

- [1] Л а н д а у Л.Д., Л и ф ш и ц Е.М. Электродинамика сплошных сред. М.: Наука, 1982.
- [2] А б р и к о с о в А.А. Основы теории металлов. М.: Наука, 1987.
- [3] Г о р ь к о в Л.П., К о п н и н Н.Б. // УФН. 1988. Т. 156. В. 1. С. 117-135.

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

Поступило в Редакцию  
27 сентября 1989 г.

Письма в ЖТФ, том 15, вып. 24

26 декабря 1989 г.

11

## К ТЕОРИИ ВТОРИЧНОЙ ИОННОЙ ЭМИССИИ МЕТАЛЛОВ

А.Г. Б о р и с о в, И.Ф. У р а з г и л ь д и н

Бомбардировка поверхности твердого тела ионным пучком сопровождается распылением частиц, покидающих поверхность в различных зарядовых состояниях. Исследование процессов формирования зарядового состояния вторичных частиц является важной задачей физики взаимодействия атомных частиц с твердым телом, представляющей большой практический интерес для диагностики поверхности.

Теоретические модели, описывающие резонансную перезарядку отлетающего иона с невозмущенной поверхностью, дают следующую зависимость для вероятности ионизации от нормальной к поверхности составляющей скорости иона  $v_{\perp}[1]$ :

$$P^+ \sim \exp(-v_0/v_{\perp}) \quad (1)$$

$v_0$  - параметр. Формула получена в предположении бесконечной ширины валентной зоны в металле. Как было экспериментально установлено [2], формула (1) не описывает поведение  $P^+(E)$  в области малых энергий отлетающих частиц. Кроме того, при качественном совпадении теории и эксперимента в области энергий, отвечающих экспоненциальной зависимости (1), теория дает существенно завышенное значение для  $P^+$  (на 2-3 порядка).

Рядом авторов показано, что отличие по форме между экспериментальными и теоретическими зависимостями  $P^+(E)$  может быть уменьшено при учете: а) зависимости скорости отлетающей частицы от расстояния до поверхности [3]; б) конечного времени диффузии электрона в твердом теле [4]. Однако эти модели не устраняют расхождения в порядке величин.

Рис. 1. Влияние конечной ширины зоны на вероятность ионизации: расчет (1), эксперимент (2) [2].

Связано такое расхождение главным образом с тем, что существующие теории, учитывающие изменение энергии основного состояния отлетающей частицы в зависимости от расстояния до поверхности, предполагают начальную разность энергий между уровнем Ферми и уровнем отлетающей частицы порядка нескольких эВ. Предположение справедливо для десорбции, в случае же распыления собственных атомов, когда основной уровень в начальный момент находится вблизи уровня Ферми, оно не приемлемо. Весьма существенно также влияние на вероятность ионизации ограниченности ширины энергетической зоны электронных состояний в металле.

С учетом данных факторов проводилось интегрирование нестационарного уравнения Шредингера. Расчет проводился на ЭВМ на основе динамического гамильтониана Андерсена - Ньюнса [5, 6]:

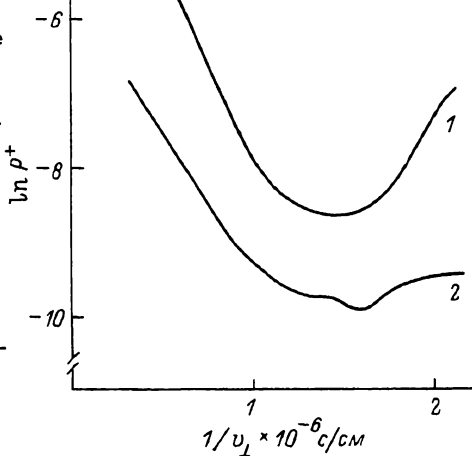
$$\hat{H}(t) = \mathcal{E}_a(t) |a\rangle \langle a| + \sum_k \mathcal{E}_k |k\rangle \langle k| + \sum_k (V_{ka} |k\rangle \langle a| + V_{ak} |a\rangle \langle k|),$$

приводящего к системе уравнений для чисел заполнения:

$$i\hbar \frac{\partial a}{\partial t} = \mathcal{E}_a(t) a + \sum_k V_{ak} b_k, \quad (2a)$$

$$i\hbar \frac{\partial b_k}{\partial t} = \mathcal{E}_k b_k + V_{ka} a, \quad (2б)$$

где  $\mathcal{E}_a(t)$  - энергия основного состояния отлетающего иона [1],  $|a\rangle$  - волновая функция электрона в этом состоянии;  $\mathcal{E}_k, |k\rangle$  - энергия и волновая функция, отвечающие электронным состояниям в зоне;  $V_{ak} = \langle a | \hat{V} | k \rangle$  - матричный элемент перехода, где  $\hat{V}$  - оператор возмущения, связанный со взаимодействием иона с поверхностью;  $|b_k|^2$  - вероятность нахождения электрона на  $k$ -ом энергетическом уровне в зоне,  $|a|^2$  - вероятность нахождения электрона в состоянии, связанном с основным уровнем иона (вероятность нейтрализации). Начальные условия предполагают отсутствие электрона в основном состоянии, расположенном незначительно выше уровня Ферми.



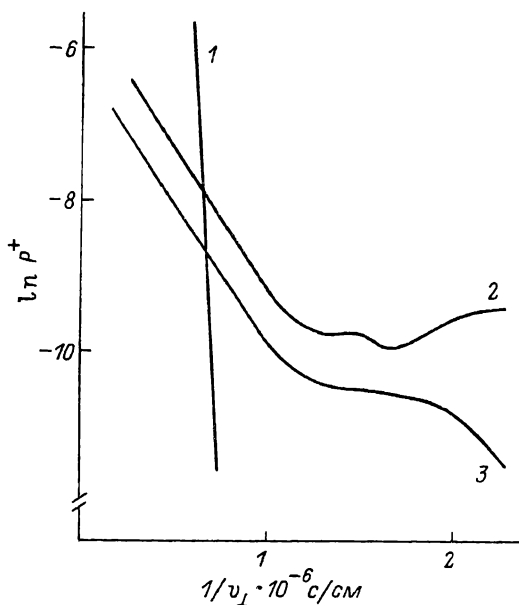


Рис. 2. Вероятность ионизации с учетом зависимости  $N_0(E)$ : теоретическая формула 1 (1), эксперимент (2) [2], теория с учетом зависимости  $N_0(E)$  (3).

Было получено, что ход кривой  $P^+(E)$  в области малых энергий существенно отличается от  $\text{EXP}(-v_0/v_L)$  и приближается к экспериментально наблюдавшемуся (рис. 1).

Следующим важным моментом, по нашему мнению, является выбор  $V_{ак}$ . Обычно рассматривают  $V_{ак}$  в виде:  $V_{ак} = N_0 \text{EXP}(-\gamma v_L t)$ , где  $\gamma^2/2$  - энергия связи электрона. При этом амплитуду обменного взаимодействия  $N_0$  считают не зависящей от номера  $k$  и кинетической энергии отлетающего иона  $E$ . Вид  $V_{ак}$  не предполагает зависимости от условий получения распыляющего импульса. На самом деле распыляющий импульс передается в результате столкновения, которое и определяет скорость эмитируемой частицы. Таким образом, всегда можно выделить частицу или группу частиц, с которыми происходит взаимодействие в момент эмиссии. Очевидно, что начальная величина  $N_0$ , определяемая перекрытием электронных оболочек, зависит от максимального сближения атомов.

Взаимодействие между атомами выбиралось в виде потенциала Морзе:  $V = E_0 \{ \exp[-2\alpha(r-r_0)] - 2 \exp[-\alpha(r-r_0)] \}$ ;  $E_0$  - энергия связи, отвечающая положению равновесия  $r_0$ ,  $r$  - расстояние между атомами. Сближение атомов  $r_{min}$  связано с энергией вторичной частицы и может быть оценено в предположении лобового удара при получении распыляющего импульса.

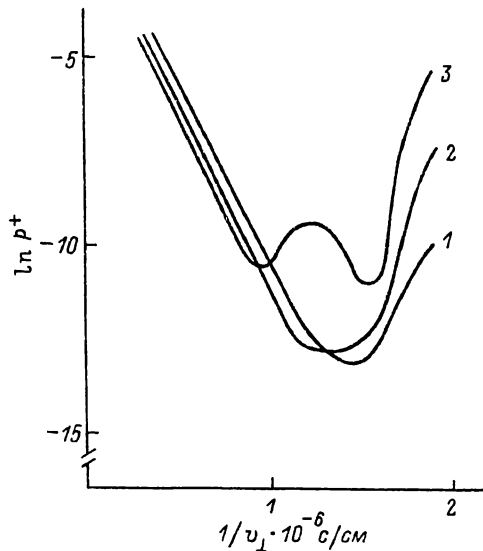


Рис. Влияние диффузии на вероятность ионизации  $P^+$  для различных значений  $\Gamma$ : 0 эВ (1), 0.2 эВ (2), 0.5 эВ (3).

Кроме того, в области расстояний до поверхности, в пределах которой происходит интенсивный зарядовый обмен ( $\sim 3 \text{ \AA}$ ), более отвечающей действительности является следующая форма обменного члена:  $V_{ax} \sim \exp(-\beta r^2)$ , обусловленная, в частности, насыщением обменного взаимодействия на малых расстояниях.

На основе полученных значений для  $\Gamma_{min}$  вычислялись величины  $N_0(E)$ , которые подставлялись в теоретическую формулу (1), где  $\sigma_0 \sim N_0^2$  [1]. Результат (рис. 2) демонстрирует значительное приближение по форме кривой и порядку величины  $P^+(E)$  к экспериментальным зависимостям [2, 7].

На формирование зарядового состояния отлетающего иона существенное влияние оказывает характерное время пребывания электрона в области обмена. Оно определяется пространственной диффузией электрона в металле. Необходимо отметить, что система (2) не содержит члена, отвечающего за диффузию носителя заряда. В связи с этим попытка авторов [4] учесть диффузию, исходя из системы (2), представляется некорректной. Учет диффузии приводит к появлению в правой части уравнения (26) члена:  $-i\Gamma v_{\kappa}$ , где  $\Gamma$  — скорость диффузии. Полученные для различных  $\Gamma$  результаты представлены на рис. 3, из которого следует, что наиболее сильное изменение хода кривой  $P^+(E)$  наблюдается в области малых скоростей.

Таким образом, в процессе вторичной ионной эмиссии существенную роль играет близость в начальный момент энергии основного

состояния отлетающей частицы к энергии Ферми; конечная ширина зоны электронных состояний в металле; зависимость амплитуды обменного взаимодействия от кинетической энергии эмитируемой частицы; пространственная диффузия носителя заряда в металле.

#### С п и с о к л и т е р а т у р ы

- [1] Lang N., Nor skov J. // Physica Scripta. 1983. V. 6. P. 15-18.
- [2] Wucher A., Oech sner H. // Surface Sci. 1988. V. 199. P. 567-578.
- [3] Lang N. // Phys. Rev. B. 1983. V. 27. P. 2019-2020.
- [4] Sroubek Z., Falcone G. // Surface Sci. 1988. V. 197. P. 528-538.
- [5] Brako R., News D.M. // Surface Sci. 1981. V. 108. P. 253-270.
- [6] Ле дя н ки н Д.В., У р а з г и л ь д и н И.Ф., Ю р а - с о в а В.Е. // ЖЭТФ. 1988. Т. 94. № 12. С. 90-100.
- [7] O'Connor D.J., Shen Y.G., Wilson J.M., Mac Donald R.G. // Surface Sci. 1988. V. 197. P. 277-294.

Московский  
государственный  
университет  
им. М.В. Ломоносова

Поступило в Редакцию  
19 сентября 1989 г.

Письма в ЖТФ, том 15, вып. 24

26 декабря 1989 г.

05.1

#### ВЛИЯНИЕ ОТЖИГА НА СКОРОСТЬ ВИНТОВЫХ ДИСЛОКАЦИЙ В АНТИМОНИДЕ ИНДИЯ

В.И. А л е к с е е н к о, В.М. М о с т о в о й

1. Старение дислокаций в щелочно-галогидных кристаллах изучалось в работах [1, 2]. Впервые задача об изучении кинетики подвижности индивидуальных дислокаций в кристаллах полупроводников, подвергнутых высокотемпературному отжигу, была поставлена в [3]. Было экспериментально показано, что предварительной высокотемпературный отжиг кристалла с дислокациями без внешней нагрузки приводит к резкому падению скорости дислокаций, тогда как подобный отжиг кристаллов с движущимися под действием внешней нагрузки дислокациями практически не оказывает влияния на их подвижность [4].