

ВЛИЯНИЕ АДсорБИРОВАННЫХ ЭЛЕМЕНТОВ НА ВТОРИЧНУЮ ИОННУЮ ЭМИССИЮ МЕТАЛЛА

И.Ф.Уразгильдин

Московский государственный университет им. М.В.Ломоносова

119899, Москва, Россия

Поступила в редакцию 26 мая 1992 г.

После переработки 8 июля 1992 г.

Предложен механизм, объясняющий резкое увеличение эмиссии вторичных положительных ионов металла при адсорбции электроотрицательных элементов на поверхности. Адсорбат наводит электростатический потенциал, вызывающий сдвиг электронного уровня, что увеличивает эффективное расстояние нейтрализации эмитируемого иона и экспоненциально уменьшает вероятность нейтрализации.

При бомбардировке поверхности твердых тел ионным пучком происходит эмиссия вторичных частиц в различных зарядовых состояниях. Для чистой поверхности металла доля частиц, покидающих поверхность в виде однократно заряженных положительных ионов, незначительна и составляет обычно $10^{-5} - 10^{-3}$. Вторичная ионная эмиссия (ВИЭ) демонстрирует чрезвычайную чувствительность к химическому состоянию поверхности. Адсорбция на поверхности металла электроотрицательных элементов (O, Cl, N, P) приводит к резкому, на 2-3 порядка, увеличению выхода вторичных положительных ионов ¹⁻³. Несмотря на то, что это явление известно в течение длительного времени, механизм такого резкого увеличения не ясен ⁴.

При адсорбции на поверхности металла электроположительных элементов (Cs, Li, K, Na) наблюдается резкое увеличение эмиссии отрицательных ионов ⁵. Характерная энергия вторичных ионов – единицы и десятки эВ и времена электронных переходов существенно меньше времени отлета частицы от поверхности. Наблюдаемый эффект объяснен в рамках модели электронного туннелирования за счет существенного уменьшения работы выхода (на 1-3эВ) ⁶.

Адсорбированный электроотрицательный элемент может как увеличивать, так и уменьшать работу выхода, но увеличение выхода вторичных положительных ионов происходит во всех случаях ⁴.

Рассмотрим эмиссию атомной частицы с поверхности металла в случае чистой и покрытой адсорбатом поверхности. Металл представим в виде однородного положительного потенциала и невзаимодействующего ферми-газа электронов, то есть в рамках модели "желе". Любой заряд Q , помещенный у поверхности металла, наводит потенциал, величина которого на расстояниях Z более нескольких атомных единиц (здесь и далее используется атомная система единиц: $e = m_e = \hbar = 1$) от поверхности может быть представлена как $-Q^2/[4(Z - Z_{im})]$, где Z_{im} – положение плоскости изображения ⁷. Этот потенциал вызывает изменение потенциала ионизации I атома вблизи поверхности металла.

Потенциал ионизации может быть представлен как разность значений двух молекулярных термов, одного, отвечающего взаимодействию ион-металл ($A^+ - M$), и другого – взаимодействию атом-металл ($A^0 - M$). Для вычисления

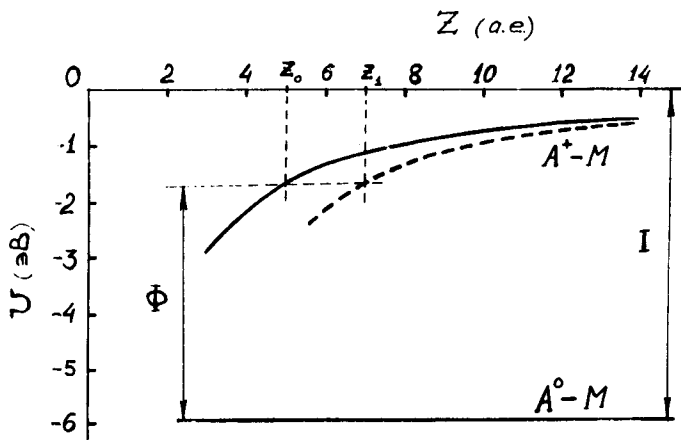


Рис.1. Молекулярные термы ($A^+ - M$) и ($A^0 - M$) как функции расстояния до поверхности металла ($r_s = 2$). $Z = 0$ соответствует краю "желе". $U(A^+ - M) = 0$ при $Z = \infty$. Сплошная линия - чистая поверхность. Пунктирная - поверхность с адсорбированным атомом 0 в положении равновесия на расстоянии $Z = 1$ а.е.¹¹. Терм приведен для бокового расстояния 3.5 а.е. от адатома

поведения терма ($A^+ - M$) с расстоянием до поверхности мы использовали наведенный потенциал, который учитывает экранирующий эффект металла на малых расстояниях, моделируемый множителем $[1 - \exp(-Z/\lambda)]$ перед потенциалом изображения с параметрами, отвечающими алюминию⁸. Изменение терма ($A^0 - M$) связано с поляризационными эффектами и очень незначительно в нашем случае (рис.1). На некотором расстоянии Z_0 разность достигает значения работы выхода Φ , на языке поведения электронного уровня это означает, что потенциал ионизации равен работе выхода (рис.2). Соответственно, с расстояния $Z \geq Z_0$ возможна нейтрализация эмитируемого иона.

Вероятность ионизации (в данном случае - вероятность выживания иона) для частицы, движущейся по классической траектории со скоростью v , может быть вычислена из уравнения:

$$\frac{dP^+(t)}{dt} = -2\Delta(Z(t))P^+(t) \quad (1)$$

с начальным условием $P^+(t_0) = 0$, где $\Delta(Z) = \Delta_0 \exp(-\gamma Z)$ - полуширина электронного уровня, γ^{-1} - характерная длина затухания волновой функции электронов вне металла⁹. Время t_0 , отвечающее Z_0 -точке пересечения электронным уровнем значения работы выхода Φ , рассматривается как начальное значение, так как эффект "памяти" в металле не существует, то есть возбуждение электронной подсистемы релаксирует за времена значительно меньшие, чем характерные времена эмиссии¹⁰. Решение уравнения (1)

$$P^+ = \exp[-2\Delta(Z_0)/(\gamma v)]. \quad (2)$$

Теперь рассмотрим поверхность металла с хемосорбированной электроотрицательной частицей. Уровень сродства к электрону такой атомной частицы оказывается ниже уровня Ферми и, следовательно, заполненным. Наличие адсорбированной частицы вызывает изменение потенциала вблизи ее окрестно-

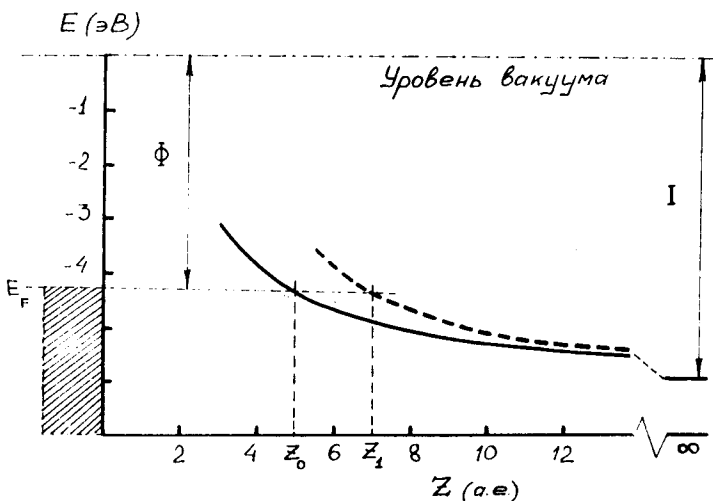


Рис.2. Уровень валентного электрона (потенциал ионизации) как функция расстояния до поверхности металла. Параметры системы те же, что и на рис.1. Сплошная линия – чистая поверхность. Пунктирная – поверхность с адсорбированным атомом O

сти. Наведенный электростатический потенциал вычислен самосогласованным образом в рамках желе-модели металла¹¹⁻¹². В упрощенном виде данный потенциал может быть представлен как потенциал наведенный диполем, ориентированным перпендикулярно к поверхности с отрицательным зарядом вне металла. Мы рассчитали молекулярный терм ($A^+ - M$) в зависимости от расстояния до поверхности при наличии адсорбированного атома O, используя результаты¹¹ (см. рис.1, пунктир). Для эффективного расстояния нейтрализации мы получили значение Z_1 большее чем Z_0 в случае чистой поверхности (рис.2). Величины I и Φ , отвечающие Al, который хорошо описывается моделью "желе" дают $Z_0 = 4,9$ и $Z_1 = 7$ а.е., при условии, что $\Phi = \text{const}$. Оценки по формуле (2) при условии, что для чистого Al $P^+ = 0,007$ и $\gamma = 0,7 \text{ \AA}^{-1}$ ⁹, приводят к значению для вероятности ионизации при наличии адсорбированной частицы $P^+ = 0,35$. Численные оценки носят приближенный характер, однако понятно, что незначительное увеличение эффективного расстояния нейтрализации в силу экспоненциального затухания волновых функций электронов вне металла, может приводить к увеличению вероятности выживания иона на порядки величин. Для электроотрицательных адсорбатов изменение величины работы выхода Φ незначительно и выход вторичных ионов всегда увеличивается.

При хемосорбции электроположительных частиц на поверхности металла, как уже отмечалось, происходит резкое увеличение выхода отрицательных ионов A^- , что связывается с существенным уменьшением работы выхода. Однако, наличие электроположительной частицы также вызывает изменение поведения уровня сродства к электрону, что приводит к дополнительному увеличению расстояния нейтрализации и, соответственно, увеличению вероятности выживания A^- при эмиссии. Одновременное действие этих двух факторов приводит к более сильному увеличению эмиссии отрицательных ионов вплоть до 5 порядков величин, как это, например, имеет место в случае эмиссии Ni^- с покрытой цезием Cs поверхности никеля⁵.

Таким образом, эффект резкого увеличения ВИЭ металла при адсорбции электроотрицательных элементов на поверхности может быть объяснен в рамках модели электронного туннелирования. Наведенный адсорбатом потенциал вызывает дополнительный к сдвигу, связанному с потенциалом изображения, сдвиг уровня валентного электрона, что увеличивает эффективное расстояние, на котором происходит нейтрализация отлетающего иона за счет резонансно-электронного перехода. То есть увеличивается потенциальный барьер для туннелирования электронов, экспоненциально уменьшается вероятность нейтрализации эмитируемого иона и, следовательно, увеличивается выход вторичных ионов.

-
1. G.Slodzian, and J.F.Hennequin, C.R.Acad.Sc. 263, 1246 (1966).
 2. A.Benninghoven, Surf. Sci. 53, 596 (1975).
 3. В.М.Буханов, К.Ф.Миннебаев, И.Ф.Уразгильдин, В.С.Черныш, ЖЭТФ 96, 1505 (1989).
 4. M.L.Yu, in Sputtering by Particle Bombardment III. Edited by R.Behrish, and K. Wittmaack, Springer Series in Topics in Applied Physics, Vol.64 (Springer, Berlin, Heidelberg 1991) p.91.
 5. M.Bernheim, and F.LeBours, Nucl. Instrum. Meth. B 27, 94 (1987).
 6. M.L.Yu., Phys. Rev. Lett. 40, 474 (1978).
 7. N.D.Lang, and W.Kohn, Phys. Rev. B 7, 3541 (1973).
 8. P.J.Jennings, R.O.Jones, and M.Weinert, Phys. Rev. B 37, 6113 (1988).
 9. M.L.Yu, Phys. Rev. Lett. 40, 574 (1978); M.L.Yu, and N.D.Lang, Phys. Rev. Lett. 50, 127 (1983).
 10. J.K.Norskov, and B.I.Lundqvist, Phys. Rev. B 19, 5661 (1979).
 11. N.D.Lang, S.Holloway, and J.K.Norskov, Surf Sci. 150, 24 (1985).
 12. P.Nordlander, and N.D.Lang, Phys. Rev. B 44, 13681 (1991).