

УДК 537.533

©1993

О ВЛИЯНИИ ЛОКАЛЬНОГО ПОЛЯ НА УГЛОВОЕ РАСПРЕДЕЛЕНИЕ ИОНОВ, ДЕСОРБИРОВАННЫХ ПОД ВЛИЯНИЕМ ЭЛЕКТРОННЫХ ВОЗБУЖДЕНИЙ

С.Ю. Давыдов

В рамках простой модели рассмотрена десорбция ионов под влиянием кулоновских сил, возникающих при разрыве адсорбционной связи по механизму Кноутека-Файбельмана. Учтены эффекты релаксации заряда адсорбционного фрагмента, связанного с поверхностью металла. Показано, что в результате стимулированной внешним возмущением десорбции направление начальной скорости десорбированного иона определяется электрическим полем фрагмента и силами изображения и не совпадает с направлением адсорбционной связи. На основании численных оценок сделан вывод о применимости предложенной модели к описанию электронно-стимулированной десорбции.

Электронно-стимулированная десорбция (ЭСД) или (шире) десорбция, стимулированная электронными переходами, что включает в себя также процессы, вызванные фотонной и ионной бомбардировкой, является мощным инструментом исследования поверхностных слоев [1,2]. Одна из наиболее привлекательных особенностей ЭСД — возможность получения информации о направлении связей в адсорбционной системе. Такую информацию дает в принципе угловое распределение десорбированных ионов (УРДИ), но для ее извлечения из экспериментальных данных необходима соответствующая теория.

Первые шаги в этом направлении были предприняты в работах [3-6]. Предполагалось, что электронное возбуждение формирует ион и сообщает ему некоторую начальную скорость v_0 , направленную вдоль адсорбционной связи. Далее в рамках классического траекторного приближения исследуется влияние сил изображения [3,4], эффектов ренейтрализации [5] и коадсорбированных ионов [6] на движение десорбируемого иона. При этом, однако, из рассмотрения выпадает одно важное обстоятельство, могущее кардинально изменить трактовку наблюдаемых распределений (как угловых, так и энергетических) десорбируемых ионов.

Действительно, пусть десорбция происходит по механизму Кноутека-Файбельмана [7,8], т.е. под влиянием возникающего при облучении электронным пучком двухдырочного состояния, локализованного на связанном с поверхностью фрагменте адсорбционного комплекса.¹ В работах

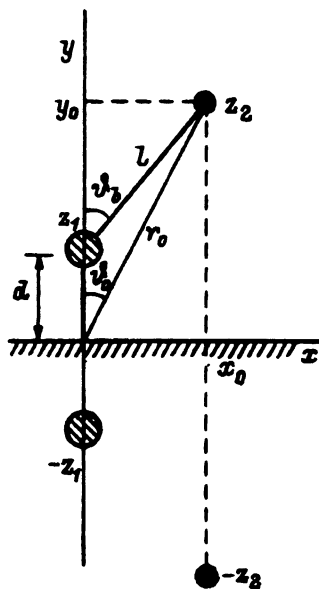
¹ Под адсорбционным комплексом мы понимаем либо адсорбированную молекулу, либо систему поверхностный атом-адатом. Под действием электронных переходов адсорбционный комплекс распадается на десорбируемый ион и фрагмент, остающийся связанным с поверхностью.

[3-6] молчаливо предполагалось, что десорбируемый ион сразу же «забывает» о локальном поле покинутого им фрагмента. Все, что делает фрагмент, — это сообщает иону начальную скорость v_0 . Но заряд на фрагменте релаксирует, так как время жизни двухдырочного состояния конечно и имеет величину порядка 10^{-14} с [9]. В результате изменяется локальное кулоновское поле, действующее на десорбируемый ион, и первоначально возникшее отталкивание между ионами может исчезнуть или даже перейти в притяжение. Модель, учитывающая такую релаксацию, была предложена в работах [10-12]. В настоящей публикации идеи, лежащие в основе этой модели, будут использованы для описания угловых распределений десорбированных ионов.

1. Траектория десорбируемого иона. Ближняя зона

Рассмотрим адсорбционный комплекс, изображенный на рисунке. Поверхность металла соответствует координате $y = 0$, ион 1 расположен в точке $(0, d)$, ион 2 при $t \leq 0$ имеет координаты $x_0 = l \sin \vartheta_b$, $y_0 = d + l \cos \vartheta_b$, где l — длина связи 1-2, ϑ_b — угол связи 1-2 относительно нормали к поверхности.

Далее предполагаем, что связь 1-2 имеет ионный характер и при $t < 0$ заряд иона 1 отрицателен ($z_1 < 0$), а иона 2 — положителен ($z_2 > 0$). В момент времени $t = 0$ под воздействием электронного пучка связь 1-2 разрывается: на фрагменте локализуются две дырки, его заряд становится положительным; ион 2 с зарядом $z_2 = 1$ начинает двигаться под действием кулоновских полей, создаваемых зарядом z_1 и силами изображения. Поля будем считать чисто кулоновскими, что хотя и не соответствует действительности для малых расстояний, но, как показано в работе [6], не вносит качественных изменений в результаты расчета траектории. Пренебрежем также влиянием отталкивательного взаимодействия электрон-



Модель адсорбционного комплекса.

ных оболочек, которое резко понижается в результате сжатия оболочки иона 1 в двухдырочном состоянии [9] (см. также обсуждение этого вопроса в [13]). Учет силы изображения, а процессами ренейтрализации в настоящем расчете пренебрежем.

Таким образом, ион 2 начинает движение в поле, создаваемом ионом 1 и его изображением, взаимодействуя при этом и со своим изображением в металле. Для простоты будем рассматривать поле фрагмента в дипольном приближении, справедливость которого обсуждается ниже. Тогда классические уравнения движения десорбируемого иона имеют вид

$$M\ddot{x} = 3pxy/r^5,$$

$$M\ddot{y} = p(2y^2 - x^2)/r^5 - z_2^2 e^2/4y^2, \quad (1)$$

где $p = 2dz_1z_2e^2$, $r^2 = x^2 + y^2$, M — масса иона 2, e — заряд электрона.

Перейдем к безразмерным величинам, измеряя все расстояния в единицах d , а время — в единицах $\tilde{t} = (Md^3/e^2)^{1/2}$. Введем полярные координаты r и ϑ , полагая $x = r \sin \vartheta$, $y = r \cos \vartheta$. Тогда система уравнений (1) может быть переписана в виде

$$\ddot{r} - r\dot{\vartheta}^2 = 4z_1z_2 \cos \vartheta / r^3 - z_2^2/4r^2 \cos \vartheta,$$

$$r\ddot{\vartheta} + 2\dot{r}\dot{\vartheta} = 2z_1z_2 \sin \vartheta / r^3 + z_2^2 \operatorname{tg} \vartheta / 4r^2 \cos \vartheta, \quad (2)$$

причем

$$r(0) = r_0, \quad \vartheta(0) = \vartheta_0; \quad \dot{r}(0) = \dot{\vartheta}(0) = 0.$$

Система уравнений (2) в общем виде аналитически не разрешима и требует численного анализа. В данной работе мы, однако, не стремимся к получению точных результатов. Наша цель — на качественном уровне исследовать влияние изменения локального поля фрагмента на угловые распределения ионов. Поэтому прибегнем к упрощениям и рассмотрим малые начальные углы и малые времена, когда $\vartheta \ll 1$ и $r - r_0 \ll r_0$. В этом случае можно показать (см. Приложение 1), что с точностью до ϑ_0^2 и t^2 решение имеет вид

$$r = r_0 \left\{ 1 + \left[2W_0 - V_0 - \frac{1}{2}\vartheta_0^2(2W_0 + V_0) \right] t^2 / 4r_0^2 \right\},$$

$$\vartheta = \vartheta_0 \left[1 + (W_0 + V_0)t^2 / 4r_0^2 \right], \quad (3)$$

где

$$V_0 = z_2^2/2r_0, \quad W_0 = 4z_1z_2/r_0^2.$$

Формулы для скоростей \dot{r} и $\dot{\vartheta}$ получаются путем дифференцирования соответствующих выражений по времени. Как следует из закона сохранения энергии (см. Приложение 1), необходимым условием инфинитного движения иона является выполнение неравенства $W_0 \cos^2 \vartheta_0 > V_0$, откуда следует соотношение

$$z_1 > z_{1c} = z_2 \frac{r_0}{8} (1 + \vartheta_0^2). \quad (4)$$

Точное выражение для z_{1c} приведено в Приложении 1, где и проанализирована применимость дипольного приближения.

Для дальнейшего анализа представляют интерес декартовы значения скоростей десорбируемого иона. Легко показать, что в линейном по времени приближении их значения определяются следующими выражениями:

$$v_x = \frac{3}{2} \frac{\vartheta_0}{r_0} W_0 t,$$

$$v_y = [2W_0 - V_0 - \vartheta_0^2(3W_0 + V_0)] t / 2r_0. \quad (5)$$

В начальный момент десорбируемый ион начинает двигаться под углом φ_0 по отношению к нормали к поверхности ($\varphi_0 \simeq \text{tg} \varphi_0 = dx/dy = v_x/v_y$),

$$\varphi_0 \simeq \vartheta_0 \frac{3W_0}{2W_0 - V_0}. \quad (6)$$

С течением времени угол φ увеличивается. Можно показать, что с точностью до ϑ_0 его значение определяется выражением

$$\varphi \simeq \varphi_0 + \vartheta_0(W_0 + V_0)t^2/2r_0^2. \quad (7)$$

Таким образом, в отличие от модели, предложенной в работах [4-6], десорбируемый ион начинает двигаться не в направлении связи 1-2,² а под углом φ_0 , определяемым дипольным полем и силами изображения.

Кинетическая энергия $E_1 = (v_x^2 + v_y^2)/2$, набираемая ионом на первом этапе движения за время t , есть

$$E_1 = P_1^2 t^2 / 8r_0^2, \quad (8)$$

где

$$P_1^2 = (2W_0 - V_0)^2 - \vartheta_0^2 (3W_0^2 - 2W_0V_0 - 2V_0^2).$$

Рассмотрим теперь статистический аспект задачи. Будем считать, что вероятность существования двухдырочного состояния на фрагменте определяется экспоненциальной функцией вида $\exp(-t/\tau)$, где τ — характерное время жизни порядка 10^{-14} с. Вероятность бездырочного состояния фрагмента есть $1 - \exp(-t/\tau)$, а плотность вероятности перехода в это состояние есть $\exp(-t/\tau)/\tau$. Переход системы в бездырочное состояние может произойти в любой момент времени в интервале от нуля до бесконечности. При $t^* = 0$ десорбируемый ион вообще не набирает кинетической энергии, а при $t^* \rightarrow \infty$ приобретает максимальное ее значение $E_{1\text{max}} = (W_0 \cos \vartheta_0 - V_0 / \cos \vartheta_0)/2$, что следует из закона сохранения энергии (см. Приложение 1).

Таким образом, если рассматривать систему N_0 независимых адсорбционных комплексов, получим некоторое, характерное для первого этапа движения распределение ионов по энергиям. Действительно, так как число комплексов N , перешедших в бездырочное состояние в момент времени t^* , пропорционально величине $N_0 \exp(-t^*/\tau)$ и для малых времен,

² Для системы, изображенной на рисунке, угол, определяющий направление 1-2 ϑ_b , связан с углом ϑ_0 соотношением $\sin \vartheta_b = (r_0/l) \sin \vartheta_0$. В модели точечного диполя эти углы равны друг другу.

согласно (8), $t^* = 2r_0(2E_1)^{1/2}/P_1$, то начальный участок энергетического распределения десорбированных ионов имеет вид

$$f_1(E_1) \sim N_0 \exp\left(-\frac{2\sqrt{2}r_0}{\tau P_1} \sqrt{E_1}\right). \quad (9)$$

Мы можем также ввести в рассмотрение усредненные по ансамблю характеристики, определяющие состояние «усредненного» иона 2 в момент релаксации

$$\begin{aligned} \langle r \rangle &= r_0 \left\{ 1 + \left[2W_0 - V_0 - \frac{1}{2} \vartheta_0^2 (2W_0 + V_0) \right] \tau^2 / 2r_0^2 \right\}, \\ \langle \dot{r} \rangle &= \left[2W_0 - V_0 - \frac{1}{2} \vartheta_0^2 (2W_0 + V_0) \right] \tau / 2r_0, \\ \langle \vartheta \rangle &= \vartheta_0 \left[1 + (W_0 + V_0) \tau^2 / 2r_0^2 \right], \\ \langle \dot{\vartheta} \rangle &= \vartheta_0 \tau (W_0 + V_0) / 2r_0^2, \\ \langle E_1 \rangle &= P_1^2 \tau^2 / 4r_0^2. \end{aligned} \quad (10)$$

При получении выражений (10) мы интегрировали соответствующие координаты и скорости, определяемые формулами (3), в пределах от нуля до бесконечности, что справедливо для не слишком больших τ (как и при выводе выражений (3), должны выполняться условия $\vartheta(\tau) \ll 1$ и $r(\tau) - r_0 \ll r_0$).

2. Траектория десорбируемого иона. Дальняя зона

Будем считать, что после распада двухдырочного состояния в первый момент на фрагменте устанавливается тот же заряд $z_1 < 0$, которым обладал ион 1 до электронной бомбардировки при $t < 0$, когда связь 1-2 еще не была нарушена. Далее полагаем, что вследствие одночастичных туннельных переходов электронов между металлом и фрагментом величина заряда на последнем уменьшается до значения $|z_1'| \simeq 0.1e$, что соответствует типичному заряду атомов газа, адсорбированных на тугоплавких подложках [14], причем этот процесс происходит за время порядка $10^{-16} - 10^{-15}$ с [8].

Такой сценарий второго этапа движения десорбируемого иона позволяет использовать для его описания в качестве нулевого приближения результаты работы [4], рассматривая влияние дипольного поля фрагмента в качестве возмущения. При этом под начальными условиями следует понимать значения координат и скоростей, определяемых формулами (3), в момент времени t^* . При этом, в частности, мы конкретизируем значение скорости v_0 , являвшейся в подходе авторов [4] параметром задачи. Тогда можно показать (см. Приложение 2), что в пределе $t \rightarrow \infty$ имеем

$$r_\infty = (\tilde{v} + C)t, \quad \varphi_\infty = \arccos(\tilde{v}_y/\tilde{v}) + \eta_\infty. \quad (11)$$

Здесь

$$\tilde{v}^2 = 2E_1 - V, \quad \tilde{v}_y^2 = v_y^2 - V, \quad C = W'/E_1,$$

где

$$V = z_2^2/2r \cos \vartheta, \quad W = 4z_1 z_2 \cos \vartheta/r^2$$

вычислены в момент распада двухдырочного состояния на фрагменте t^* ; штрих у W означает $z_1 = z_1'$ (см. Приложение 2). Используя выражение (3), легко показать, что

$$\begin{aligned} \tilde{v}_y^2 &= Q^2 t^{*2}/2r_0^2 - V_0 (1 + \vartheta_0^2/2), \\ 2E_{\text{kin}} &= \tilde{v}^2 = P^2 t^{*2}/2r_0^2 - V_0 (1 + \vartheta_0^2/2), \end{aligned} \quad (12)$$

где

$$Q^2 = W_0 \left[2W_0 - V_0 - \frac{1}{2} \vartheta_0^2 (12W_0 - V_0) \right],$$

$$P^2 = W_0 \left[2W_0 - V_0 - \frac{1}{2} \vartheta_0^2 (3W_0 - V_0) \right].$$

Выражения (11) получены в предположении инфинитного движения десорбируемого иона, для чего необходимо и достаточно выполнение неравенства

$$v_y^2 \geq V. \quad (13)$$

Отсюда следует, что для того чтобы десорбируемый ион мог уйти на бесконечность, необходимо и достаточно, чтобы время переключения фрагмента в бездырочное состояние удовлетворяло неравенству

$$t^* \geq t_c^* = r_0 \sqrt{\frac{2V_0}{W_0(2W_0 - V_0)}} \left[1 + \vartheta_0^2 \frac{7W_0 - V_0}{2(2W_0 - V_0)} \right]. \quad (14)$$

Критическая точка траектории иона, достижение которой на первом этапе движения гарантирует уход иона 2 на бесконечность, может быть определена по формулам (3) при $t = t_c^*$

$$r_c = r_0 \left[1 + \frac{1}{2} \frac{V_0}{W_0} \left(1 + \frac{1}{2} \vartheta_0^2 \frac{5W_0 - 2V_0}{2W_0 - V_0} \right) \right], \quad (15)$$

$$\vartheta_c = \vartheta_0 \left[1 + \frac{1}{2} \frac{V_0}{W_0} \frac{W_0 + V_0}{2W_0 - V_0} \right]. \quad (16)$$

Отметим, что при $t^* = t_c^*$ вертикальная составляющая скорости равна на бесконечности нулю и кинетическая энергия иона 2 определяется только скоростью v_x (см. (5)) при $t = t_c^*$

$$E_{\text{min}}^{\text{kin}} = \frac{9}{4} \vartheta_0^2 \frac{V_0 W_0}{2W_0 - V_0}. \quad (17)$$

Если теперь вновь перейти к задаче о N_0 комплексах, то из первоначального распределения $f_1 \sim \exp(-t^*/\tau)$ на бесконечно удаленный экран

попадает лишь та часть ионов, которая разогналась дипольным полем в течение времени $t^* \geq t_c^*$. При этом энергия ионов изменяется от E_{\min}^{kin} (см. (17)) до максимального значения $E_{1\text{max}}$ при $t^* \rightarrow \infty$, когда ион 2 уже ушел на бесконечность и не ощущает изменения потенциала фрагмента. Если t^* мало, то функция распределения f по энергиям E_{kin} для ионов, ушедших на бесконечность, имеет вид

$$f \sim \exp \left[-\frac{r_0 \sqrt{2}}{\tau P} \sqrt{2E_{\text{kin}} + V_0 \left(1 + \frac{1}{2} \vartheta_0^2 \right)} \right]. \quad (18)$$

Если следить за движением «усредненного» иона, то в формулах (11) нужно заменить \tilde{v}_y^2 и \tilde{v}^2 их усредненными значениями $\langle \tilde{v}^2 \rangle \equiv 2\langle E_1 \rangle - \tilde{V}$, $\langle \tilde{v}_y^2 \rangle \equiv \langle v_y^2 \rangle - \tilde{V}$, $\langle c \rangle \equiv \tilde{W}' / \langle E_1 \rangle$, где \tilde{V} и \tilde{W} вычислены для усредненных значений координат, определяемых формулами (10). Вместо условия (14) теперь получим

$$\tau \geq \tau_0 = t_c^* \sqrt{2}, \quad (19)$$

так как $\langle t^* \rangle = \tau$ и $\langle t^{*2} \rangle = 2\tau^2$. Условие (19) означает, что «усредненный» ион попадает на бесконечность, только если время жизни двухдырочного состояния на фрагменте превышает критическую величину τ_c . Отметим, что критическая точка траектории «усредненного» иона определяется, естественно, теми же формулами (15), (16). При $\tau = \tau_c$ кинетическая энергия «усредненного» иона $\langle E_{\text{kin}} \rangle$ на бесконечности есть E_{\min}^{kin} (см. (17)), а при $\tau \rightarrow \infty$ $\langle E_{\text{kin}} \rangle = E_{1\text{max}}$.

3. Численные оценки

Положим для простоты $l = 2d$, $z_2 = 1$ и $\vartheta_b = 30^\circ$. Из рисунка следует, что $r_0 = (d^2 + l^2 + 2dl \cos \vartheta_b)^{1/2} = 2.91$, $\vartheta_0 = 20.1^\circ$, $V_0 = 0.17$, $W_0 = 0.47 z_1$. Из (4) следует, что величина z_1 должна быть больше 0.41. В табл. 1 представлены зависимости ряда величин от z_1 . Видно, что использованное нами в разделе 1 приближение ближней зоны удовлетворительно выполняется для $z_1 \gtrsim 1$. В табл. 2 приведены характеристики движения десорбируемого иона в функции от времени жизни двухдырочного

Таблица 1

Зависимость характеристик начальной траектории иона от заряда фрагмента ($l = 2d = 2$, $\vartheta_b = 30^\circ$)

z_1	W_0	τ^*	δr^*	$\delta \vartheta^*$	φ_0 , град	φ^* , град
0.50	0.24	5.85	0.54	0.84	4.70	80.8
0.75	0.35	3.51	0.35	0.38	39.5	55.0
1.00	0.47	2.47	0.26	0.23	36.7	45.9
1.25	0.59	1.91	0.20	0.17	35.0	41.9
1.50	0.71	1.58	0.17	0.13	34.4	39.6

Примечание. $\delta r^* = ((r^*) - r_0) / r_0$, $\delta \vartheta^* = ((\vartheta^*) - \vartheta_0) / \vartheta_0$. Величины, помеченные «звездочкой», соответствуют $\tau = \tau^*$.

Таблица 2

Зависимость характеристик конечной траектории иона от времени жизни двухдырочного состояния на фрагменте ($l = 2d = 2$, $\vartheta_b = 30^\circ$)

τ	\tilde{v}_y	\tilde{v}	φ_∞ , град
2.5	0.09	0.31	73.1
2.6	0.15	0.34	63.8
2.7	0.20	0.38	58.2
2.8	0.23	0.41	55.9
2.9	0.27	0.44	52.1
3.0	0.30	0.47	50.3

состояния. В расчетах полагали $z'_1 = 0$. Так как время измеряется в относительных единицах

$$\bar{t} = 2.69 \cdot 10^{-15} (\bar{M} d^3)^{1/2} \quad (20)$$

(где \bar{M} — атомный вес, d — в ангстремах, \bar{t} — в секундах), то единица измерения скорости (в $\text{\AA}/\text{с}$) есть

$$\bar{v} = 0.37 \cdot 10^{15} / (\bar{M} d)^{1/2}. \quad (21)$$

Для иона кислорода O^+ , например, при $d = 1.5 \text{ \AA}$ имеем $\bar{v} = 0.76 \times 10^4 \text{ м/с}$, $\bar{E} = M\bar{v}^2/2 = 4.76 \text{ эВ}$. Соответственно $\tau_c = 4.89 \cdot 10^{-14} \text{ с}$. Для $\tau \equiv 3$ (т.е. $5.93 \cdot 10^{-14} \text{ с}$) имеем $(\langle \tilde{v}^2 \rangle)^{1/2} = 0.35 \cdot 10^4 \text{ м/с}$, $\langle E_{\text{kin}} \rangle = 1.05 \text{ эВ}$. Эти оценки представляются вполне разумными.

Из (9) получим $E_{\text{min}}^{\text{kin}} \simeq 0.23\vartheta_0^2$. Таким образом, нижний предел энергетического распределения десорбированных ионов может, по-видимому, служить для определения угла наклона связи 1-2 в предположении, что длины связей (d , l), а также зарядовые состояния ионов 1 и 2 адсорбционного комплекса известны.

В настоящей работе мы предложили простую схему описания движения десорбированного иона, учитывающую релаксацию локального поля фрагмента. В дальнейшем в рамках этой же схемы мы планируем исследовать влияние эффектов ренейтрализации иона 2 и его нулевых колебаний в состоянии, предшествующем разрыву связи, на угловые и энергетические распределения десорбированных ионов.

В работе был сделан ряд упрощений, главными из которых являются предположения о том, что за время t^* (или τ) ион проходит лишь малое расстояние и что после релаксации заряд фрагмента мал. Именно эти приближения и позволили сформулировать задачу аналитически. Для проверки справедливости сделанных приближений мы предполагаем построить расчетную схему, свободную от вышеперечисленных допущений.

В заключение автор считает своим приятным долгом поблагодарить В.Н.Агеева за предложение темы и постоянный интерес к работе и Н.Д.Потехину и А.В.Лакрисенко за обсуждение результатов.

Для первого этапа движения в качестве нулевого приближения при малых ϑ рассмотрим решение уравнения для вертикального движения иона

$$\ddot{r} = \frac{4z_1 z_2}{r^3} - \frac{z_2^2}{4r^2} \quad (\text{П1.1})$$

с начальными условиями $r(0) = r_0$, $\dot{r}(0) = v_0$. Для инфинитного движения ($\bar{v}^2 = v_0^2 + 4z_1 z_2 / r_0^2 - z_2^2 / 2r_0 > 0$) имеем

$$t = \frac{(R - v_0 r_0)}{\bar{v}^2} - \frac{z_2^2}{4\bar{v}^3} \ln \frac{2\bar{v}R + 2\bar{v}^2 r + z_2^2 / 2}{2\bar{v}v_0 r_0 + 2\bar{v}^2 r_0 + z_2^2 / 2}, \quad (\text{П1.2})$$

где

$$R = [\bar{v}^2 r^2 + z_2^2 r / 2 - 4z_1 z_2]^{1/2}.$$

В дальнейшем положим $v_0 = 0$. При малых временах величина r может быть представлена в виде

$$r = r_0 + \frac{2W_0 - V_0}{4r_0^2} t^2, \quad (\text{П1.3})$$

где введены параметры W_0 и V_0 , определенные выше.

При $t \rightarrow 0$ решение второго уравнения системы (2), а именно

$$r_0^2 \ddot{\vartheta} = \frac{W_0 + V_0}{2} \vartheta, \quad (\text{П1.4})$$

имеет вид (см., например, [15])

$$\vartheta = C_1 \operatorname{ch} \left(t \sqrt{\frac{W_0 + V_0}{2r_0^2}} \right) + C_2 \operatorname{sh} \left(t \sqrt{\frac{W_0 + V_0}{2r_0^2}} \right), \quad (\text{П1.5})$$

где C_1 и C_2 — коэффициенты. Для малых t получаем отсюда второе из выражений (3). Затем, вводя поправку на угол в (П1.1), найдем первое из выражений (3).

Для проверки полученных результатов удобно использовать закон сохранения энергии

$$\dot{r}^2 + r^2 \dot{\vartheta}^2 = v_0^2 + 4z_1 z_2 \left(\frac{\cos \vartheta_0}{r_0^2} - \frac{\cos \vartheta}{r^2} \right) - \frac{z_2^2}{2} \left(\frac{1}{r_0 \cos \vartheta_0} - \frac{1}{r \cos \vartheta} \right). \quad (\text{П1.6})$$

Подстановка в (П1.6) формул (3) приводит к тождеству.

Таблица 3

Применимость дипольного приближения

l	$z_{1c}^{\text{точн}}$	$z_{1c}^{\text{дип}}$	δz_{1c}
d	0.19	0.25	0.30
$2d$	0.33	0.38	0.15
$3d$	0.47	0.50	0.06
$4d$	0.60	0.63	0.05

Примечание. $\delta z_{1c} = (z_{1c}^{\text{дип.}} - z_{1c}^{\text{точн.}}) / z_{1c}^{\text{точн.}}$.

Оценим применимость дипольного приближения. Для случая $\vartheta_0 = 0$ легко показать, что условие инфинитного движения имеет вид

$$\frac{4z_1 z_2}{r_0^2 - 1} > \frac{z_2^2}{2r_0}, \quad (\text{П1.7})$$

откуда находим точное неравенство

$$z_1 > z_{1c}^{\text{точн}} = \frac{z_2 l}{8} \frac{2d + l}{d(d + l)}, \quad (\text{П1.8})$$

тогда как в дипольном приближении имеем

$$z_1 > z_{1c}^{\text{дип}} = z_2 \frac{d + l}{8}. \quad (\text{П1.9})$$

Результаты оценок, приведенные в табл. 3, показывают, что при $l \geq 2d$ дипольное приближение вполне приемлемо.

ПРИЛОЖЕНИЕ 2

Для второго этапа движения в качестве нулевого приближения следует взять систему уравнений вида

$$\ddot{x} = 0, \quad \ddot{y} = -z_2^2/4y^2 \quad (\text{П2.1})$$

с начальными условиями

$$x(0) = x_\tau, \quad y(0) = y_\tau, \quad \dot{x}(0) = v_{x\tau}, \quad \dot{y}(0) = v_{y\tau},$$

где индекс τ соответствует значению переменной t к моменту начала второго этапа движения (время отсчитывается от момента t^*).

Решение для инфинитного движения есть

$$\begin{aligned} v_{x\tau} t &= x - x_\tau, \\ \bar{v}_{y\tau} t &= yR - y_\tau R_\tau + \frac{z_2^2}{4\bar{v}_{y\tau}^2} \ln \frac{(R-1)(R_\tau+1)}{(R+1)(R_\tau-1)}, \\ R &= \sqrt{1 + z_2^2/2y\bar{v}_{y\tau}^2}, \quad R_\tau = \sqrt{1 + z_2^2/2y_\tau\bar{v}_{y\tau}^2}, \\ \bar{v}_{y\tau}^2 &= v_{y\tau}^2 - z_2^2/2y_\tau. \end{aligned} \quad (\text{П2.2})$$

Перейдем к полярным координатам и будем искать поправки на дипольное поле фрагмента в виде

$$\begin{aligned} r &= \bar{r} + \rho, \quad \vartheta = \bar{\vartheta} + \eta, \\ \bar{r} &= v_\tau t, \quad v_\tau^2 = v_{x\tau}^2 + \bar{v}_{y\tau}^2, \quad \bar{\vartheta} = \arccos(\bar{v}_{y\tau} t / \bar{r}). \end{aligned} \quad (\text{П2.3})$$

Получаем систему уравнений

$$\ddot{\rho} + \frac{3B'\bar{v}_{y\tau}}{v_\tau t^4} \rho + \frac{B'v_{x\tau}}{t^3} \eta = \frac{B'\bar{v}_{y\tau}}{t^3}, \quad (\text{П2.4})$$

$$t\ddot{\eta} + 2\dot{\eta} - \frac{B'\bar{v}_{y\tau}}{2v_{\tau}t^3}\eta + \frac{3B'v_{x\tau}}{2v_{\tau}^2t^4}\rho = \frac{B'v_{x\tau}}{2v_{\tau}t^3}, \quad (\text{П2.5})$$

где $B' = 4z_1'z_2/v_{\tau}^4$. Отбрасывая в (П2.5) члены порядка t^{-4} , получим общее решение однородного уравнения в виде (см. [15])

$$\eta = C_1' \operatorname{ch}\left(\frac{\sqrt{B}}{t}\right) + C_2' \operatorname{sh}\left(\frac{\sqrt{B}}{t}\right), \quad (\text{П2.6})$$

где $B = B'\bar{v}_{y\tau}/2v_{\tau}$, C_1' и C_2' — коэффициенты. Для больших времен с учетом частного решения неоднородного уравнения найдем

$$\eta = C_1' + C_2'\sqrt{B}/t + Bv_{x\tau}/2\bar{v}_{y\tau}t. \quad (\text{П2.7})$$

Подставляя η в (П2.4), найдем решение однородного уравнения в виде

$$\rho = t \left(C_1'' \cos\left(\frac{\sqrt{6B}}{t}\right) + C_2'' \sin\left(\frac{\sqrt{6B}}{t}\right) \right). \quad (\text{П2.8})$$

Теперь легко показать, что главная поправка $\rho = tC_1''$. Таким образом, можно записать

$$r = (v_{\tau} + C)t, \quad \vartheta = \arccos(\bar{v}_{y\tau}/v_{\tau}) + \eta, \quad (\text{П2.9})$$

что при переходе к усредненным обозначениям, введенным в разделе 1, совпадает с формулами (10). Величина C может быть найдена из закона сохранения энергии

$$C = 2z_1'z_2 \frac{\cos\vartheta_{\tau}}{r_{\tau}^2} \frac{1}{v_{\tau}^2}. \quad (\text{П2.10})$$

Величина $\eta \sim z_1$ в этом подходе остается неопределенной.

Список литературы

- [1] Ageev В.Н., Бурмистрова О.П., Кузнецов Ю.А. // УФН. 1989. Т. 158. № 3. С. 389–420.
- [2] Ramsier R.D., Yates J.T., Jr. // Surf. Sci. Rep. 1991. V. 12. N 6–8. P. 244–379.
- [3] Clinton W.L. // Surf. Sci. 1981. V. 112. N 3. P. 1791–1796.
- [4] Mišković Z., Vukanić J., Madey T.E. // Surf. Sci. 1984. V. 141. N 1. P. 285–300.
- [5] Mišković Z., Vukanić J., Madey T.E. // Surf. Sci. 1986. V. 169. N 2/3. P. 405–413.
- [6] Dong C.Z., Norlander P., Madey T.E. // Desorption Induced by Electronic Transitions (DIET IV) / Ed. G.Betz and P.Varge. Springer, Berlin, 1990. P. 34–40.
- [7] Knotek M.L., Feibelman P.J. // Phys. Rev. Lett. 1978. V. 49. N 14. P. 964–967.
- [8] Feibelman P.J., Knotek M.L. // Phys. Rev. B. 1978. V. 18. N 12. P. 6534–6539.
- [9] Feibelman P.J. // Surf. Sci. 1981. V. 102. N 2/3. P. L51–L53.
- [10] Ageev В.Н., Якшинский Б.В. // ФТТ. 1985. Т. 27. № 1. С. 99–105.
- [11] Ageev В.Н., Бурмистрова О.П., Губанов А.И., Ткачук М.Н., Якшинский Б.В. // Поверхность. 1986. № 12. С. 30–38.
- [12] Ageev V.N., Burmistrova O.P., Yakshinskii B.V. // Surf. Sci. 1988. V. 194. N 1/2. P. 101–114.
- [13] Antoniewicz P.R. // Phys. Rev. B. 1980. V. 21. N 9. P. 3811–3815.
- [14] Браун О.М., Медведев В.К. // УФН. 1989. Т. 157. № 4. С. 631–666.
- [15] Камке Э. Справочник по обыкновенным дифференциальным уравнениям. М.: Наука, 1971. 576 с.

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

Поступило в Редакцию
21 апреля 1993 г.