

10
И Н С Т И Т У Т
ЯДЕРНОЙ ФИЗИКИ СОАН СССР

ПРЕПРИНТ И ЯФ 76-18

М.Е.Кишиневский

К ВОПРОСУ О ВТОРИЧНОЙ
ОТРИЦАТЕЛЬНО - ИОННОЙ ЭМИССИИ

Новосибирск

1976

ИНСТИТУТ ЯДЕРНОЙ ФИЗИКИ СО АН СССР

Препринт

М. Е. Кишиневский

К ВОПРОСУ О ВТОРИЧНОЙ ОТРИЦАТЕЛЬНО-ИОННОЙ
ЭМИССИИ

Новосибирск
1976

Чрезвычайное многообразие условий взаимодействия атомных частиц с металлической поверхностью затрудняет теоретическое описание вторичной ион-ионной эмиссии.

Тем не менее простейшее приближение плоской проводящей поверхности, за которой находится потенциальная яма для электронов, с учетом сил изображения, позволяет понять важную особенность этого явления - высокую степень положительной и отрицательной ионизации вторичных частиц /1,2/.

Для образования положительного или отрицательного иона электрон должен получить энергию, равную $I - \varphi$ или $\varphi - S$, если $I > \varphi$ и $\varphi > S$, где I - потенциал ионизации, φ - работа выхода поверхности, S - электронное сродство отрицательного иона. Силы изображения сдвигают энергетический уровень внешнего электрона относительно уровня Ферми. При этом электрон имеет возможность получить энергию для образования иона из кинетической энергии поступательного движения атома. Аналогичная ситуация получается при перезарядке быстрых атомов в результате столкновений, когда имеет место псевдопересечение термов за счет сближения обменивающихся электроном частиц.

При скорости удаления атома от поверхности U_1 , значительно меньшей скорости электронов на уровне Ферми и температуре поверхности $T = 0$ для степени ионизации α получается выражение:

$$\alpha = \exp - \int_{x_0}^{\infty} W(x) \frac{dx}{U_1},$$
 где $W(x)$ - скорость электронного обмена между атомом и металлом на расстоянии x , $x_0 = \frac{e^2}{4(\varphi - S)}$ и $x_0 = \frac{e^2}{4(I - \varphi)}$ для отрицательных и положительных ионов соответственно.

В /1/ была рассчитана вероятность выхода отрицательного иона при $T = 0$, причем потенциальный барьер был аппроксимирован однородным электрическим полем. В /2/ обсуждалась зависимость степени ионизации от температуры, однако, скорость электронного обмена $W(x)$ не вычислялась.

В настоящей работе выведена формула для степени отрицательной ионизации при $T=0$ с учетом правильной формы потенциального барьера. Мы применили метод, использованный Демковым и Друкаревым (3) для задачи о разрушении отрицательного иона в электри-

ческом поле, видоизменив его для случая неоднородного поля сил изображения. Потенциальная энергия электрона на расстоянии x от поверхности задавалась в виде:

$$U(x) = \begin{cases} -\frac{1}{4x} & , x > \frac{1}{4U_0} \\ -U_0 & , x < \frac{1}{4U_0} \end{cases}$$

где U_0 - глубина потенциальной ямы в металле.

Все величины здесь и ниже выражены в атомной системе единиц ($e = \hbar = m_e = 1$).

Следуя [3], запишем уравнение Шредингера в виде:

$$\Delta \Psi + (-\epsilon^2 + \frac{1}{2x} - \frac{1}{2R}) \Psi = \delta(\vec{r} - \vec{R})$$

$$4\pi \frac{\partial \Psi}{\partial |\vec{r} - \vec{R}|} \Big|_{\vec{r} = \vec{R}} = -\gamma$$

где \vec{r} и \vec{R} - радиус-векторы электрона и атома,
 $\frac{\gamma^2}{2}$ - электронное сродство,

ϵ^2 - собственное значение энергии,
 R - расстояние от атома до поверхности.

Волновая функция должна убывать при $x \rightarrow \infty$ и иметь вид уходящей волны при $x < \frac{1}{4U_0}$.

Вводя цилиндрические координаты ρ, x строим функцию Грина, аналогично [3]:

$$\Psi = \frac{1}{2\pi} \int_0^\infty J_0(s\rho) g(p, x) s ds ; \quad p^2 = \epsilon^2 + s^2$$

$g(p, x)$ удовлетворяет уравнению:

$$\frac{d^2 g}{dx^2} + \left(\frac{1}{2x} - \frac{1}{2R} - p^2 \right) g = \delta(x - R) , \quad x > \frac{1}{4U_0}$$

$$g = \text{const} e^{-i\sqrt{2U_0 - p^2} x} , \quad x < \frac{1}{4U_0}$$

Решение выражается через функции Уиттекера:

$$g(z) = \begin{cases} \frac{1}{2p_z} w_{\lambda, \frac{1}{2}}(z) [e^{-i\pi\lambda} w_{-\lambda, \frac{1}{2}}(-2p_z R) + i\beta w_{\lambda, \frac{1}{2}}(2p_z R)] & , z > 2p_z R \\ \frac{1}{2p_z} w_{\lambda, \frac{1}{2}}(2p_z R) [e^{-i\pi\lambda} w_{-\lambda, \frac{1}{2}}(-z) + i\beta w_{\lambda, \frac{1}{2}}(z)] & , z < 2p_z R \end{cases}$$

где $p_z = \sqrt{p^2 + \frac{1}{2R}}$; $\lambda = \frac{1}{4p_z}$, $z = 2p_z x$

Коэффициент β находится из условия сшивки при $x = \frac{1}{4U_0}$.

$$\frac{d \ln g}{dx} \Big|_{x = \frac{1}{4U_0}} = -i\sqrt{2U_0 - p^2}$$

Подставляя выражение для g , имеем:

$$\text{Re} \beta = \frac{2\lambda\sqrt{2U_0 - p^2}}{w_{\lambda, \frac{1}{2}}^2(\frac{p_z}{2U_0}) + 4\lambda^2(2U_0 - p^2) w_{\lambda, \frac{1}{2}}^2(\frac{p_z}{2U_0})}$$

$$\text{При } U_0 \gg \frac{1}{4} > S \quad \text{Re} \beta \approx \frac{1}{2\lambda\sqrt{2U_0} w_{\lambda, \frac{1}{2}}^2(0)} = \frac{\Gamma^2(1-\lambda)}{2\lambda\sqrt{2U_0}}$$

Вблизи атома воспользуемся асимптотическим разложением функций Уиттекера при $z \rightarrow \infty$:

$$w_{\lambda, \frac{1}{2}}(z) = e^{-\frac{z}{2}} z^\lambda \left(1 + \frac{\lambda - \lambda^2}{z} + \dots \right)$$

$$e^{-i\pi\lambda} w_{-\lambda, \frac{1}{2}}(-z) = e^{\frac{z}{2}} z^{-\lambda} \left(1 + \frac{\lambda + \lambda^2}{z} + \dots \right)$$

Применяя условие при $\vec{r} = \vec{R}$, получаем уравнение для определения ϵ :

$$-\gamma = \frac{d}{dr} \Big|_{r=0} \left[r \int_0^\infty e^{-p_z r} \left(1 + \frac{r}{R} \right)^\lambda \left(1 + \frac{1}{4p_z^2 R} \right) \frac{p dp}{p_z} \right] + i \int_0^\infty \beta w_{\lambda, \frac{1}{2}}^2(2p_z R) \frac{p}{p_z} dp$$

Разлагая подынтегральные выражения по степеням $\frac{1}{R}$, получим:

$$-\gamma = -\epsilon + i \int_0^\infty \beta w_{\lambda, \frac{1}{2}}^2(2p_z R) \frac{p}{p_z} dp ; \quad \text{при } |\epsilon - \gamma| \ll \gamma$$

имеем:

$$\begin{aligned}
 \text{Im } \alpha &\approx \int_0^\infty R e \psi e^{-2p_z R} (2p_z R)^{\frac{1}{2} p_z} \left(1 + \frac{1}{4p_z^2 R} - \frac{1}{16p_z^4 R}\right) p_z dp \approx \\
 &\approx \int_0^\infty R e \psi e^{-2p R} e^{-\frac{1}{2p}} (2p_z R)^{\frac{1}{2} p_z} dp ;
 \end{aligned}$$

используя найденное ранее выражение для $Re \psi$ и вычисляя приближенно интеграл, получаем:

$$W(R) \approx \gamma \text{Im } \alpha \approx \frac{B^2 \gamma \Gamma^2(1-\lambda) e^{-\frac{1}{2\lambda}}}{4R\sqrt{2U_0} \lambda} \left(\frac{R}{2\lambda}\right)^{2\lambda} e^{-2\gamma R}$$

Здесь B - коэффициент в выражении для волновой электрона в отрицательной ионе на далеких расстояниях:

$$\psi = \frac{B\sqrt{2\gamma}}{\sqrt{4\pi}} \frac{e^{-\gamma r}}{r}$$

Мы умножили скорость разрушения $W(R)$ на B^2 , следуя /3/, чтобы учесть конечный радиус эффективного потенциала.

Если момент импульса внешнего электрона в отрицательной ионе $l \neq 0$, то скорость разрушения должна измениться примерно на множитель $4\pi Y_{lm}^2|_{\theta=0}$; поскольку при $m=0$

$$4\pi Y_{lm}^2|_{\theta=0} = 2l+1, \text{ при } m \neq 0 \quad Y_{lm}|_{\theta=0} = 0,$$

а все значения m равновероятны, средняя скорость разрушения остается той же, что и в s -состоянии.

Для степени ионизации имеем:

$$\begin{aligned}
 \alpha &= \exp - \int_{x_0}^{\infty} W(x) \frac{dx}{v_L} \approx \exp - \frac{B^2 \Gamma^2(1-\lambda)}{2U_1 x_0} \sqrt{\frac{\psi}{U_0}} e^{-\frac{1}{2\lambda} \left(\frac{x_0}{2\lambda}\right)^{2\lambda}} e^{-2\gamma x_0} \\
 x_0 &= \frac{1}{4(\psi-5)}; \quad \lambda = \frac{1}{4\sqrt{2\psi}} \quad (I)
 \end{aligned}$$

На рис. I приведены зависимости степени ионизации от U_1 и работы выхода ψ для отрицательного иона водорода ($\gamma = 0,236$, $B = 1,68$).

Аналогичную задачу о разрушении отрицательного иона в поле сил изображения решал R.K. Janer /4/ ВКБ - методов, но из-за

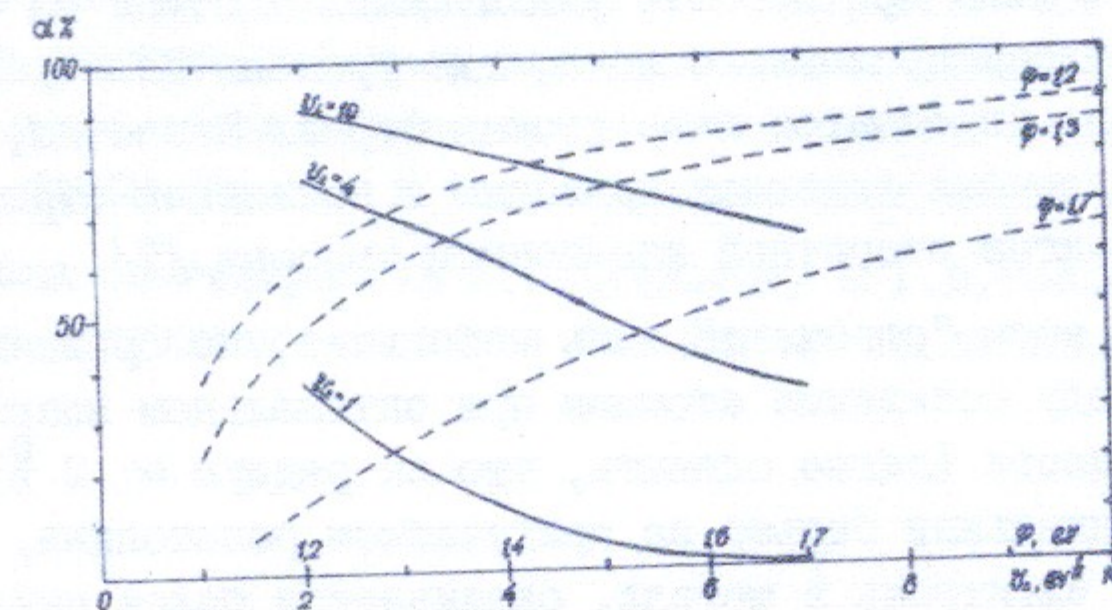


Рис. 1

ошибки в расчете (потенциал сил изображения вдвое увеличен) вероятность разрушения получилась сильно завышенной.

Для увеличения выхода отрицательных ионов бомбардируемую поверхность иногда покрывают пленкой щелочного металла, например, в поверхностно-плазменных источниках /5/. Адсорбируясь в виде положительных ионов, щелочные атомы понижают уровень электрона в отрицательной ионе относительно уровня Ферми.

При "оптимальном" покрытии, соответствующем минимуму работы выхода, расстояние между соседними атомами, например, атомами Cs на тугоплавких металлах, составляет $7 + 8 \text{ \AA}$ ($\delta \approx 1,5 + 2 \times 10^{14}$ атомов $\times \text{см}^{-2}$); расстояние от атома до поверхности близко к его ионному радиусу ($\approx 1,65 \text{ \AA}$) /6/.

Для анализа можно разложить потенциал и поверхностную плотность заряда ионов и их изображений в ряд Фурье. Поскольку уже первая гармоника потенциала убывает с расстоянием, как $e^{-\frac{2\pi x}{l}}$ где l - расстояние между соседними атомами, оказывается, что при $x \approx x_0$ неоднородность распределения поверхностной плот-

ности заряда очень мало искажает потенциал. Следовательно, есть основания пользоваться формулой /1/ и в этом случае, считая, что щелочная пленка просто понижает работу выхода.

При малых степенях покрытия захват электрона из металла может происходить лишь при пролете удаляющейся частицы на близком расстоянии от адсорбированного иона, где уровень электрона в отрицательном ионе опускается ниже уровня Ферми. Известно, что малейшие следы щелочных металлов приводят к появлению отрицательных ионов в спектре вторичной ион-ионной эмиссии /7/.

Однако при этом "работают" лишь небольшие, по сравнению с расстоянием между соседними атомами при оптимальном покрытии, участки поверхности (легко оценить, что их радиус $\approx 2 \text{ \AA}$). Кроме того, потенциальный барьер на критическом расстоянии, препятствующий уходу электрона в металл, оказывается более узким, чем барьер сил изображения при минимальной работе выхода, хотя и более широким, чем вдали от адсорбированного иона из-за большой работы выхода чистой поверхности.

С увеличением степени покрытия, как видно из Фурье - разложения, размеры "работающих" участков растут, их барьеры расширяются. Другими словами, коллективный эффект адсорбированных ионов начинает играть основную роль.

Переходя к поверхностно-плазменным источникам /5/, можно ожидать, что отрицательные ионы водорода образуются в основном из отраженных от поверхности катода протонов, падающих с энергией порядка прикатодного падения потенциала. Выход отрицательных ионов при отражении от поверхности катода быстрых атомов с энергиями порядка нескольких электронвольт ослабляется малостью скорости v_L , а также тем обстоятельством, что должно быть $\frac{mv^2}{2} > \varphi - \varphi'$, чтобы отрицательный ион мог преодолеть притяжение сил изображения. Зарядовое состояние падающих частиц не должно играть роли, т.к. на близких расстояниях скорость электронного обмена между атомом и металлом велика.

Возможен также выход в виде отрицательных ионов выбитых с поверхности адсорбированных атомов водорода. С выбиванием конкурирует испарение, так как температура катода в источнике $\approx 700^\circ\text{C}$ /5/.

Исходя из опытов по отражению положительных ионов щелочных металлов поверхностью тугоплавких металлов /7/, можно ожидать, что коэффициент отражения протонов при таких скоростях составляет $10 \pm 20\%$.

Как видно из рис. I почти все частицы, если они отражены с энергиями порядка десятков электронвольт, должны выйти в виде отрицательных ионов. Такая оценка согласуется с оценкой отношения тока бомбардировки к току отрицательных ионов /5/.

Выражаю благодарность В.Г.Дудникову и Г.В.Рослякову за плодотворные обсуждения, а также Г.И.Димову за внимание к работе.

Л и т е р а т у р а

- /1/. М.Е.Кишиневский, ЖТФ XLV, 1281 (1975).
/2/. Л.М.Кишиневский, Изв. АН СССР, XXXVIII, 392 (1974).
/3/. Ю.Н.Демков, Г.Ф.Друкарев, ЖЭТФ 47, 918 (1964).
/4/. R.K. Janev, *Surface science*, 45, 609 (1974).
/5/. Ю.И.Бельченко, Г.И.Димов, В.Г.Дудников, ЖТФ, XLV, 68,
(1975).
/6/. Б.Я.Мойжес, Г.Е.Пикус (ред.) "Термоэмиссионные преобразова-
тели и низкотемпературная плазма", "Наука", Москва, 1973.
/7/. У.А.Арифов "Взаимодействие атомных частиц с поверхностью
твердого тела", "Наука", Москва, 1968г.

Работа поступила - 25 декабря 1975 г.

Ответственный за выпуск А.Н.СКРИНСКИЙ

Подписано к печати 10.11-1976 г. МН 02680

Усл. 0,8 печ.л., тираж 200 экз. Бесплатно

Заказ № 18.

Отпечатано на ротапринте в ИЯФ СО АН СССР, рп