11

РАССЕЯНИЕ БЫСТРЫХ МОЛЕКУЛЯРНЫХ ИОНОВ ПОВЕРХНОСТЬЮ ТВЕРДОГО ТЕЛА БЕЗ ДИССОЦИАЦИИ

В. Н. Кирикашвили, О. Б. Фирсов

Изучен вопрос о двухкратном рассеянии гомоядерных двухатомных молекулярных ионов поверхностью твердого тела. В разложении $\Delta\theta=\theta_1-\theta_2$ (θ_1, θ_2 — углы рассеяния первого и второго атомов молекулярного иона соответственно) учтены члены второго и третьего порядка. Получена формула нераспада молекулярных ионов при двухкратном рассеянии.

В последнее время для анализа состава и структуры вещества уделяется внимание исследованию процессов, происходящих при бомбардировке твердого тела быстрыми молекулярными ионами.

При взаимодействии молекулярных ионов с атомами поверхности твердого тела часть молекулярных ионов диссоциирует. Как известно, условие диссоциации

$$E_{\text{от}} \geqslant E_{\text{дис}}, \tag{1}$$

где $E_{\text{от}}$ и $E_{\text{дис}}$ — энергия относительного движения и энергия диссоциации молекулярного иона соответственно.

В экспериментах [1, 2] обнаружено, что в рассеянном пучке молекулярных ионов, несмотря на то что их энергия десятки киловольт, есть недиссоциированные молекулярные ионы. В работах [3, 4] это объясняется последовательными коррелированными столкновениями атомов иона с атомами поверхности и получена вероятность рассеяния молекулярных ионов без диссоциации при однократном и двухкратном столкновениях с атомами поверхности. Более детальный теоретический расчет проведен в работах [5, 6].

В работе [5] рассматривается бомбардировка поверхности (100) кристалла меди Cu пучком молекулярных ионов N_2^+ с энергией 30 кэВ. Отражение ионов почти зеркальное, полный угол рассеяния $\theta=2\alpha=22°$, где α — угол скольжения. Угловая ширина окна детектора ± 1.5. Вероятность рассеяния без диссоциации в результате однократного и двухкратного рассеяния дается формулами (2) и (3) соответственно

$$P=\frac{\pi E_{\text{дис}}}{4E^2R^2\theta^3}, \tag{2}$$

$$P=\frac{\pi A E_{\text{дис}}}{16E^2R^2\left(\frac{\theta_0}{2}\right)^3\left[1+\frac{1}{2}d\left(\frac{2E}{\pi A}\right)^{1/2}\left(\frac{\theta_0}{2}\right)^{3/2}\right]\left[d\left(\frac{2E}{\pi A}\right)^{1/2}\left(\frac{\theta_0}{2}\right)^{3/2}-1\right]}, \tag{3}$$

где $E_{\text{дис}}$ — энергия диссоциации молекулярного иона, E — энергия одного атома иона, R — расстояние между атомами иона, θ — угол однократного рассеяния, $\theta_0=2\theta$ — полный угол двухкратного рассеяния, d — расстояние между атомами поверхности.

Потенциал взаимодействия между атомами иона с зарядом Z_1 и атомами поверхности с зарядом Z_2 взят в виде потенциала Томаса—Ферми—Фирсова

$$U = \frac{A}{r^2}, \tag{4}$$

где

$$A = \frac{0.44 Z_1 Z_2}{(Z_1^{2/3} + Z_2^{2/3})^{1/2}}.$$

Из формулы (3) видно, что при определенном угле

$$\theta_0 = \frac{2}{d^{2/3}} \left(\frac{\pi A}{2E} \right)^{1/3} \tag{5}$$

вероятность стремится к бесконечности, а это в эксперименте не наблюдается (зависимость $P(\theta)$ монотонна). В работе [5] этот эффект объясняется, во-первых, тем, что в разложении $\Delta\theta = \theta_1 - \theta_2$ (θ_1, θ_2 — углы рассеяния первого и второго атомов иона) не учитываются члены второго и третьего порядка, и, во-вторых, тем, что при регистрации ионов существует угловая ширина ± 1.5 детектора.

В работе [6] в разложении $\Delta\theta$ учтены члены второго и третьего порядка и получено следующее значение вероятности нераспада молекулярных ионов:

$$P = \frac{1}{\pi \gamma_4} \int_{x_1}^{x_2} \left[\left(\frac{\theta_0}{\theta} \right)^2 - (\gamma_1 x + \gamma_2 x^2 + \gamma_3 x^3)^2 \right]^{1/2} dx, \tag{6}$$

где $x = \psi \cos \varphi$, ψ и φ — полярный и азимутальный углы ориентации оси молекулярного иона соответственно (рис. 1)

$$\gamma_1 = -2(1-z)h, \quad \gamma_2 = 3(1-z)(1-2z)h^2,$$

$$\gamma_3 = -(1-2z)(8z^2 - 17z + 4)h^2, \quad \gamma_4 = \left(1 + \frac{1}{2} z\right) h,$$

где $h = (2Rz)/(\theta d)$, $z = (\theta/\theta_k)^{3/2}$; θ_k — значение угла, при котором $(\partial\theta)/(\partial\rho) = 0$, ρ — прицельный параметр.

Вычисляемая формулой (6) вероятность не обращается в бесконечность. Но по соображениям симметрии в (6) должен отсутствовать квадратный член $\gamma_2 x^2$, поскольку, меняя знак $\Delta\rho$, менялось бы значение скорости

$$\Delta V \approx V \Delta\theta = V \left(\frac{\partial\theta}{\partial\rho} \Delta\rho + \frac{1}{2} \frac{\partial^2\theta}{\partial\rho^2} \Delta\rho^2 + \frac{1}{6} \frac{\partial^3\theta}{\partial\rho^3} \Delta\rho^3 \right),$$

$$\Delta\rho \approx \frac{R}{2} \sin\psi \sin\varphi \ll \rho.$$

На самом деле при замене $\Delta\rho \to -\Delta\rho$ только переставляем атомы молекулярного иона, что не может вызвать изменение скорости.

В этой работе будут проведены вычисления, показывающие отсутствие квадратичных членов $\gamma_2 x^2$, и будет получена формула вероятности нераспада молекулярных ионов после двухкратного рассеяния с учетом второго и третьего членов в разложении $\Delta\theta$.

При малых углах рассеяния почти вся приобретенная энергия (7) переходит во вращения

$$E_{\text{от}} = \frac{\mu V_{\text{от}}^2}{2}, \tag{7}$$

где μ — приведенная масса молекулярного иона, $V_{\text{от}}$ — скорость относительного движения

$$V_{\text{от}}^2 = V_x^2 + V_y^2,$$

где V_x и V_y — проекции относительной скорости.

Если ось молекулярного иона совпадает с направлением движения ($\psi = 0$), т. е. оба атома рассеиваются на один и тот же угол θ (пренебрегаем отдачей атомов поверхности, т. е. считаем их массу бесконечной), то изменение скорости V атома молекулярного иона равняется

$$\Delta V = V \sin\theta \approx V\theta, \quad \Delta\mathbf{V} \perp \mathbf{V},$$

а относительная скорость (рис. 2) $V_{\text{от}}=0$. Молекулярный ион летит перпендикулярно плоскости чертежа XOY, ab — проекция оси молекулярного иона на плоскость XOY. Угол ψ между осью молекулярного иона и направлением движения принимается малым и приближенно рассматривается как вектор $\boldsymbol{\psi}=(\psi_x, \psi_y)$, $\psi_x=\psi\cos\varphi$, $\psi_y=\psi\sin\varphi$, ψ и φ — полярный и азимутальный углы ориентации оси иона.

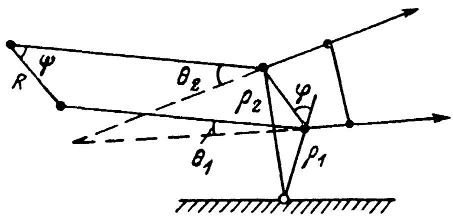


Рис. 1. Схема рассеяния молекулярного иона на атоме поверхности.

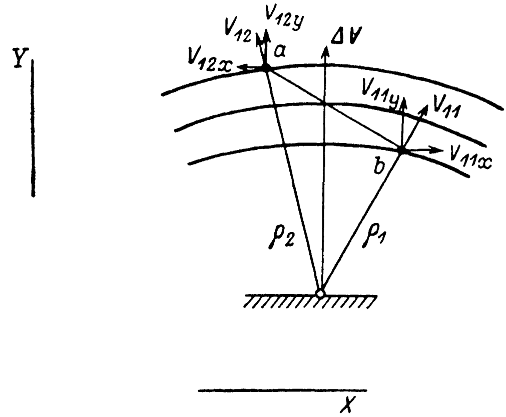


Рис. 2. Схема рассеяния молекулярного иона на атоме поверхности в плоскости XOY.

Если $\psi\neq 0$, то проекции относительной скорости после первого столкновения равняются (рис. 2)

$$V_{1x} = \frac{VR}{2\rho_1}\theta(\rho_1)\sin\psi_1\cos\varphi_1 + \frac{VR}{2\rho_1}\sin\psi_1\cos\varphi_1,$$

$$V_{1x} = \frac{VR}{2\rho_1}\theta(\rho_1)\sin\psi_1\cos\varphi_1, \tag{8}$$

$$V_{1y} = V\left[\left(\frac{\partial\theta}{\partial\rho_1} + \frac{\partial\theta}{\partial\rho_1}\frac{R}{2}\sin\psi_1\cos\varphi_1\right) - \left(\frac{\partial\theta}{\partial\rho_1} - \frac{\partial\theta}{\partial\rho_1}\frac{R}{2}\sin\psi_1\sin\varphi_1\right)\right],$$

$$V_{1y} = VR\frac{\partial\theta}{\partial\rho_1}\sin\psi_1\sin\varphi_1. \tag{9}$$

Пока молекулярный ион долетит до второго атома поверхности, ион успеет повернуться на определенный угол с угловой скоростью ω

$$\omega^2 = \omega_x^2 + \omega_y^2, \quad \omega_x = \frac{V_x}{R}, \quad \omega_y = \frac{V_y}{R}. \tag{10}$$

Тогда угол между осью молекулярного иона и направлением движения для второго столкновения равняется

$$\boldsymbol{\psi}_2 = \boldsymbol{\psi}_1 + \boldsymbol{\omega} t, \tag{11}$$

где $t=d/V$ — время пролета до второго атома поверхности, d — расстояние между атомами поверхности.

При замене $\boldsymbol{\psi}_1$ на $-\boldsymbol{\psi}_1$ $\Delta\rho$ переходит в $-\Delta\rho$, V_{1x} и V_{1y} меняют знак (рис. 1, 2), соответственно $\boldsymbol{\omega}\to-\boldsymbol{\omega}$, $\boldsymbol{\psi}_2\to-\boldsymbol{\psi}_2$. Поэтому в разложении ψ_2 по степеням ψ_1 должны присутствовать только члены с нечетными степенями ψ_1.

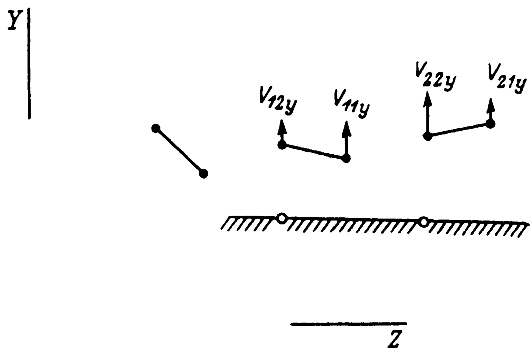
После второго столкновения молекулярный ион может начать поворачиваться в другую сторону, поскольку относительный импульс p_{2y} может оказаться направленным противоположно p_{1y} (рис. 3)

$$V_{1y} = V_{11y} - V_{12y} > 0,$$
$$V_{2y} = V_{21y} - V_{22y} < 0.$$

Получается, что при повторном рассеянии могут ликвидироваться последствия первого рассеяния и при определенном угле рассеяния (5) $V_y = V_{1y} + V_{2y} = 0$, что и дает бесконечность вероятности (3). Поэтому в разложении по ψ_y остаются только члены нечетного порядка. Следует учесть члены третьего порядка по ψ_y.

Относительная скорость $V_{1x} > 0$, $V_{2x} > 0$, поэтому в разложении по ψ_x можно ограничиться только первым членом, так как $V_x = V_{1x} + V_{2x} \neq 0$ (рис. 4).

Для потенциала (4), используя разложения функций $\sin\psi\cos\varphi$ и $\sin\psi\sin\varphi$



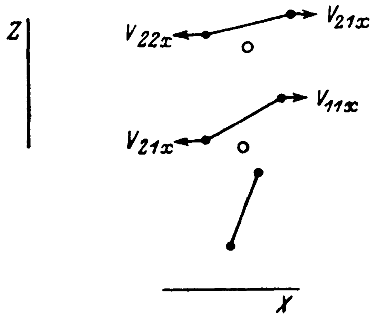


Рис. 3. Схема двухкратного рассеяния молекулярного иона на поверхности в плоскости YOZ.

Рис. 4. Схема двухкратного рассеяния молекулярного иона на поверхности в плоскости XOZ (вид сверху).

до третьего члена, с помощью (8) и (9) получаем для столкновения с первым и вторым атомом поверхности соответственно

$$V_{1(2)x} = \frac{VR}{\rho_{1(2)}}\theta(\rho_{1(2)})\sin\psi_{1(2)}\cos\varphi_{1(2)} = \frac{\pi AVR}{2E\rho^3_{1(2)}}\psi_{1(2)x},$$

$$V_{1(2)y} = V\left[\frac{\partial\theta}{\partial\rho_{1(2)}}R\sin\psi_{1(2)}\sin\varphi_{1(2)} + \frac{1}{24}\frac{\partial^3\theta}{\partial\rho^3_{1(2)}}R^3\sin^3\psi_{1(2)}\sin^3\varphi_{1(2)}\right],$$

$$V_{1(2)y} = \frac{\pi AVR}{2E\rho^3_{1(2)}}\left[-2\psi_{1(2)y} + \left(\frac{1}{3} - \frac{R^2}{\rho^2_{1(2)}}\right)\psi^3_{1(2)y}\right], \tag{12}$$

где ψ_{2x} и ψ_{2y} вычисляется из формул (10) и (11).

В формулах (12) использовано выражение для малых углов рассеяния для потенциала (4)

$$\theta = \pi A/2E\rho^2,$$

где E — энергия одного атома молекулярного иона.

Конечное значение относительной энергии молекулярного иона равняется

$$E_{\text{от}} = \frac{\mu(V_x^2 + V_y^2)}{2} = C_1^2\psi_x^2 + C_2^2\psi_y^2 - 2C_2C_3\psi_y^4 + C_3^2\psi_y^6,$$

где

$$V_x = V_{1x} + V_{2x}, \quad V_y = V_{1y} + V_{2y},$$

$$C_1 = \frac{\sqrt{m}\,VR}{2\sqrt{B}}\left[\theta^{3/2} + (\theta_0 - \theta)^{3/2}\left(1 + \frac{d}{\sqrt{B}}\theta^{3/2}\right)\right], \quad B = \frac{\pi A}{2E},$$

$$C_2 = \frac{\sqrt{m}\,VR}{\sqrt{B}}\left[\left(\frac{2d}{\sqrt{B}}\theta^{3/2} - 1\right)(\theta_0 - \theta)^{3/2} - \theta^{3/2}\right],$$

$$C_3 = \frac{\sqrt{m}\,VR}{2\sqrt{B}}\left[\frac{R^2\theta^{5/2}}{B} - \frac{2dR^2\theta^{5/2}}{B^{3/2}}(\theta_0 - \theta)^{3/2} + \frac{R^2}{B}(\theta_0 - \theta)^{5/2}\left(1 - \frac{2d}{\sqrt{B}}\theta^{3/2}\right)^3 - \right.$$

$$\left. - \frac{\theta^{3/2}}{3} + \frac{2}{3}\frac{d}{\sqrt{B}}\theta^{3/2}(\theta_0 - \theta)^{3/2} - \frac{1}{3}(\theta_0 - \theta)^{3/2}\left(1 - \frac{2d}{\sqrt{B}}\theta^{3/2}\right)^3\right].$$

Чтобы вычислить вероятность нераспада молекулярных ионов после двухкратного рассеяния, сперва надо найти тот телесный угол, в пределах которого могут меняться ψ_x и φ_y, так чтобы молекулярный ион не распался. Для этого ψ_x и ψ_y должны удовлетворять условию

$$E_{\text{от}} = C_1^2\psi_x^2 + C_2^2\psi_y^2 - 2C_2C_3\psi_y^4 + C_3^2\psi_y^6 \leqslant E_{\text{дис}}. \qquad (13)$$

Тогда телесный угол, в котором не происходит диссоциация молекулярных ионов, равняется

$$\Omega = 4\int\limits_0^{\psi_y^0} \frac{1}{C_1^2}\left(E_{\text{дис}} - C_2^2\psi_y^2 + 2C_2C_3\psi_y^4 - C_3\psi_y^6\right)^{1/2} d\psi_y, \qquad (14)$$

где ψ_y^0 — корень подынтегрального выражения, а вероятность этого процесса

$$P = \frac{\Omega}{2\pi}. \qquad (15)$$

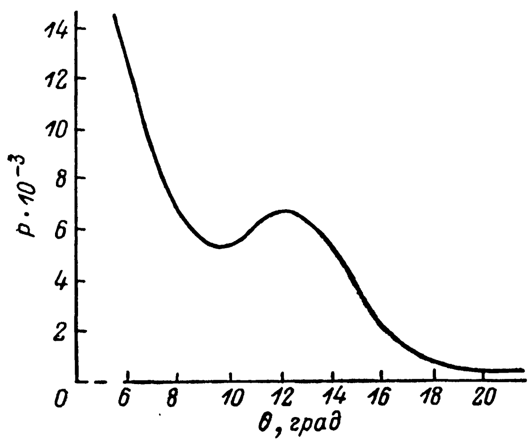


Рис. 5. Зависимость вероятности двухкратного рассеяния без диссоциации от угла рассеяния.

Для вычисления интеграла (14) рассмотрим два крайних случая: 1) $C_2 = 0$, тогда из (14) получаем

$$\Omega \approx 3.6E_{\text{дис}}^{2/3}/C_1C_3^{1/3} = 3.6\psi_x^0\psi_y^0, \qquad (16)$$

2) $C_3 = 0$, из (14) получаем

$$\Omega = \pi E_{\text{дис}}/C_1C_2 = \pi\psi_x^0\psi_y^0, \qquad (17)$$

где ψ_x^0 и ψ_y^0 являются решениями уравнения (13) при $\psi_y = 0$ и $\psi_x = 0$ соответственно

$$E_{\text{дис}} = C_1^2\psi_x^{02},$$

$$E_{\text{дис}} = C_2^2\psi_y^{02} - 2C_2C_3\psi_y^{04} + C_3^2\psi_y^{06}, \qquad (18)$$

ψ_x^0 и ψ_y^0 — полуоси квазиэллипсов.

Поскольку разница между (16) и (17) малая, то для нахождения телесного угла можем использовать формулу

$$\Omega = \pi\psi_x^0\psi_y^0. \qquad (19)$$

После решения (18) с помощью формул (19) и (15) находим вероятность нераспада молекулярных ионов после двухкратного рассеяния.

В случаях, когда $\theta_0 = 2\theta$, график $P(\theta)$ не имеет бесконечность, но в интервале θ от 5 до 8° на графике имеется небольшой горб, который не получается в эксперименте. Даже если усреднить по угловой ширине детектора ± 1.5, то небольшой горб все равно остается (рис. 5). Чтобы совпали графики, построенные по экспериментальным данным и по теоретическим вычислениям, по-видимому, надо учитывать столкновение молекулярных ионов с атомами соседних рядов кристалла.

Список литературы

[1] *Молчанов В. А., Сошка В.* // ЖТФ. 1965. Т. 35. Вып. 5. С. 963.
[2] *Eckstein W., Verbeek H., Datz S.* // Appl. Phys. Lett. 1975. Vol. 27. P. 527—528.
[3] *Битенский И. С., Парилис Э. С.* // Тр. Всесоюз. конф. по взаимодействию атомных частиц с твердым телом. Ч. I. Минск, 1978. С. 105.
[4] *Битенский И. С., Парилис Э. С.* // ЖТФ. 1981. Т. 51. Вып. 9. С. 1798—1803.
[5] *Balashova L. L., Dodonov A. J., Firsov O. B.* et al. // Rad. Eff. 1983. Vol. 77. P. 67—77.
[6] *Битенский И. С., Парилис Э. С.* // Поверхность. 1985. № 2. С. 25—37.

Тбилисский государственный университет

Поступило в Редакцию 23 февраля 1990 г.