

01;05.2;07;11;12

Прямая фотодесорбция ионов с поверхности кристалла

© В.Н. Стрекалов

Московский государственный технический университет "СТАНКИН"

Поступило в Редакцию 5 января 1997 г.

В работе изучается модель прямой фотодесорбции ионов с поверхности кристалла, напоминающая ионизацию атома при внешнем фотоэффекте. В основе модели лежит представление о квазиклассическом ионе, движение которого в приповерхностной потенциальной яме описывается волновым пакетом. Выбор волновой функции в виде пакета можно обосновать с помощью вариационного принципа, найдя параметры пакета. Их можно также подобрать, используя известные экспериментальные данные. Такие методы традиционны для физики твердого тела. Они позволяют не интересоваться видом и величиной оператора взаимодействия иона с поверхностью кристалла.

Ознакомление с электронными банками данных показывает, что имеется значительное число работ, посвященных исследованию неупругих процессов в твердых телах, вызываемых излучением лазера. Среди них — фотодесорбция примесей и собственных атомов с различных поверхностей, холодное фотоиспарение, фотоабляция и другие процессы, имеющие похожую физическую природу. Большая часть публикаций связана с изложением экспериментальных результатов. Теоретическое описание таких процессов развито все еще слабо. Впрочем, сформулировать теоретические модели неупругих процессов на поверхности не очень сложно [1], но провести для них квантово-механические расчеты корректно и до конца обычно не удается по двум основным причинам.

1. Неизвестен вид оператора взаимодействия иона с поверхностью кристалла, а модельные гамильтонианы не в состоянии описать возможные диффузионноподобные процессы единым образом.

2. Не доказано, что модельный гамильтониан можно рассматривать как малое возмущение и использовать теорию возмущений.

Попытаемся преодолеть часть этих трудностей следующим образом. Учтем, что движение тяжелого иона квазиклассично, т. е. ион можно изобразить волновым пакетом. Это ценная информация, позволяющая

выбрать пробную волновую функцию, параметры которой (включая не только дисперсии размеров, но также собственные значения энергии и глубину потенциальной ямы, в которой связан ион) определяются с помощью вариационного принципа [2]. Можно, однако, не заниматься расчетом этих параметров, что представляет собой отдельную большую задачу, а взять их из эксперимента. Если также учесть, что пакет с минимальной неопределенностью имеет одинаковый вид независимо от типа и величины воздействия на частицу [2,3], то невозмущенную задачу "кристалл + ион" можно считать решенной без конкретизации оператора взаимодействия иона с кристаллом.

Похожие методы часто используются в физике твердого тела. В этом отношении можно упомянуть выбор функций Блоха для квазиэлектронов, использование экспериментальных данных о диэлектрической проницаемости, эффективной массе, ширине запрещенной зоны и т. п.

Имея приближенные "вариационные" волновые функции невозмущенной системы, можно последовательно учесть все малые возмущения и провести описание различных диффузионноподобных процессов. Ранее похожий метод использовался, например, в работах [4,5].

Применим предложенный метод для нахождения вероятности прямой фотодесорбции ионов в лазерном поле. Будем считать, что десорбция происходит в результате поглощения ионом кванта света с энергией, превышающей энергию связи иона $\varepsilon_{св}$ с поверхностью, после чего ион переходит в свободное состояние. Гамильтониан, соответствующий такой схеме, имеет вид

$$H = H_0 + V_1 + V_2. \quad (1)$$

Здесь H_0 — оператор кинетической энергии иона, имеющего массу M , эффективный заряд Ze ; оператор импульса иона обозначим как \hat{P} . Слагаемое V_1 — оператор потенциальной энергии иона, учитывающий все взаимодействия иона с собственными атомами кристалла. Величина и вид V_1 неизвестны, но именно этот оператор определяет энергию связи или глубину потенциальной ямы, в которой связан ион, а также среднеквадратичные дисперсии a_n , входящие в волновые пакеты и указывающие размеры иона в различных состояниях. Перечисленные величины берутся из эксперимента, поэтому конкретизировать вид V_1 нет необходимости.

Оператор взаимодействия иона с электрическим полем световой волны имеет обычную форму [6]

$$V_2 \frac{Ze}{M\omega} \hat{\mathbf{P}} \mathbf{E}_0 \cos \omega t, \quad (2)$$

причем поле считается нерезонансным и действует на ион как на бесструктурную частицу; E_0 и ω — амплитуда и частота поля.

При фотодесорбции возможны внутриионные электронные переходы и, в частности, перезарядка ионов. Но эти процессы описываются старшими порядками теории возмущений и менее вероятны, чем прямой фотодесорбционный переход.

Оператор (2) позволяет найти вероятность фотодесорбционного перехода уже в первом порядке теории возмущений. Как обычно [6],

$$dw_{kn} = \frac{2\pi}{\hbar} \left| \langle k | \frac{Ze}{2M\omega} \hat{\mathbf{P}} \mathbf{E}_0 | n \rangle \right|^2 d\rho(E_n), \quad (3)$$

где

$$d\rho(E_n) = \frac{V}{(2\pi\hbar)^3} P_n M d\Omega. \quad (4)$$

Здесь $|n\rangle$ и $|k\rangle$ — начальное (связанное) состояние иона и его конечное (свободное) состояние, Ω — угловые переменные, V — нормировочный объем.

Волновая функция начального состояния учитывает движение иона внутри кристалла к поверхности с импульсом P_n , поэтому пакет, соответствующий начальному состоянию, имеет вид

$$\Psi_n(\mathbf{R}) = (2\pi a_n^2)^{-3/4} \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \mathbf{P}_n \mathbf{R} - \frac{R^2}{4a_n^2} \right\}. \quad (5)$$

Факт "падения" иона на поверхность внутри кристалла определяется знаком произведения $\mathbf{P}_n \mathbf{R}$, что должно учитываться при интегрировании по углам Ω .

После несложных преобразований, фактически повторяющих расчеты вероятности фотоионизации атома [6], можно найти вероятность

$$w_k = \frac{2\pi}{\hbar} \frac{a_0^3}{(2\pi\hbar)^3} \frac{2(2\pi)^{5/2} (Ze)^2 P_k^3}{3M\omega^2} E_0^2, \quad (6)$$

где P_k — значение импульса иона в конечном состоянии. Мы учли также, что размеры иона в различных состояниях примерно одинаковы и ввели среднее значение дисперсии a_0 .

Для оценок w_k возьмем $a_0 \cong 3 \cdot 10^{-8}$ см, $M \cong 8 \cdot 10^{-23}$ г, $Z = 1$, $\omega \cong 4 \cdot 10^{15}$ рад/с. Если $\varepsilon_k \cong 0.5$ эВ, то $P_k \cong 10^{-17}$ г · см/с. Тогда $w_k \cong 10^7 E_0^2 c^{-1}$. В лазерном поле с $E_0 \cong 3 \cdot 10^5$ В/см = 10^3 СГСЭ имеем $w_k \cong 10^{13}$ с $^{-1}$. Это — большая величина, показывающая, что рассмотренный тип десорбции может давать заметный вклад в экспериментально наблюдаемые величины.

В поле E_1 , соответствующем наличию одного фотона в единице объема (для указанной частоты $E_1 \cong 10^{-5}$ СГСЭ), $w_1 \cong 10^{-3}$ с $^{-1}$. Эту величину полезно сравнить с вероятностью w_2 фотоэффекта из молекулы или диэлектрика, где электрон локализован в объеме $\sim a_0^3$. Заменяя в (6) массу иона массой электрона, находим $w_2 \cong 3.4 \cdot 10^{-6}$. Вместе с тем обычные расчеты вероятности фотоионизации атома [2,6] для выбранных условий дают $w_3 \cong 8.9 \cdot 10^{-7}$ с $^{-1}$. Результаты w_2 и w_3 различаются примерно в 4 раза, что совсем не плохо, учитывая, сколь значительны различия в использованных моделях.

Итак, модель волнового пакета приводит к разумным результатам и позволяет проводить теоретическое изучение фотодесорбции ионов. Она пригодна и для описания других диффузионноподобных процессов.

Список литературы

- [1] *Chuang T.Y.* // Surface Science Reports. 1983. V. 3. P. 1–105.
- [2] *Шифф Л.* Квантовая механика. М.: ИЛ, 1959. 473 с.
- [3] *Люиселл У.* Излучение и шумы в квантовой электронике. М.: Наука, 1972. 398 с.
- [4] *Стрекалов В.Н.* // ФТП. 1986. Т. 20. № 10. С. 1939–1942.
- [5] *Стрекалов В.Н.* // Поверхность. 1989. № 11. С. 55–60.
- [6] *Давыдов А.С.* // Квантовая механика. М.: Наука, 1963. 748 с.