

01;11

## О температурной зависимости выхода ионов при электронно-стимулированной десорбции

© С.Ю. Давыдов

Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе РАН, С.-Петербург

Поступило в Редакцию 11 июня 1997 г.

В рамках релаксационной модели электронно-стимулированной десорбции получено аналитическое выражение для температурного коэффициента выхода ионов, десорбированных по реверсивному механизму. Рассматривались тепловые колебания адатомов с амплитудой, зависящей от температуры. Результаты расчета, выполненного для десорбции ионов  $\text{Na}^+$  с поверхности монослоя кремния, осажденного на вольфрамовую подложку, хорошо согласуются с экспериментом.

Влиянию температуры  $T$  на выход ионов  $q$  при электронно-стимулированной десорбции посвящено относительно небольшое число публикаций [1], и вопрос о механизме: формирующем зависимость  $q(T)$ , остается открытым. В серии экспериментальных работ [2–4] исследовалась роль температурных эффектов при электронно-стимулированной десорбции положительных ионов щелочных металлов ( $M^+ = \text{Li}^+, \text{Na}^+$ ) с поверхности вольфрамовой и иридиевой лент, покрытых монослоем кремния ( $M\text{-Si/W, Ir}$ ). Эксперименты показали, что существенная температурная зависимость выхода ионов наблюдается лишь в тех случаях, когда на первом этапе десорбции наблюдается реверсивное движение десорбируемого иона по направлению к подложке (механизм Антоневиича [5]). При этом температурный коэффициент выхода электронно-стимулированной десорбции ионов, определяемый как

$$\gamma \equiv \frac{\partial \ln q}{\partial T}, \quad (1)$$

имеет величину, превосходящую  $10^{-3} \text{ K}^{-1}$ , что на порядок превышает значение  $\gamma$  в отсутствие реверса. Теория температурной зависимости выхода электронно-стимулированной десорбции ионов была развита

автором в работах [6,7] в рамках предложенной ранее релаксационной модели (или модели локального поля) [1]. Предполагалось, что температура проявляет себя через амплитуду колебаний адатомов, которую приравнивали к среднеквадратичному смещению адатома  $\sqrt{(\Delta r)^2} \propto \sqrt{T}$ . Результаты расчета удовлетворительно согласуются с экспериментальными данными как для прямой (в отсутствие реверса), так и для реверсивной десорбции.

Выражения для  $q(T)$  и  $\gamma$ , полученные в работах [6,7], весьма громоздки и малоудобны для непосредственного использования, хотя при этом учитывались лишь изменения длины адсорбционной связи щелочной металл–кремний, тогда как заряд на атоме кремния считался фиксированным. Последнее, вообще говоря, не очевидно: так, например, при адсорбции металлов группы меди (а также никеля и палладия) на поверхности (110) вольфрама [8] температурный коэффициент дипольного момента адатома  $C = p^{-1}(\partial p/\partial T)$  имеет порядок  $10^{-4} \text{ K}^{-1}$ , что связано главным образом с изменением заряда адатома [9]. Учет этого обстоятельства в теории температурной зависимости выхода электронно-стимулированной десорбции ионов, хотя принципиально и не сложен, приведет к дальнейшему усложнению формул. Поступим по-другому: учтем только эффекты с температурным коэффициентом  $\geq 10^{-4} \text{ K}^{-1}$ , т.е. рассмотрим здесь лишь реверсивную десорбцию. Для определенности будем говорить о системе Na–Si/W.

С точки зрения теории [6,7], реверсивная десорбция отличается от прямой лишь наличием ненулевой начальной скорости  $v_0 = \sqrt{2B/M}$ , приобретаемой на стадии реверса и возникающей вследствие короткодействующего отталкивания электронных оболочек ионов кремния и натрия  $V_{rep} = B \exp[-p(r-r_0)/r_0]$ , где  $M$  — масса иона Na,  $r_0$  — его равновесное положение относительно поверхности пленки кремния,  $p = br_0$ ,  $b$  — характерная обратная длина борн-майеровского потенциала. В пределе малых начальных скоростей  $Mv_0^2 < V$ ,  $Mv_0^2 \ll W(2W - V)/2V$  вероятность  $\tilde{f}(E)$  обнаружить десорбированный ион натрия с энергией  $E$  имеет вид [7]

$$\begin{aligned} \tilde{f}(E) &= f(E) \cdot K, \\ f(E) &= \exp \left[ -\frac{r_0}{\tau} \sqrt{\frac{2M(V+2E)}{W(2W-V)}} \right], \\ K &= \exp \left[ \frac{r_0}{\tau} \cdot \frac{2Mv_0}{2W-V} \right]. \end{aligned} \quad (2)$$

Здесь  $W = 4z_1z_2e^2d/r_0^2$  есть удвоенная энергия отталкивания иона  $\text{Na}^+$  с зарядом  $z_2 = 1$  со стороны диполя, образованного ионом  $\text{Si}$  с зарядом  $z_1 > 0$  и его изображением в металле,  $V = z_2^2e^2/2r_0$  — удвоенная энергия притяжения (взятая с обратным знаком) иона  $\text{Na}^+$  к его изображению,  $\tau$  — характерное время жизни двухдырочного состояния на ионе кремния ( $\cong 10^{-14}$  с). Отметим, что приведенное здесь выражение для функции  $f(E)$  справедливо, строго говоря, лишь для энергий  $E \rightarrow E_{\min} = 0$  (последнее равенство имеет место только при  $Mv_0^2 < V$  [7]), однако может быть использовано для приближенного расчета выхода  $\tilde{q}$  электронно-стимулированной десорбции ионов. (Здесь и в дальнейшем тильдой помечены величины, относящиеся к случаю  $v_0 \neq 0$ ). Выход ионов  $\tilde{q}$ , определяемый как

$$\tilde{q} = \int_{E_{\min}}^{E_{\max}} dE \cdot (E - E_{\min})^{1/2} \tilde{f}(E), \quad (3)$$

имеет вид

$$\tilde{q} = qK,$$

где множитель  $q$ , отвечающий выходу электронно-стимулированной десорбции ионов при  $v_0 = 0$ , для определения температурного коэффициента  $\gamma$  не существен (см. формулу (1)). Максимально достижимая десорбированным атомом кинетическая энергия  $E_{\max} = (Mv_0^2 + W - V)/2$ , что непосредственно следует из соответствующего закона сохранения.

Если теперь учесть колебания адсорбционной системы, связанные с изменением длины связи кремний–натрий в период, предшествующий десорбции, то, как подробно обсуждается в работе [7], начальная скорость  $v_0$  претерпевает изменение:  $v_0 \rightarrow v_0 (1 + \frac{1}{2}p\xi \cos \delta)$ , где  $\xi = \Delta r_0/r_0$  — относительная амплитуда колебаний иона  $\text{Na}^+$ ,  $\delta$  — случайная фаза колебаний. Усредняя значение  $K(\delta)$  по  $\delta$ , т.е. выполняя интегрирование вида

$$\langle K \rangle = (1/2\pi) \int_0^{2\pi} d\delta \cdot K(\delta), \quad (5)$$

и подставляя полученное выражение в формулу (4), получим

$$\begin{aligned} \tilde{q} &= q \cdot K \cdot I_0(ap\xi), \\ a &\equiv M \frac{v_0 r_0}{\tau(2W - V)}. \end{aligned} \quad (6)$$

Здесь  $I_0$  — функция Бесселя мнимого аргумента нулевого порядка [10]. В работе [6] показано, что параметр  $\xi$  может быть оценен по формуле  $\xi^2 = 3(k_B T / E_{des})$ , где  $E_{des}$  — энергия десорбции иона натрия,  $k_B$  — постоянная Больцмана. Тогда для температурного коэффициента выхода электронно-стимулированной десорбции ионов  $\gamma$  имеем простую формулу

$$\gamma = (ap) \cdot \left( \frac{3k_B}{E_{des} T} \right)^{1/2} \cdot \frac{I_1(ap\xi)}{I_0(ap\xi)}, \quad (7)$$

где  $I_1$  — функция Бесселя мнимого аргумента первого порядка [10]. Полагая, как и в работах [6,7],  $d = 1.17 \text{ \AA}$ ,  $r_0 = 3.26 \text{ \AA}$ ,  $z_1 = 1$ , получим  $W = 6.34 \text{ eV}$  и  $V = 2.21 \text{ eV}$ . Беря из эксперимента [3] значение  $E_{\max} = 2.5 \text{ eV}$  и воспользовавшись законом сохранения энергии, получим  $v_0 = 0.19 \cdot 10^6 \text{ cm/s}$  (отметим, что при этом неравенства (2), определяющие режим малых скоростей, справедливы, так как  $Mv_0^2 = 0.87 \text{ eV}$ ,  $V = 2.21 \text{ eV}$ , а правая часть второго из неравенств три равна  $15 \text{ eV}$ ). Принимая  $\tau = 10^{-14} \text{ s}$  и  $E_{des} = 2.53 \text{ eV}$  [11,12], получим  $a = 3.18$ . Выбирая типичное значение  $p$ , равное 5 (в молекулах [13] и твердых телах [14] величина  $p$  меняется от 3 до 10), получим среднее значение  $\gamma \cong 3.16$ , что практически совпадает с экспериментом [3]. Необходимо, однако, отметить, что с ростом температуры от 300 до 600 К теоретическое значение  $\gamma$  убывает приблизительно на 20%. В эксперименте [2,3] температурное изменение выхода ионов  $M^+$  аппроксимировалось прямой линией. Полагаем, что здесь требуются дополнительные экспериментальные исследования.

В заключение отметим, что при больших начальных скоростях, удовлетворяющих условию  $Mv_0^2 > V$ , выход ионов уже не зависит от  $v_0$ , так как все ионы уходят на бесконечность. При этом резко уменьшается и температурный коэффициент выхода ионов, принимающий значения  $\gamma \cong 10^{-4} \text{ K}^{-1}$ , характерные для прямой десорбции. Следовательно, при некотором значении начальной скорости имеет место максимальное значение  $\gamma$ . Не ясно, однако, имеются ли системы, где на реверсивной

стадии десорбции ион набирает скорость, удовлетворяющую вышеприведенному неравенству. Сложность здесь заключается в том обстоятельстве, что реверсивный этап десорбции невозможно, по-видимому, исследовать экспериментально.

Работа выполнена в рамках программы "Поверхностные атомные структуры".

## Список литературы

- [1] Агеев В.Н., Бурмистрова О.П., Кузнецов Ю.А. // УФН. 1989. Т. 158. В. 3. С. 389–420.
- [2] Агеев В.Н., Бурмистрова О.П., Магомедов А.М., Якишинский Б.В. // ФТТ. 1990. Т. 32. В. 3. С. 801–808.
- [3] Агеев В.Н., Магомедов А.М., Якишинский Б.В. // ФТТ. 1991. Т. 33. В. 1. С. 158–165.
- [4] Агеев В.Н., Якишинский Б.В. // ФТТ. 1995. Т. 37. В. 2. С. 483–490.
- [5] Antoniewicz P.R. // Phys. Rev. B. 1980. V. 21. N 9. P. 3811–3815.
- [6] Давыдов С.Ю. // ЖТФ. 1997. Т. 67. В. 5. С. 109–115.
- [7] Давыдов С.Ю. // ЖТФ (в печати).
- [8] Kolaczkiwicz J., Bauer E. // Surf. Sci. 1985. V. 160. N 1. P. 1–10.
- [9] Davydov S.Yu. // Surf. Sci. 1996. V. 364, N 3. P. 477–480.
- [10] Янке Е., Эмде Ф., Леш Ф. Специальные функции. М.: Наука, 1977. 341 с.
- [11] Назаров Э.Г., Расулев У.Х. Нестационарные процессы поверхностной ионизации. Ташкент: Фан, 1991. 204 с.
- [12] Агеев В.Н., Якишинский Б.В. // ФТТ. 1985. Т. 27. В. 1. С. 99–105.
- [13] Флюгге З. Задачи по квантовой механике. М.: Мир, 1974. Т. 1. 343 с.
- [14] Киттель Ч. Введение в физику твердого тела. М.: Наука, 1978. 792 с.