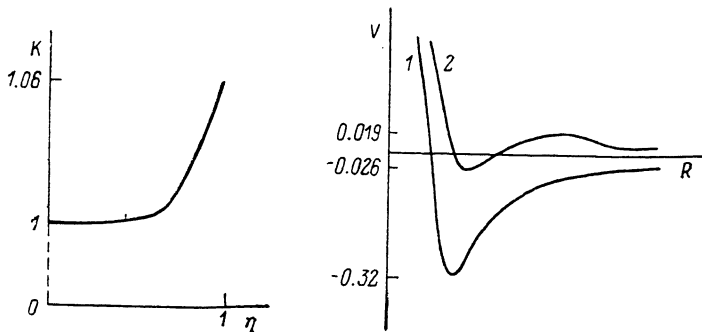


Рис. 1. График зависимости $K=f(\eta)$ для N_2^+ .

Рис. 2. Потенциальная энергия основного состояния N_2^+ (1) и при $\eta=1$ (2).

Время жизни молекулярного иона вычисляется по формуле

$$\tau = \frac{1}{\omega D}, \quad (4)$$

где ω — частота колебания, $D = e^{-\pi \sqrt{-\mu V_{\text{max}}''} x_0^2}$ — коэффициент прохождения «потенциального барьера», μ — приведенная масса, а x_0 находим из уравнения

$$E = V_{\text{max}} + \frac{1}{2} V_{\text{max}}'' x_0^2. \quad (5)$$

Зная, что время пролета после столкновения до регистрации $\sim 10^{-6}$ с, можно решить обратную задачу и с помощью формул (4), (5) найти ту энергию, при которой за это время молекулярный ион пройдет «потенциальный барьер» и развалится, а прибор успеет зарегистрировать уже диссоциированный молекулярный ион.

Для N_2^+ при $\eta=1$ получалось, что эта энергия равна 0.017, т. е. в этом случае для того, чтобы прибор регистрировал диссоциированный молекулярный ион N_2^+ , он должен получить энергию $\geq E_{\text{двс}} + 0.017 = 0.337$. Тогда время жизни молекулярного иона N_2^+ $\tau \leq 10^{-6}$ с. Поэтому для вычисления вероятности рассеяния молекулярного иона N_2^+ без диссоциации в формуле, приведенной в [4],

$$P_0 = \frac{3.05\pi}{4} \frac{Z_1 Z_2}{\sqrt{Z_1^2 l^3 + Z_2^2 l^3}} \frac{E_{\text{двс}}}{E^2 l^2 \theta^3},$$

где E — энергия одного атома иона, l — расстояние между атомами иона, θ — угол рассеяния, Z_1 и Z_2 — заряды атома иона и атома поверхности соответственно, вместо энергии диссоциации N_2^+ $E_{\text{двс}}=0.32$ надо учесть энергию, равную 0.337. Получается, что в эксперименте [4] регистрируется больше недиссоциированных молекулярных ионов (на 5.3%), чем должно, если увеличить расстояние до регистратора ионов.

- [1] Панин Б. В. // ЖЭТФ. 1962. Т. 42. С. 313—323.
 [2] Молчанов В. А., Сошка В. // ЖТФ. 1965. Т. 35. Вып. 3. С. 963.
 [3] Витенский И. С., Парилис Э. С. // ЖТФ. 1981. Т. 51. Вып. 9. С. 1798—1803.
 [4] Balashova L. L., Dodonov A. J., Firsov O. B. et al. // Rad. Eff. 1983. Vol. 77. P. 67—77.
 [5] Радциг А. А., Смирнов В. М. Справочник по атомной и молекулярной физике. М.: Атомиздат, 1980.

Поступило в Редакцию
23 мая 1988 г.

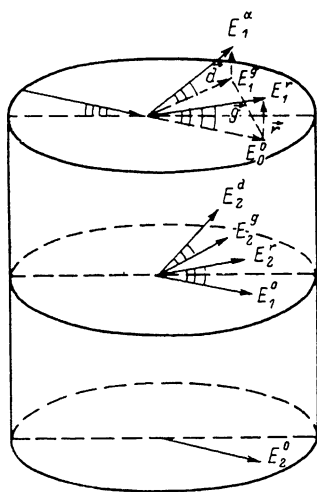
01: 07

Журнал технической физики, т. 59, в. 11, 1989

О ДИФРАКЦИИ РЕНТГЕНОВСКИХ ЛУЧЕЙ НА МНОГОСЛОЙНОЙ ПЛЕНОЧНОЙ СТРУКТУРЕ В СКОЛЬЗЯЩЕЙ ГЕОМЕТРИИ

В. И. Пунегов, А. В. Ладанов

Впервые схема рентгеновской дифракции на кристалле в скользящей геометрии (СГ) теоретически рассмотрена в работе [1]. Автором получены решения для амплитуд зеркально отраженной и дифрагированной волн, а также указано на существование двух критических углов скольжения, при которых интенсивность зеркально отраженных волн резко изменяется. Экспериментально данная схема дифракции впервые была реализована в работе [2] для исследования тонких монокристаллических пленок Al, полученных молекулярно-лучевой эпитаксией на подложке GaAs.



Дальнейшее развитие теории дифракции в СГ отражено в работе [3] и обзорах [4, 5]. В связи с широким применением в микро- и оптоэлектронике многослойных кристаллов (гетероструктур, сверхрешеток, материалов в пленочном исполнении и т. д.) стали интенсивно использоваться новые рентгенодифракционные методы их исследования, в частности дифракция в СГ [6]. В настоящее время теория дифракции

Схема дифракции в скользящей геометрии на бикристалле.

$E_1^{\alpha}, E_1^{\beta}, E_1^{\gamma}, E_1^{\delta}$ ($i = 1, 2$) — амплитуды падающей, зеркально отраженной, дифрагированной по Лауэ, зеркально отраженной дифрагированной волн.

в СГ развита только для идеального кристалла, кристалла с аморфной и кристаллической пленкой [3-5, 7].

Цель данной работы — теоретически рассмотреть дифракцию в СГ применительно к многослойным кристаллам, построить алгоритм расчета амплитудных коэффициентов отражения (АКО) и прохождения (АКП) многослойной системы для сопоставления с экспериментальными данными.

Рассмотрим наиболее общий подход к проблеме, полагая, что коэффициенты отражения и прохождения рентгеновских лучей для любого отдельно взятого, например n -го, слоя известны [3-5]. $\rho_n^{\alpha}, r_n^{\beta}, g$ — АКО в направлении зеркально отраженной дифрагированной (ЗОД) волны, зеркально отраженной (ЗО) волны, дифрагированной по Лауэ (D) волны соответственно; $\rho_n^{-r}, -d, -g$ — АКО для векторов рассеяния $(-r), (-d)$ и $(-g)$; $\tau_n^r, \tau_n^{-r}, -d, -g$ — АКП в направлении падающей, ЗО, ЗОД, D -волн соответственно. Используя формализм дарвиновского суммирования волн [8], рассмотрим дифракцию в СГ на бикристалле, при этом $n = 1, 2$ (см. рисунок).