

01

Резонансное торможение нейтрального атомного пучка ближними модами флуктуационного электромагнитного поля поверхности

© Г.В. Дедков

Кабардино-Балкарский государственный университет, Нальчик
E-mail: gv_dedkov@mail.ru

Поступило в Редакцию 6 сентября 2004 г.

Проведены аналитические и численные расчеты резонансных тормозных потерь нейтральных пучков атомов цезия с энергией 200–400 keV, движущихся вблизи гладкой поверхности твердого тела, поддерживающей инфракрасные поверхностные моды. Рассмотрены чистые поверхности ионных диэлектриков и легированных полупроводников, а также пленки этих веществ на металлических подложках. Показано, что для пленок величина тормозных потерь приблизительно вдвое выше. Предсказывается также экспоненциальное увеличение тормозных потерь с увеличением температуры поверхности.

Оценка величины тормозных потерь нейтральных атомных частиц, движущихся в вакууме вблизи гладкой поверхности твердого тела, принципиально важна для приложений, связанных с созданием перспективных (нанопучковых) систем транспортировки и фокусировки заряженных и нейтральных частиц, необходимых для успешного развития нанотехнологии [1,2].

В наших недавних работах [3–5] была развита общая теория флуктуационно-электромагнитного (бесконтактного) взаимодействия движущихся нейтральных частиц с поверхностью поляризующейся среды (твердого тела). В частности, из полученных результатов вытекает возможность резонансного взаимодействия с поверхностными модами флуктуационного электромагнитного поля в области нанометровых расстояний частиц от поверхности. Если характерная частота поверхностной моды (плазмона, фонон-поляритона и т.д.) равна ω_s , а частота

возбуждения частицы (атома) ω_{0n} , то условием резонанса является

$$|\omega_s - \omega_{0n}| = \mathbf{kV}, \quad (1)$$

где \mathbf{k} — волновой вектор поверхностной моды, \mathbf{V} — вектор скорости частицы (предполагается, что скорость параллельна поверхности). При отличных от нуля температурах поверхности ($T \neq 0$) резонансное взаимодействие характеризуется также условиями $\hbar\omega_s/k_B T \sim 1$, $\hbar\omega_{0n}/k_B T \sim 1$ или тем и другим одновременно, а при $T \rightarrow 0$ взаимодействие экспоненциально мало. Заметим, что в нашей более ранней работе [6] тепловые факторы учитывались недостаточно корректно, поэтому температурные ограничения отсутствовали. Для нейтральных атомов в широком температурном интервале ($T < 10^3$ К) всегда выполняется условие $\hbar\omega_{0n}/k_B T \gg 1$, поскольку частоты электронных переходов из основных состояний велики по сравнению с частотой Вина, $\omega_w = k_B T/\hbar$. Условие же $\hbar\omega_s/k_B T \sim 1$, напротив, может выполняться для многих материалов поверхности: полупроводников, диэлектриков и низкоразмерных систем, обладающих инфракрасным поглощением. С учетом сказанного из общих результатов [3–5] следует, что резонансное взаимодействие движущегося атома с поверхностными модами электромагнитного поля всегда носит тормозной характер. Случай $\hbar\omega_{0n}/k_B T \sim 1$ может реализоваться для нейтральной наночастицы, кластера или сильно нагретой сложной молекулы, причем при $\omega_{0n} < \omega_s$ тангенциальные силы имеют положительный знак, т.е. являются ускоряющими.

Поскольку практическое обнаружение соответствующих эффектов при релятивистском движении в настоящее время представляется трудноразрешимой задачей, то ограничимся нерелятивистским случаем $V/c \ll 1$ (c — скорость света) и рассмотрим торможение нейтрального атомного пучка вблизи поверхности. При этом условии из (1) следует $k \gg |\omega_{0n} - \omega_s|/c$, что эквивалентно неравенствам $k \gg \omega_{0n}/c$ и $k \gg \omega_s/c$, поскольку $\omega_{0n} \gg \omega_s$. Полученные условия означают, что в данной задаче можно использовать нерелятивистские формулы [3,4], полностью пренебрегая вкладом эффектов запаздывания.

Рассмотрим несколько типов поверхностей, характеризующихся низкочастотными (инфракрасными) электромагнитными модами: 1) ионный диэлектрик; 2) легированный полупроводник; 3) пленка диэлектрика (полупроводника) на металле. В первых двух случаях

диэлектрические функции объемных материалов запишем в виде

$$\varepsilon(\omega) = \varepsilon_\infty + \frac{\omega_T^2(\varepsilon_0 - \varepsilon_\infty)}{\omega_T^2 - \omega^2 - i\gamma\omega}, \quad (2a)$$

$$\varepsilon(\omega) = \varepsilon_\infty \left(1 - \frac{\omega_p^2}{\omega^2 + i\omega/\tau} \right), \quad (2б)$$

где использованы стандартные обозначения: ω_T и ω_p — частота поперечного оптического фонона и плазменная частота, γ и τ — фактор затухания и время релаксации носителей заряда, ε_0 и ε_∞ — статическая и высокочастотная диэлектрическая проницаемость. Для расчета тормозной способности dE/dx нейтрального атома, в соответствии с [3–5], необходимо иметь выражения для мнимой части функции диэлектрического отклика поверхности, $\Delta''(\omega) = \text{Im} \left(\frac{\varepsilon(\omega) - 1}{\varepsilon(\omega) + 1} \right)$, и атомной поляризуемости $\alpha''(\omega)$. При наличии резонансных пиков поглощения выражение для $\Delta''(\omega)$ с учетом (2a) и (2б) приводится к виду

$$\Delta''(\omega) = \frac{\pi\omega_s}{2} f(\varepsilon_0, \varepsilon_\infty) \delta(\omega - \omega_s), \quad (3)$$

причем в случаях (2a) и (2б) соответственно

$$f(\varepsilon_0, \varepsilon_\infty) = \frac{\varepsilon_0 - \varepsilon_\infty}{(\varepsilon_0 + 1)(\varepsilon_\infty + 1)}, \quad \omega_s = \omega_T \sqrt{\frac{\varepsilon_0 + 1}{\varepsilon_\infty + 1}}$$

и

$$f(\varepsilon_0, \varepsilon_\infty) = \frac{1}{(\varepsilon_\infty + 1)}, \quad \omega_s = \omega_T \sqrt{\frac{\varepsilon_\infty}{\varepsilon_\infty + 1}}.$$

Для резонансного вклада в $\alpha''(\omega)$ воспользуемся известной кванто-механической формулой

$$\alpha''(\omega) = \frac{\pi e^2 f_{0n}}{2m\omega_{0n}} \delta(\omega - \omega_{0n}), \quad (4)$$

где ω_{0n} — частота атомного перехода из состояния (0) в состояние (n), f_{0n} — сила осциллятора, e и m — заряд и масса электрона. Далее, подставляя (3), (4) в общую формулу для тангенциальной флуктуационно-электромагнитной силы (см., например, (60) в [1]), получим

$$\frac{dE}{dx} = -\frac{1}{32} \frac{e^2 \hbar}{m} \frac{\omega_s}{\omega_{0n}} \frac{f_{0n} f(\varepsilon_0, \varepsilon_\infty)}{z_0^4 \Delta\omega} \left[\exp\left(\frac{\hbar\omega_s}{k_B T}\right) - 1 \right]^{-1} J(2\Delta\omega z_0/V), \quad (5)$$

$$J(x) = x^4(K_0(x) + K_2(x)), \quad (6)$$

где $K_{0,2}(x)$ — функция Макдональда, z_0 — расстояние атома от поверхности, $\Delta\omega = |\omega_s - \omega_{0n}|$. Функция $J(x)$ достигает максимума при $x = 3.62$, поэтому скорость и расстояние частицы от поверхности связаны резонансным соотношением (ср. с (1)) $\Delta\omega z_0/V = 1.81$, причем $J(3.62) = 7.86$. Если учитывается одновременно несколько атомных переходов, то обобщение формулы (5) очевидно и должно включать суммирование соответствующих вкладов.

В случае пленки диэлектрика с толщиной d на металлической подложке, как было показано в [7], величина тормозных сил вязкого типа (пропорциональных скорости) может быть заметно выше, чем для „чистых“ поверхностей, поскольку на границах пленка–подложка возникают две оптические поверхностные моды фонон-поляритонного типа. Аналогичные моды (плазмон-поляритоны) появляются и на границах полупроводник–металл. Эти поверхностные волны характеризуются пространственной дисперсией, поэтому вместо (3) будем иметь (в данном случае $\omega_s = \omega_T$ или $\omega_s = \omega_P$)

$$\Delta''(\omega) = \omega_s A(kd) \delta(\omega - \omega_s x(kd)), \quad (7)$$

где безразмерные функции $A(kd)$ и $x(kd)$ зависят также от параметров диэлектрических функций соответствующих материалов. Для случая (2а) они приведены в [7], а для (2б) находятся аналогично. Для обеих мод функция $x(kd)$ изменяется в небольших пределах вблизи единицы. Что касается функции $A(kd)$, то она экспоненциально убывает с ростом волнового числа k . Результирующая формула для dE/dx получается после подстановки (4) и (7) в формулу (60) работы [3]:

$$\frac{dE}{dx} = -\frac{1}{8\pi} \frac{e^2 \hbar}{m} \frac{\omega_s}{\omega_{0n}} \frac{f_{0n}}{z_0^4 \Delta\omega} \tilde{J}(2z_0 \Delta\omega/V, d\Delta\omega/V, \omega_s/\omega_w), \quad (8)$$

$$\tilde{J}(a, b, c) = a^4 \int_1^{\kappa/b} \frac{t^2 A(bt) \exp(-at)}{(t^2 - 1)^{0.5} [\exp(cx(bt)) - 1]} dt, \quad (9)$$

где κ — численный параметр порядка единицы ($\kappa > b$), соответствующий максимально возможной величине волнового числа k_m на дисперсионной ветви поверхностных возбуждений, $k_m = \kappa/d$. Данная точка

является точкой разветвления дисперсионной зависимости на высокочастотную и низкочастотную моды. Численные расчеты показывают, что функция $J(a, b, c)$ по переменной $a = 2z_0\Delta\omega/V$ характеризуется максимумом при $a = 3 \div 4$, точное положение которого зависит от величины переменной $b = d\Delta\omega/V$, причем верхняя граница изменения b не превосходит κ . По переменной b функция $J(a, b, c)$ также имеет максимум, который достигается при $b/a \approx 1.5 \div 2$, а зависимость от c , как видно из (9), является экспоненциально убывающей. Можно показать, что в пределе бесконечно малого затухания ($\gamma \rightarrow 0$ или $\tau \rightarrow \infty$ в формулах (2а) и (2б) соответственно) остается только высокочастотная поверхностная мода. При конечной величине затухания с возрастанием γ точка ветвления дисперсионной зависимости смещается в сторону меньших волновых векторов, что приводит к некоторому уменьшению параметра κ и общей величины интеграла (9).

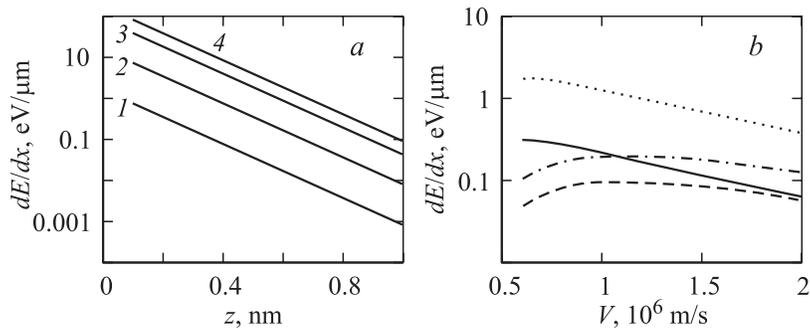
Из формул (5) и (8) видно, что величина тормозной способности больше для атомов с низкими значениями частот переходов ω_{0n} , поэтому для количественных оценок был взят пучок атомов цезия, у которого имеется дублет с частотами 1.39 и 1.46 eV [8]. В таблице приведены результаты расчета энергетических потерь атомов цезия, движущихся на расстоянии 0.5 nm от поверхности нескольких типичных материалов, поддерживающих инфракрасные поверхностные моды, причем для „объемных“ материалов вычисления проводились по формуле (5), а для пленок — по формуле (8) с учетом обеих ветвей дисперсионных зависимостей. Величины скоростей V и толщин пленок d оптимизировались (при заданной величине расстояния z_0) для получения максимально возможных значений тормозных потерь. Случаю „объемных“ материалов отвечает $d = \infty$. Значения частот переходов и сил осцилляторов атома Cs были взяты из справочника [8], а параметры диэлектрических функций (2а) и (2б) из работ, указанных в примечании к таблице. При сохранении оптимизированных значений z_0/V и d/V , но при других расстояниях от поверхности данные таблицы можно легко пересчитать с учетом зависимости $dE/dx \sim z_0^{-4}$. Заметим, что диапазону скоростей атомов цезия, приведенных в таблице, отвечают энергии 210–370 keV.

Как следует из таблицы, энергетические потери для пленок оказываются выше, чем для „чистых“ поверхностей соответствующих материалов с фактором, близким к 2. Это связано с наличием двух поверхностных мод, вносящих примерно одинаковый вклад в общий

Результаты расчета резонансных тормозных потерь атомов цезия над плоской поверхностью (a — объемный материал, b — пленка)

Материал	ε_0	ε_∞	$\omega_T, \omega_P,$ eV	$V,$ 10^6 m/s	$d,$ nm	T, K 177	$dE/dx, eV/\mu m$		
							300	600	900
SiC	a	9.8	6.7	0.098	∞	$6 \cdot 10^{-4}$	0.013	0.14	0.34
	b				0.66	0.3	0.001	0.026	0.27
MgO	a	9.8	2.95	0.049	∞	0.017	0.16	0.77	1.87
	b				0.59	0.39	0.033	0.307	1.78
GaAs	a	9.8	0.033	0.73	∞	0.09	0.27	0.77	1.3
	b				0.73	0.32	0.18	0.52	1.47
dopped									
Si	a	11.7	0.098	0.62	∞	0.005	0.063	0.42	0.9
	b				0.62	0.38	0.008	0.11	0.77

Примечание. Все значения dE/dx соответствуют расстоянию $z_0 = 0.5$ nm; параметры диэлектрических функций материалов взяты из работ: SiC — [9]; MgO — [10], GaAs — [11]; легированный кремний — [12]; величина γ для SiC ($\gamma/\omega_T = 0.006$) соответствует [9], в остальных случаях принималось $\gamma/\omega_T = 0.01$.



Тормозные потери атомов цезия над пленкой MgO на металлической подложке: a — 1 — $T = 177$ K, 2 — $T = 300$ K, 3 — $T = 600$ K, 4 — $T = 900$ K; во всех случаях $V = 0.6 \cdot 10^6$ m/s, $d = 0.39$ nm. b — сплошная кривая — $z_0 = 0.5$ nm, $T = 300$ K; точки — $z_0 = 0.5$ nm, $T = 600$ K; пунктир — $z_0 = 1$ nm, $T = 600$ K; штрих-пунктир — $z_0 = 1$ nm, $T = 900$ K; во всех случаях $d = 0.45$ nm.

результат. Кроме того, наблюдается значительное возрастание dE/dx с повышением температуры поверхности. С приемлемой погрешностью (10–20%) величину dE/dx для пленок можно найти по формуле (5), удваивая получаемый результат, надо лишь принять во внимание, что соответствующее значение будет отвечать оптимальной толщине пленки $d = 0.6 \div 0.8z_0$. При другой толщине результат будет меньше. На рисунке *a, b* показаны расчетные зависимости dE/dx от расстояния до поверхности и скорости для пленки MgO, для которой ожидаемые тормозные потери максимальны по сравнению с другими рассмотренными материалами.

Несмотря на достаточно малую величину тормозных потерь, их экспериментальное обнаружение представляется реальной задачей. Нейтральный пучок атомов цезия с энергией 200–400 keV может быть получен нейтрализацией ускоренного ионного пучка. Более детальное обсуждение экспериментальных условий с учетом анализа траекторий атомов вблизи поверхности см. в [6].

Список литературы

- [1] *Dedkov G.V.* // Nucl. Instrum. Methods. 1998. V. B143. P. 584.
- [2] *Dedkov G.V.* // Surf. Coat. Technol. 2002. V. 158–159. P. 75–80.
- [3] *Дедков Г.В., Кясов А.А.* // ФТТ. 2002. Т. 44. В. 10. С. 1729.
- [4] *Dedkov G.V., Kyasov A.A.* // Phys. Low-Dim. Struct. 2003. V. 1–2. P. 1.
- [5] *Дедков Г.В., Кясов А.А.* // ФТТ. 2003. Т. 45. В. 10. С. 1729.
- [6] *Dedkov G.V., Kyasov A.A.* // Nucl. Instrum. Methods. 2001. V. B183. N 3–4. P. 241.
- [7] *Дедков Г.В.* // Письма ЖТФ. 2004. Т. 30. В. 16. С. 65.
- [8] *Радциг А.А., Смирнов Б.М.* Справочник по атомной и молекулярной физике. М.: Атомиздат, 1980.
- [9] *Palik E.D.* // Handbook of Optical constants of solids. Acad. Press, San Diego, CA, 1985.
- [10] *Echenique P.M., Howie A.* // Ultramicroscopy. 1985. V. 16. P. 269.
- [11] *Nkoma J.S.* // Phys. Stat. Sol. 1987. V. b139. P. 117.
- [12] *Auslender M., Hava S.* // Infrared Phys. Technol. 1995. V. 36. P. 1077.