

01;11

Влияние температуры на выход ионов, десорбированных вследствие электронных переходов: релаксационная модель

© С.Ю. Давыдов

Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе РАН,
194021 Санкт-Петербург, Россия

(Поступило в Редакцию 4 декабря 1995 г. В окончательной редакции 10 сентября 1996 г.)

В рамках релаксационной модели электронно-стимулированной десорбции (ЭСД) рассмотрено влияние температуры на выход десорбированных ионов и вычислен соответствующий температурный коэффициент. Результаты теории применены для объяснения экспериментальных данных по ЭСД ионов лития и натрия с поверхности вольфрама, покрытого монослоем кремния.

Введение

Электронно-стимулированная десорбция (ЭСД) в настоящее время заняла свое прочное место в ряду разнообразных методик исследования поверхности [1,2]. Существуют различные подходы к описанию этого явления. Релаксационная модель предполагает следующее [3–5]. При воздействии внешнего возмущения, т.е. при бомбардировке электронами или фотонами адсорбционной системы (рис. 1), связь между составляющими адсорбционный комплекс атомами (ионами) 1 и 2 разрывается вследствие перераспределения между ними электронной плотности. Оба атома (иона) приобретают положительный заряд, далее распад и эволюция адсорбционной системы происходят под влиянием кулоновского расталкивания ионов 1 и 2. Таков первый этап десорбции.

Второй этап наступает в некоторый произвольный момент времени, когда дырка или две дырки, локализованные на ионе 1, распадаются. Если к этому моменту ион 2 набрал кинетическую энергию, достаточную для преодоления барьера, то он сможет десорбироваться. Простая аналитическая теория этого эффекта была предложена в работах [6,7].

Как правило, влиянию температуры на ЭСД уделялось мало внимания. В работах [8,9], где изучалась десорбция положительных ионов лития и натрия с поверхности вольфрама, покрытого монослойной пленкой кремния, температурный эффект исследовался подробно. При этом оказалось, что в зависимости от энергии бомбардирующих электронов температурные коэффициенты выхода десорбированных ионов могут сильно отличаться для одной и той же адсорбционной системы. Качественное объяснение такого различия было дано уже в работах [8,9], где предполагалось, что величина температурного коэффициента связана с направлением первоначального движения десорбируемого иона. Именно эти работы и стимулировали интерес автора к данной проблеме.

Учет влияния температуры в релаксационной модели

Рассмотрим тепловые колебания атомов (ионов) 1 и 2, составляющих адсорбционный комплекс (рис. 1). Будем учитывать только колебания, связанные с изменением длины связи l между ионами 1 и 2. Мы можем записать

$$l = l_0 + \Delta l \cos(\omega t + \delta), \quad (1)$$

где l_0 — равновесная длина связи, Δl — амплитуда колебаний с частотой ω , δ — фаза колебаний.

В момент разрыва связи $t = 0$ под действием внешнего возмущения ион 2 будет удален от иона 1 на расстояние $l = l_0 + \Delta l \cos \delta$. Фаза колебаний δ есть величина случайная при малых концентрациях адатомов, которые мы здесь и рассматриваем. Рис. 2 иллюстрирует влияние таких колебаний на десорбцию. Видно, что при уменьшении длины связи адатом приобретает большую положительную энергию, чем теряет при увеличении длины связи (что естественно вследствие нелинейной зависимости взаимодействия от расстояния). Следовательно, в среднем колеблющийся десорбируемый ион будет испытывать более сильное отталкивание, чем в замороженном состоянии. Ясно поэтому, что должна возрастать его средняя (и максимальная) кинетическая энергия, а следовательно, должен возрастать и выход ЭСД ионов.

Как будет показано ниже, параметром, определяющим эффект колебаний, является $(\Delta l/l_0)^2$. Если теперь интерпретировать $(\Delta l)^2$ как среднее квадратичное смещение, которое, как известно, пропорционально температуре T , то становится ясным путь учета температурных эффектов в ЭСД.

Как и в работах [6,7], мы будем рассматривать дипольную модель десорбции, т.е. считать систему, состоящую из заряда z_1 и его изображения в металле, точечным ди-

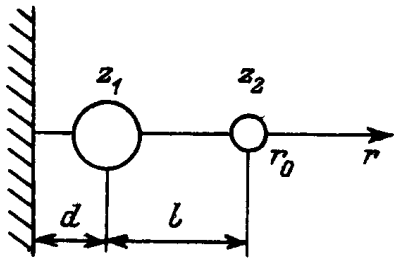


Рис. 1. Модель адсорбционного комплекса.

полем. Тогда, обозначая равновесное расстояние иона 2 до поверхности металла символом r_0 и амплитуду его смещения через Δr , получим вместо (1) следующее выражение:

$$r = r_0 + \Delta r \cos \delta. \tag{2}$$

Первый этап движения десорбируемого иона описывается уравнением [6]

$$\dot{r} = \frac{4z_1z_2}{r^3} - \frac{z_2^2}{4r^2} \tag{3}$$

с начальными условиями

$$r(0) = r_0, \quad \dot{r}(0) = 0. \tag{4}$$

Здесь и в дальнейшем используются безразмерные единицы: все расстояния измеряются в единицах длины связи d (рис. 1), а время — единицах $\bar{t} = (Md^3/e^2)^{1/2}$, где M — масса десорбируемого иона, e — заряд позитрона. Теперь мы можем использовать все результаты работы [6], положив в полученных там формулах $\theta_0 = 0$, так как здесь мы рассматриваем адсорбционную связь, нормальную к поверхности подложки, и заменив r_0 на r . В частности, для функции энергетического распределения десорбированных ионов (при малых кинетических энергиях $E \rightarrow 0$) будем иметь вместо выражения (18)

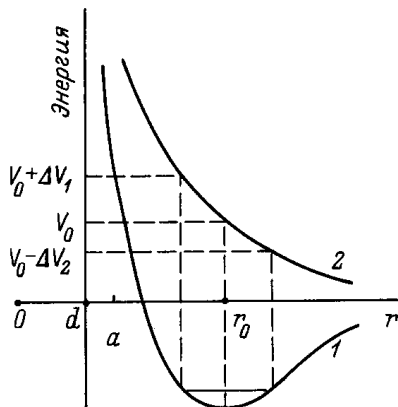


Рис. 2. Влияние колебаний адатома на кинетическую энергию ЭСД ионов. 1 — потенциал основного состояния, 2 — отталкивательный десорбирующий потенциал; $\delta V = \Delta V_1 - \Delta V_2 > 0$. Начало координат совмещено с ионом 1.

из [6] следующую формулу:

$$f_E \sim \exp\left(-\frac{t_c^*}{\tau} \sqrt{1 + (2E/V)}\right), \tag{5}$$

где критическое время t_c^* , т.е. время, необходимое для того, чтобы на первом этапе десорбции ион 2 набрал достаточную для преодоления барьера кинетическую энергию, есть

$$t_c^* = r\sqrt{2V/W(2W - V)}, \tag{6}$$

$$W = 4z_1z_2/r^2, \quad V = z_2^2/2r, \tag{7}$$

τ — характерное время жизни двухдырочного состояния на ионе 1 (порядка 10^{-14} с), z_1 — заряд иона 1 в двухдырочном состоянии, z_2 — заряд десорбируемого иона.

Расчет выхода десорбированных ионов

Выход десорбированных ионов q определяется выражением

$$q = \int_{E_{min}}^{E_{max}} f_E dE, \tag{8}$$

где $E_{min} = 0$ при $\theta_0 = 0$, $E_{max} = (W - V)/2$ определяется законом сохранения энергии [6].

Функция f_E , определяемая выражением (5), соответствует пределу $E \rightarrow 0$, тогда как при $E \rightarrow E_{max}$ имеем другую зависимость (см. формулу (4) в работе [7]). Так как, однако, главный вклад в интеграл (8) дают низкоэнергетические ионы, то при вычислении q мы будем использовать выражение (5) во всем энергетическом диапазоне. Тогда легко найти

$$q \sim Vf(\theta, \eta)/\theta^2, \tag{9}$$

где $f(\theta, \eta) = f(\theta) - f(\eta)$, $f(A) = (1 + A) \exp(-A)$, где $A = \theta$, η , $\theta = t_c^*/\tau$, $\eta = \theta\sqrt{1 + 2E_{max}/V}$.

Так как фаза δ , определяющая мгновенное (в момент $t = 0$) значение r , есть величина случайная, то нужно определить среднее значение выхода $\langle q \rangle$ по формуле

$$\langle q \rangle = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} q d\delta. \tag{10}$$

Вводя малый параметр $\xi = \Delta r/r_0$ и вычисля интеграл (11), найдем во втором порядке по ξ следующее выражение:

$$\langle q \rangle = q + \Delta q, \tag{11}$$

где q определяется формулой (9) при $r = r_0$, а добавка

$$\Delta q = \frac{V_0}{2\theta^2} \xi^2 [f(\theta)R_1 - f(\eta)R_2], \tag{12}$$

$$R_1 = 1 + 2(a_1 + a_2) + 3a_1^2 + \left(a_1 + a_2 + a_1^2 \frac{\theta + 3}{2}\right) \frac{\theta^2}{1 + \theta}, \tag{13}$$

$$R_2 = 1 + 2(a_1 + a_2) + 3a_1^2 + \left[b_1(1 + 2a_1) + b_2 + \frac{\eta - 1}{2} b_1^2 \right] \frac{\eta^2}{1 + \eta}, \quad (14)$$

$$a_1 = (5W_0 - 2V_0)/(2W_0 - V_0),$$

$$b_1 = (8W_0 - 3V_0)/2(2W_0 - V_0),$$

$$a_2 = (5W_0^2 - 6W_0V_0 + V_0^2)/2(2W_0 - V_0)^2,$$

$$b_2 = (8W_0^2 - 4W_0V_0 + V_0^2)/8(2W_0 - V_0)^2. \quad (15)$$

В формулах (11)–(15) все величины вычислены для равновесного значения r_0 . Определив температурный коэффициент выхода ЭДС ионов в виде

$$\gamma = \frac{\partial \ln \langle q \rangle}{\partial T}, \quad (16)$$

получим

$$\gamma = C \frac{\partial \xi^2}{\partial T}, \quad (17)$$

где

$$C = \frac{1}{2} \frac{f(\vartheta)R_1 - f(\eta)R_2}{f(\vartheta) - f(\eta)}. \quad (18)$$

Зависимость выхода ЭСД ионов и его температурного коэффициента от параметров модели

На рис. 3, 4 представлены зависимости выхода ионов q (в относительных единицах) и коэффициента C в функции от равновесного стартового положения r_0 десорбируемого иона 2 для различных времен жизни двухдырочного состояния τ и от заряда иона 1. Видно, что с увеличением r_0 выход ионов q уменьшается (рис. 3, а), а коэффициент C возрастает (рис. 3, б). Снижение выхода объясняется тем, что с ростом r_0 отталкивательный десорбирующий потенциал уменьшается (рис. 2), следовательно, падает кинетическая энергия ионов и меньшее их число сможет преодолеть потенциальный барьер. С ростом τ , однако, время пребывания иона 2 в отталкивательном поле иона 1 увеличивается и выход нарастает. Рис. 3, б демонстрирует то обстоятельство, что коэффициент γ в соответствии с определением (16) обратно пропорционален q .

На рис. 4 представлены зависимости q и C от заряда z_1 . С увеличением z_1 выход ЭСД ионов нарастает, что естественно вследствие увеличения отталкивания. Температурный коэффициент C при этом уменьшается. В работе [6] определен критический заряд иона 1

$$z_{1c} = z_2 r_0 / 8, \quad (19)$$

удовлетворяющий условию, что лишь при $z_1 > z_{1c}$ ион 2 может уйти на бесконечность, т. е. десорбироваться. Если предположить, что

$$z_1 = z_{1c}(1 + \alpha),$$

где $\alpha \ll 1$, то можно показать, что

$$q = \frac{1}{2} \alpha V_0 \exp(-R), \quad (20)$$

$$C = \frac{3}{2\alpha} \left(1 + \frac{11}{12} R \right), \quad (21)$$

где

$$R = \frac{r_0}{\tau} \sqrt{2/V_0}.$$

Таким образом, при $z_1 \rightarrow z_{1c}$ выход ионов q иссякает, а коэффициент C стремится к бесконечности. Для случаев, представленных на рис. 4, а–в, критический заряд равен соответственно 0.125, 0.25 и 0.375 при $z_2 = 1$.

Приведенные в этом разделе результаты расчетов демонстрируют также, что как q , так и C изменяются в довольно широком диапазоне (порядка 10^2) при сравнительно небольших вариациях параметров r_0 , z_1 , τ .

Об ЭСД ионов лития и натрия с поверхности вольфрама, покрытого монослоем кремния

Рассмотрев общие свойства модели, перейдем к описанию конкретной системы. В качестве таковой рассмотрим десорбцию ионов щелочных металлов (Li^+ , Na^+) с поверхности вольфрама, покрытого монослоем кремния Si/W. Эта система подробно исследована в работе [8].

Для расчета нам необходимо определить параметры модели, соответствующие рассматриваемой системе. Рассмотрим для начала структуру Si/W. Примем за расстояние d (рис. 1) атомный радиус кремния, равный 1.17 \AA [10]. В качестве работы выхода подложки принимаем значение $\varphi = 4.65 \text{ эВ}$, что соответствует грани (100). Потенциал ионизации атома кремния $I(\text{Si}) = 8.15 \text{ эВ}$ [11].

Оценим заряд, локализованный на атоме кремния, находящемся на поверхности вольфрама. Положение центра квазиуровня адатома относительно вакуума ε' может быть вычислено из соотношения [12]

$$\varepsilon' = -I + 3.6/d, \quad (22)$$

где d измеряется в \AA , а ε' — в эВ.

Тогда получим $\varepsilon' = -5.07 \text{ эВ}$ (при этом предполагалось, что воображаемая плоскость изображения проходит на расстоянии d от центра атома кремния). Относительно уровня Ферми вольфрама положение квазиуровня адатома есть $\varepsilon = \varepsilon' + \varphi$, т. е. $\varepsilon = -0.42 \text{ эВ}$. В соответствии с моделью Андерсона [13] заряд на атоме кремния определяется выражением

$$z(\text{Si}) = \frac{2}{\pi} \arctg \frac{\varepsilon}{\Gamma}, \quad (23)$$

где $\Gamma = \pi \rho_s V^2$ — полуширина квазиуровня.

Для плотности состояний подложки ρ_s , примем модель Фриделя [14] $\rho_s = 10/W_s$, где W_s — ширина d -зоны субстрата. Для оценки матричного элемента взаимодействия

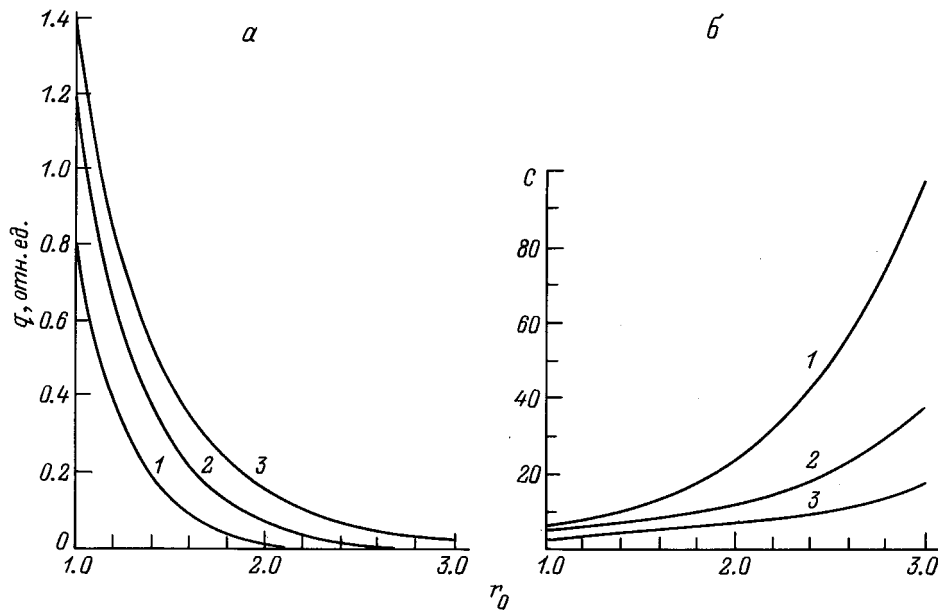


Рис. 3. Зависимость выхода ЭСД ионов q (а) и его температурного коэффициента C (б) от начального положения r_0 иона. $z_1 = z_2 = 1$, $\tau = 0.5$ (1), 1 (2), 2 (3).

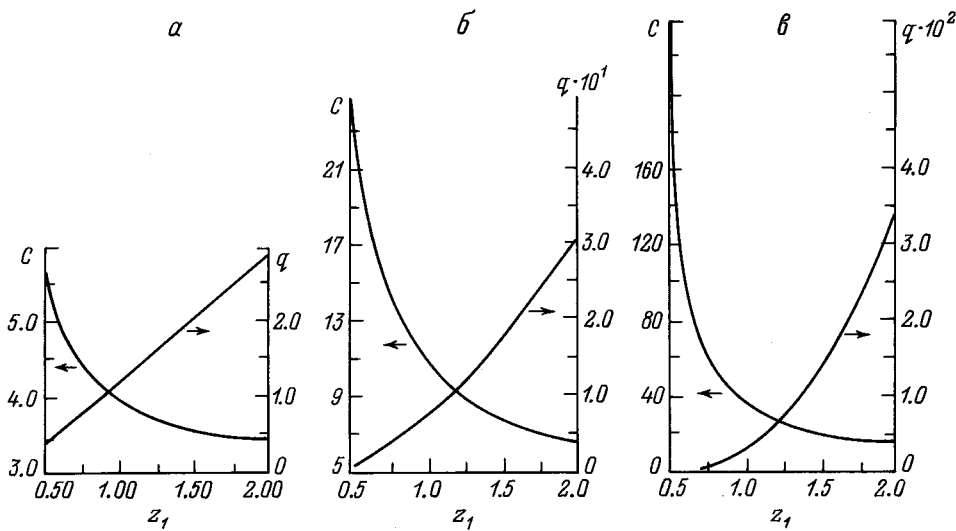


Рис. 4. Зависимость q и C от заряда z_1 . $\tau = 1$, $z_2 = 1$; $r_0 = 1$ (а), 2 (б), 3 (в).

адатома с металлом V предположим, как это делается в квантовой химии и теории сплавов, что $V = \sqrt{t_s t_a}$, где t_s и t_a — интегралы перескока между ближайшими соседями в кристаллах, образованных атомами подложки и атомами адсорбционного покрытия. Учитывая, что в приближении сильной связи ширина зоны $W = 2nt$, где n — число ближайших соседей, получим окончательно

$$\Gamma = \frac{5\pi}{2n_s n_a} W_a. \quad (24)$$

Так как для рассматриваемой нами системы $n_s = 8$, $n_a = 4$, $W_a = 12.5$ эВ [15], то получим $\Gamma = 3.06$ эВ, что дает $z(\text{Si}) = -0.09$.

Другой путь оценки заряда на кремнии — использование соотношения, связывающего изменение работы выхода в системе $\Delta\varphi$ с дипольным моментом адатома p [16,17]

$$\Delta\varphi = -2\pi e N p, \quad (25)$$

$$p = 2edz, \quad (26)$$

где N — концентрация адатомов.

Так как изменение работы выхода в системе Si/W есть 0.43 эВ [8] для монослоя кремния на вольфраме ($N = 10^{15}$ ат./см² [18]), то получим $z(\text{Si}) = -0.02$.

Итак, оценки, полученные двумя совершенно различными способами, дают сходные результаты, в особен-

ности если учесть, что в пленке происходит деполяризация адатомов [17,19–23], вследствие чего формула (23) должна давать больший (по абсолютной величине) заряд, чем формула (24), что и имеет место. Таким образом, атомы кремния на вольфраме несут весьма малый отрицательный заряд.

Теперь оценим заряды ионов натрия и лития, адсорбированных на Si/W. Сразу же оговоримся, что оценки в данном случае будут значительно более грубыми, так как, во-первых, мы имеем дело с тройной системой, во-вторых, не знаем структуры кремниевой пленки. Последнее обстоятельство отнюдь не маловажно, так как экспериментальные исследования адсорбции щелочных металлов на массивных кремниевых подложках [24] показали, что на грани (111), где наблюдаются структуры 7×7 , атомы щелочных металлов почти полностью ионизованы, тогда как при структуре 2×1 на поверхности (100) переход заряда весьма мал. Более того, для системы Li/Si (111) уже при очень малых покрытиях $\theta \cong 0.05ML$ существенно меняются параметры связи Li–Si [25].

Попытаемся все-таки оценить заряды, воспользовавшись выражением (23). Будем считать систему Si/W "единой" подложкой с работой выхода $\varphi(\text{Si/W}) = 5.08$ эВ [8]. Используя значения потенциалов ионизации $I(\text{Li}) = 5.39$ и $I(\text{Na}) = 5.14$ эВ [11] и беря в качестве d в формуле (22) ионные радиусы $r_i(\text{Li}^+)$, $r_i(\text{Na}^+)$, равные соответственно 0.68 и 0.92 Å [10], т.е. совмещая плоскость изображения с поверхностью кремниевой пленки, получим для положения уровней $\varepsilon(\text{Li}) = 4.98$ и $\varepsilon(\text{Na}) = 3.85$ эВ. Приняв интеграл переходов t_a равным матричному элементу $V_{ss\sigma} = 1.32(\hbar^2/mr_i^2)$ [26], где m — масса электрона, \hbar — постоянная Планка, получим $t_a(\text{Li}) = 1.10$ и $t_a(\text{Na}) = 0.75$ эВ, что дает $\Gamma = 2.16$ и 1.47 эВ для лития и натрия соответственно. Тогда из формулы (23) следует, что $z(\text{Li}) = 0.74$ и $z(\text{Na}) = 0.77$. Если считать, что соответствующее количество электронов переходит на кремний (заполняя, например, торчащую наружу sp^3 -орбиталь), то можно считать, что заряд на атомах кремния в системе щелочной металл–Si/W отрицателен и равен по величине 0.75–0.80. Если теперь создать на кремнии двухдырочное состояние (т.е. удалить два электрона), то заряд ионов кремния будет порядка 1.20–1.25. Именно это значение и соответствует по определению заряду z_1 нашей модели.

Другой путь оценки зарядов Li и Na — считать монослой кремния диэлектрической прокладкой. Тогда в качестве d в формуле (22) нужно взять сумму ионного радиуса щелочного металла и диаметра атома кремния, т.е. совместить плоскость изображения с поверхностью вольфрама. При этом получим $\varepsilon(\text{Li}) = 0.88$ и $\varepsilon(\text{Na}) = 1.04$ эВ. Вследствие наличия диэлектрической пленки уровни адатома сужаются $\Gamma = \Gamma_0 \exp(-2\zeta h)$, где h — толщина пленки (диаметр атома кремния). Если принять за Γ_0 найденные нами ранее значения и считать, что ζ соответствует экспоненциальному показателю радиальной волновой функции внешнего s -электрона

щелочного атома, то, воспользовавшись данными по ζ из [27], можно показать, что Γ по сравнению с Γ_0 уменьшается более чем на два порядка. Тогда по формуле (23) получим для зарядов натрия и лития на поверхности Si/W значение $z(\text{Li, Na}) \cong 1$. Если опять предположить, что электрон переходит на sp^3 -орбиталь кремния, т.е. считать, что атом кремния превращается в однократно заряженный отрицательный ион, то после создания на последнем двухдырочного состояния будем иметь уже ион Si^+ . Таким образом, обе чисто теоретические оценки заряда кремния в двухдырочном состоянии дают величину z_1 порядка 1–1.25.

Существует, однако, и третий путь непосредственного определения заряда z_1 нашей модели — "экспериментальный". Мы можем воспользоваться выражением для максимальной энергии (см. формулу (8)) и экспериментальными данными по кривым задержки [8]. Из (8) следует, что

$$z_1 = \frac{r_0^2}{2z_2} \left(E_{\max} + \frac{z_2^2}{4r_0} \right). \quad (27)$$

Имея в качестве единицы длины атомный радиус кремния, получим $r_0(\text{Li}) = 2.59$, $r_0(\text{Na}) = 2.79$, единица энергии $E^* = e^2/d$ равна 12.31 эВ. Выбор экспериментального значения E_{\max} не так прост. Следует учитывать, что высокоэнергетические хвосты этих кривых, вообще говоря, не описываются нашей теорией, так как мы учитываем роль колебаний адсорбционного комплекса лишь в среднем, тогда как хвосты связаны с максимальным сжатием адсорбционной связи. Воспользовавшись данными работами [8] (см. рис. 3,4 для случая энергии бомбардирующих электронов, равной 300 эВ), положим $E_{\max}(\text{Li}) = 3$ эВ. Тогда из выражения (27) найдем $z_1 = 1.13$. Беря для натрия значение энергии $E_{\max}(\text{Na}) = 4$ эВ, получим $z_1 = 1.61$, что заметно превышает нашу оценку. Если же, как в работе [8], взять $E_{\max}(\text{Na}) = 5$ эВ, то получим $z_1 = 2$. Следовательно, мы должны предположить, что имеем дело с трехдырочным состоянием. К такому выводу и приходят авторы работы [8] на основании анализа порогов десорбции и кривых задержки (кривая задержки для Na имеет излом и сильно отличается от соответствующей кривой для Li).¹ Таким образом, как чисто теоретические оценки, так и оценки, основанные на данных эксперимента, приводят к близким результатам.

Остается оценить параметр ξ и его температурную зависимость. Если приравнять $(\Delta r)^2$ среднему квадратичному смещению, то в высокотемпературном пределе [28,29]

$$(\Delta r)^2 = 3(\hbar^2 T / M \Theta^2 k_B), \quad (28)$$

где Θ — температура Дебая, k_B — постоянная Больцмана.

¹ Автор признателен И.Д. Потехиной, обратившей его внимание на данное обстоятельство.

Однако для адсорбционной системы, где такой параметр, как Θ , не определен, удобнее использовать значение силовой константы адсорбционной связи

$$\kappa = (Mk_B^2\Theta^2/\hbar^2), \quad (29)$$

где под M следует понимать приведенную массу "молекулы" Li, Na–Si/W. Для оценки константы κ для колебаний, отвечающих изменению длины связи, удобно воспользоваться подходом, развитым в работах [30,31], и положить

$$\kappa = E_{\text{des}}/l^2, \quad (30)$$

где E_{des} — энергия десорбции; l — характерная длина, на которой изменяется E_{des} , которую мы принимаем равной r_0 . Тогда

$$\xi^2 = 3(k_B T/E_{\text{des}}). \quad (31)$$

Так как по данным эксперимента величина энергии десорбции щелочных металлов с монослойного кремниевого покрытия на вольфраме лишь на одну-две десятых эВ отличается от энергии их десорбции с чистого вольфрама, то мы принимаем $E_{\text{des}}(\text{Li}) = 2.98$ и $E_{\text{des}}(\text{Na}) = 2.53$ эВ [32–34]. Тогда $\partial\xi^2/\partial T = 0.87 \cdot 10^{-4}$ и $0.98 \cdot 10^{-4} \text{ K}^{-1}$ для ионов лития и натрия соответственно.

Для численного расчета необходимо также знать времена жизни дырочных состояний τ . Оценить его проще всего из экспериментальных кривых задержки. Можно показать, что логарифм тангенса угла наклона кривых задержки пропорционален величине $\vartheta = t_c^*/\tau$. Если сделать подобную оценку, полагая заряд иона кремния z_1 равным единице при десорбции ионов Li^+ и двум при десорбции Na^+ , то получим соответственно $\tau = 4.84$ и $1.43 \cdot 10^{-14}$ с.

Расчет γ , проведенный с этими значениями τ , дает для лития и натрия соответственно $\gamma = 7.35$ и $7.63 \cdot 10^{-4} \text{ K}^{-1}$. Для натрия это практически совпадает с экспериментом, тогда как для лития экспериментальное значение на порядок меньше. Причины столь большого расхождения в последнем случае связаны, во-первых, с чисто расчетной неустойчивостью, так как и числитель, и знаменатель в формуле (18) — малые величины, причем малый числитель есть разность двух больших чисел. Во-вторых, для легкого лития, по-видимому, необходим более строгий учет колебаний адсорбционного комплекса, а не использованное здесь усредненное описание.

Итак, в настоящей работе мы показали, что в рамках релаксационной модели может быть разумно описана температурная зависимость выхода десорбированных ионов. Необходимо, однако, сделать следующую оговорку. Результаты нашего расчета хорошо согласуются с экспериментом [8] для ионов натрия, десорбированных при облучении системы Na–Si/W электронами с энергией 300 эВ. Однако при воздействии на ту же систему электронов с энергией 100 эВ коэффициент γ возрастает приблизительно в 3 раза. Анализ десорбционного процесса в этом случае привел авторов [8] к выводу, что это происходит вследствие такого перераспределения электронной плотности в адсорбционном комплексе,

которое приводит к реверсивному движению десорбируемого иона в начальный момент десорбции. Наша модель этого не учитывает. В дальнейшем мы предполагаем обобщить развитый здесь подход, учитывая возможность реверсного эффекта.

Автор признателен В.Н. Агееву, Н.Д. Потехиной и Б.В. Якишинскому за обсуждение результатов работы и ценные замечания.

Список литературы

- [1] Агеев В.Н., Бурмистрова О.П., Кузнецов Ю.А. // УФН. 1989. Т. 158. Вып. 3. С. 385–420.
- [2] Ramsier R.D., Yates J.T. // Surf. Sci. Rep. 1991. Vol. 12. N 6–8. P. 244–379.
- [3] Агеев В.Н., Якишинский Б.В. // ФТТ. 1985. Т. 27. Вып. 1. С. 99–105.
- [4] Агеев В.Н., Бурмистрова О.П., Губанов А.И. и др. // Поверхность. 1986. № 12. С. 30–38.
- [5] Ageev V.N., Burmistrova O.P., Yakshinskii B.V. // Surf. Sci. 1988. Vol. 194. N 1/2. P. 101–114.
- [6] Давыдов С.Ю. // ФТТ. 1993. Т. 35. Вып. 9. С. 2525–2535.
- [7] Давыдов С.Ю. // ФТТ. 1995. Т. 37. Вып. 6. С. 1758–1170.
- [8] Агеев В.Н., Бурмистрова О.П., Магомедов А.М., Якишинский Б.В. // ФТТ. 1990. Т. 32. Вып. 3. С. 801–809.
- [9] Агеев В.Н., Магомедов А.М., Якишинский Б.В. // ФТТ. Т. 33. Вып. 1. С. 158–165.
- [10] Kummel C. Введение в физику твердого тела. М.: Наука, 1978. 792 с.
- [11] Физические величины. Справочник / Под ред. И.С. Григорьева, Е.З. Мейлихова. М.: Энергоатомиздат, 1991. 1232 с.
- [12] Gadzuk J.W. // Phys. Rev. B. 1970. Vol. 1. N 5. P. 2110–2129.
- [13] Anderson P.W. // Phys. Rev. Vol. 124. N 1. P. 41–53.
- [14] Friedel J. // The Physics of Metals / Ed. J.M. Ziman. London: Cambridge University Press, 1969. Ch. 8.
- [15] Харрисон У. Электронная структура и свойства твердых тел. М.: Мир, 1983. Т. 1. 381 с.
- [16] Muscat J.P., News D.M. // J. Phys. C. 1974. Vol. 7. N 15. P. 2630–2644.
- [17] Давыдов С.Ю. // ФТТ. 1977. Т. 19. Вып. 11. С. 3376–3380.
- [18] Агеев В.Н., Афанасьева Е.Ю. // Поверхность. 1987. № 7. С. 30–37.
- [19] Давыдов С.Ю. // ФТТ. Т. 20. Вып. 6. С. 1752–1757.
- [20] Давыдов С.Ю. // ФММ. Т. 47. № 3. С. 481–488.
- [21] Давыдов С.Ю. // ФММ. Т. 20. Вып. 7. С. 1998–2001.
- [22] Давыдов С.Ю., Марголин В.И. // ФТТ. 1982. Т. 24. Вып. 5. С. 1503–1505.
- [23] Давыдов С.Ю. // Поверхность. 1991. № 8. С. 17–21.
- [24] Hashizume T., Hasegawa Y., Sakurai T. // Appl. Surf. Sci. 1991. Vol. 48–49. N 1. P. 119–124.
- [25] Chorst J., Fisk D. // Surf. Sci. 1991. Vol. 251/252. N 1. P. 18–81.
- [26] Harrison W.A. // Phys. Rev. B. 1983. Vol. 27. N 6. P. 3592–3604.
- [27] Радоциг А.А., Смирнов Б.М. Параметры атомов и атомных ионов. Справочник. М.: Энергоатомиздат, 1986. 344 с.
- [28] Nishijima M., Propst F.M. // Phys. Rev. B. 1970. Vol. 2. N 7. P. 2368–2383.
- [29] Бетгер Х. Принципы динамической теории решетки. М.: Мир, 1986. 392 с.

- [30] *Rose J.H., Smith J.R., Ferrante J.* // Phys. Rev. B. 1984. Vol. 28. N 4. P. 1835–1845.
- [31] *Rose J.H., Smith J.R., Guinea F., Ferrante J.* // Phys. Rev. B. 1984. Vol. 29. N 6. P. 2963–2969.
- [32] *Назаров Э.Г., Расулев У.Х.* Нестационарные процессы поверхностной ионизации. Ташкент: Фан, 1991. 204 с.
- [33] *Агеев В.Н., Якинский Б.В.* // ФТТ. 1985. Т. 27. Вып. 1. С. 99–105.
- [34] *Antoniiewicz P.R.* // Phys. Rev. B. 1980. Vol. 21. N 9. P. 3811–3815.