

УДК 537.533

© 1991

КВАЗИУПРУГОЕ РАССЕЯНИЕ ЭЛЕКТРОНОВ В ШИРОКОМ ДИАПАЗОНЕ ТЕМПЕРАТУР

В. В. Дубов

Рассмотрено рассеяние медленных электронов на кристаллах с малыми изменениями энергии. Представлена диаграмная техника, удобная в случае рассеяния на протяженном флуктуационном потенциале. Проведенное исследование формирования спектра квазиупруго отраженных от полупроводников электронов в диапазоне температур 300—1800 К позволяет создать полную картину квазиупругого отражения.

Электронная спектроскопия малых потерь энергии (или так называемая электронная спектроскопия высокого энергетического разрешения — HREELS) в последние годы получила развитие как один из самых чувствительных методов исследования твердых тел. Экспериментально такие возможности метода определяют достигнутое в настоящее время энергетическое разрешение для HREELS спектрометров в несколько мэВ. В первую очередь HREELS использовалась как метод исследования поверхности кристалла, процессов адсорбции [1–3], структуры поверхности и фоновых спектров [4–7]. Развиваемый в данной работе подход позволяет использовать HREELS для детального исследования электронного строения и свойств приповерхностной области полупроводников.

При взаимодействии с веществом медленных (с энергией порядка 10 эВ) электронов существенны процессы неупругого рассеяния, в которых энергия частиц меняется на величину от 1 до 100 мэВ. Такие малые потери энергии определяются спектром низкоэнергетических элементарных возбуждений в веществе, они чувствительны к температуре и обычно являются результатом кратного рассеяния. Они происходят, например, при взаимодействии с полупроводниками, адсорбированными молекулами, тонкими металлическими пленками, поверхностными атомами. В случае полупроводников малые потери энергии обусловлены существованием низкоэнергетичных (от 0.1 мэВ) плазменных колебаний в веществе.

Можно выделить два типа неупругого взаимодействия электрона рассматриваемой малой энергии с кристаллом. Электрон может рассеяться неупруго внутри кристалла в приповерхностном слое толщины l_p , равной глубине проникновения первичного электрона в вещество, а может испытать акт неупругого рассеяния, находясь вне твердого тела. Нас будет интересовать отражение электронов от полубесконечных («толстых») кристаллов. В этом случае роль l_p играет длина l_{bs} пробега электрона до рассеяния на большой (большой $\pi/2$) угол. В рассматриваемом диапазоне энергий $l_{bs} \sim 10 \text{ \AA}$.

Электрическое поле плазменных возбуждений может распространяться на большие расстояния от поверхности кристалла [1, 8]. Однако величина такого протяженного поля будет малой (порядка нескольких мэВ). Таким образом, может реализовываться ситуация, когда внешний электрон в течение довольно длительного времени пролета области протяженного потенциала взаимодействует со слабым кулоновским полем. Как будет показано в дальнейшем, это приводит к кратным потерям энергии рассматриваемой частицы. Область такого взаимодействия вне твердого тела много

большие величины l_{bs} . Протяженное поле в свою очередь определяется флуктуациями плотности электрического заряда кристалла. Отклонения $\rho(\mathbf{r}, t)$ плотности от равновесного значения $\rho_0(\mathbf{r})$ определяют потенциальное поле таких флуктуаций

$$\varphi(\mathbf{r}, t) = e \int \frac{d\mathbf{r}' \rho(\mathbf{r}', t)}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|}. \quad (1)$$

Мы не учитываем эффекты запаздывания поля электромагнитных флуктуаций вследствие выполнения условия $cq_{\parallel} \gg \omega$, где c — скорость света; q_{\parallel} — тангенциальная компонента волнового вектора, переданного кристаллу электроном, потерявшим энергию $\hbar\omega$. Потенциал $\Phi(\mathbf{r}, t)$ удобнее записать в виде

$$\varphi(\mathbf{r}, t) = 2\pi e \int \frac{dq_{\parallel}}{q_{\parallel}} e^{iq_{\parallel}r_{\parallel}} \int \rho(\mathbf{q}_{\parallel}, z', t) e^{-q_{\parallel}|z-z'|} dz', \quad (2)$$

ось z направлена из кристалла. Вследствие общей электронейтральности системы этот потенциал имеет дипольный характер. Существенный вклад в вероятность неупругого рассеяния такой потенциал, как будет показано ниже, вносит при малых q_{\parallel} . Рассеяние на нем происходит в большой области пространства (протяженности q_{\parallel}^{-1} вдоль оси z). Таким образом, если мы изучаем возбуждение внешним электроном колебательных мод с малыми q_{\parallel}^{-1} , то при записи $\Phi(\mathbf{r}, t)$ необходимо учитывать процессы в поверхностной области кристалла толщины q_{\parallel}^{-1} . Однако обычно исследователи интересовались либо непосредственно поверхностью, либо очень тонкой областью вблизи нее [9-11] (отметим, что при этом рассматриваемый метод оказался полезным для изучения посредством HREELS тонких металлических пленок на полупроводниковых материалах [12-14]). Целью нашей работы является квантовомеханическое исследование рассеяния медленного электрона на протяженном флуктуационном потенциале, создаваемом различными группами частиц приповерхностной области кристалла.

1. Сечение однократного дипольного рассеяния и многократное тепловое рассеяние

Будем рассматривать отражение электрона энергии E_i с волновым вектором \mathbf{k}_i от полубесконечного кристалла в состоянии (E_f, \mathbf{k}_f) . Наш подход аналогичен использованному в работах Дьюка и Лармора [15] и является развитием метода Бома и Пайнса [16] для случая полубесконечного кристалла.

Дифференциальное сечение неупругого рассеяния электрона можно выразить через средний квадрат флуктуационной части функции Грина [17]

$$\frac{d\sigma}{dE_f d\Omega_f} = \frac{m}{(2\pi\hbar)^3} \frac{k_f}{k_i} \lim_{t' \rightarrow t \rightarrow \infty} \frac{\partial}{\partial t'} \langle |\hat{G}(t', \mathbf{k}_f; t, \mathbf{k}_i)|^2 \rangle. \quad (3)$$

Здесь усреднение проводится по ансамблю Гиббса, соответствующему температуре кристалла. Квадрат модуля в (3) выражается через двухчастичную функцию Грина [18].

Взаимодействие электрона с кристаллом описываем временным уравнением Шредингера с потенциалом $\hat{U}(\mathbf{r}, t)$. Интересующая нас часть $U(\mathbf{r}, t)$ содержит протяженный потенциал (2) и потенциал $U_{bs}(\mathbf{r})$, на котором в основном идет упругое рассеяние на большие углы. В дальнейшем нас будут интересовать электроны, которые отражаются от кристалла с малыми (до 0.1 эВ) изменениями энергии. Эти изменения происходят при рассеянии на потенциале (2), а отражение, т. е. рассеяние на большой угол, будем связывать с рассеянием на атомных остовах и описывать потенциалом U_{bs} . Конечно, полный потенциал $U(\mathbf{r}, t)$ не сводится к (2) и U_{bs} . Но из всех групп электронов, выходящих из кристалла, нас будут

интересовать только частицы, потерявшие малую энергию при взаимодействии (2), а упругое отражение медленных электронов происходит в основном на потенциале U_{bs} [19]. В то же время имеется возможность учесть влияние неупругих каналов рассеяния, не связанных с (2) в приближении оптического потенциала [20]. Рассеяние на потенциале (2) можно рассматривать в первом (борновском) приближении, а рассеяние на U_{bs} учесть точно. При этом, как будет ясно ниже, можно использовать модель последовательных столкновений [21]. Если взаимодействию (2) поставить в соответствие волнистую линию, а U_{bs} — штриховую, то исконая функция Грина будет представлена бесконечной суммой диаграмм (рис. 1, а). В этих диаграммах можно просуммировать главные последовательности по упругому рассеянию на отдельных атомах [19]. В итоге получаем сумму диаграмм (рис. 1, б; крест означает точный учет рассеяния на большой угол).

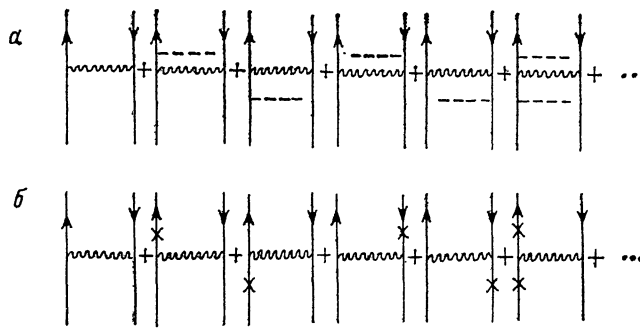


Рис. 1. Диаграммы, описывающие неупругое отражение электронов низких энергий от монокристалла.

Первая диаграмма соответствует рассеянию на большой угол на дипольном потенциале; ее вклад мал. Диаграммы, начиная с шестой, соответствуют дипольному рассеянию на большой угол и (или) кратному рассеянию на большой угол на отдельных атомах среды; вклад таких диаграмм также мал. Следовательно, необходимо просуммировать оставшиеся четыре диаграммы. Сформулируем правила суммирования, удобные в случае полубесконечного кристалла и потенциала типа (2). Внешней электронной линии ставятся в соответствие индексы (E_i, \mathbf{k}_i) или (E_f, \mathbf{k}_f) . Каждой внутренней электронной линии ставим в соответствие энергию E , волновой вектор \mathbf{k} , функцию Грина (левой линии)

$$G_R = G_R(\mathbf{k}_\parallel + \mathbf{g}_\parallel, k_\perp, E) = \left[E - \frac{\hbar^2}{2m} (\mathbf{k}_\parallel + \mathbf{g}_\parallel)^2 - \sum (\mathbf{k}_\parallel + \mathbf{g}_\parallel, k_\perp, E) \right]^{-1}. \quad (4)$$

Массовый оператор Σ можно вычислять в приближении оптического потенциала [22]; \mathbf{g} — вектор обратной решетки. Правой внутренней линии приписывается пропагатор $G_A = G_R^*$. Каждому кресту (левой линии), отвечающему точному (неборновскому) учету рассеяния на большой угол, ставится в соответствие величина

$$e^{-i\mathbf{qR}at}(\mathbf{q}, E), \quad (5)$$

где $\mathbf{q} = \mathbf{k}_{in} - \mathbf{k}_{out}$ — разность входящего и выходящего волновых векторов, t — точная (неборновская) амплитуда упругого рассеяния на атомном остоле (на большой угол). Волнистой бозонной линии ставится в соответствие величина

$$\int_{-\infty}^{\infty} d\tau e^{i\omega\tau} \langle \delta \hat{U}^+(\mathbf{q}'_\parallel, z', t + \tau) \delta U(\mathbf{q}_\parallel, z, t) \rangle_T e^{-i\mathbf{q}z + i\mathbf{q}'z'}. \quad (6)$$

Каждой точке или кресту ставятся в соответствие δ функции, обеспечивающие законы сохранения энергии. Затем проводится интегрирование по

всем внутренним энергиям, импульсам, координатам, суммирование по положениям \mathbf{R}_a атомов. При этом учтем, что из за мультипликативного множителя $\exp(-|z|/l_{bs})$ в выражении для вероятности рассеяния при $z < 0$ доминирующий вклад вносят процессы генерации колебаний при движении электрона в области $z > 0$ (вне кристалла электрон движется в поле (2) на длине q^{-1} , внутри кристалла электрон проходит путь l_{bs} , при дипольном рассеянии $l_{bs} \ll q^{-1}$). Поэтому в (2) полагаем $z > 0$.

В результате получаем следующее выражение для сечения рассматриваемого процесса:

$$\frac{d\sigma}{dE_f d\Omega_f} = \alpha |t(E)|^2 \frac{k_f}{k_i} \frac{q_{||}^2}{(q_{||}^2 + q_{\perp}^2)^2} \int_{-\infty}^{\infty} d\tau e^{i\omega\tau} e^{q_{||}(z+z')} \times \\ \times \langle \delta\hat{U}^+(\mathbf{k}_{f||} - \mathbf{k}_{i||}, z', t + \tau) \delta U(\mathbf{k}_{i||} - \mathbf{k}_{f||}, z, t) \rangle_T \quad (7)$$

(подынтегральное выражение в силу (2) не зависит от z). Здесь \mathbf{q} есть волновой вектор, переданный электроном при неупругом рассеянии на $\delta U = e\varphi(\mathbf{r}, t)$, α — постоянная. Сечение рассматриваемого процесса существенно при отражении падающего электрона вблизи берегового поверхностного рефлекса и быстро спадает при отходе от него. Эта зависимость определяется знаменателем (геометрическим фактором) в (7), а конкретнее — величиной параллельной составляющей вектора \mathbf{q} . Такое поведение сечения дипольного рассеяния наблюдается в экспериментах. Обычно исследуют зеркально-отраженные электроны. Не уменьшая общности, мы будем в дальнейшем рассматривать зеркальное отражение.

Интеграл в (7) определяется величиной корреляторов электрических полей в среде $\langle E_i(\mathbf{r}, t) E_k(\mathbf{r}', t') \rangle_T$ [1]. Последние связаны с функцией Грина электромагнитного поля [23]. Точное вычисление (7) в общем виде сложно. Однако это выражение можно записать в аналитическом виде для простых, но довольно общих моделей.

Мы рассматриваем взаимодействие электрона с полубесконечным кристаллом. В случае кристалла полупроводника при комнатных температурах вблизи поверхности обычно образуется слой, обедненный свободными носителями заряда с диэлектрической проницаемостью $\epsilon_s(\omega)$, отличной от объемной $\epsilon_b(\omega)$ (в дальнейшем это явление будет рассмотрено подробнее на примере кремния). Диэлектрическая проницаемость таких систем рассмотрена в [23]. В нашем случае

$$\epsilon(q_{||}, \omega) = \epsilon_s(\omega) \frac{\epsilon_b(\omega) \operatorname{ch} q_{||} d + \epsilon_s(\omega) \operatorname{sh} q_{||} d}{\epsilon_b(\omega) \operatorname{sh} q_{||} d + \epsilon_s(\omega) \operatorname{ch} q_{||} d}, \quad (8)$$

где d — толщина обедненного слоя. Тогда (7) можно вычислить аналитически и записать следующее выражение для полной вероятности отражения электрона от кристалла в телесный угол Θ с потерей энергии $\hbar\omega$:

$$\tilde{W}^{\text{loss}}(\mathbf{k}_f, \mathbf{k}_i) = \frac{\tilde{\alpha}}{(\pi e a_B)^2} \frac{k_f}{k_i} \frac{1}{\cos \theta_i} \frac{q_{||}}{(q_{||}^2 + q_{\perp}^2)^2} [n(\omega) + 1] \operatorname{Im} \frac{-1}{\epsilon + 1}, \quad (9)$$

где $h(\omega) = [\exp(\hbar\omega/T) - 1]^{-1}$ — распределение Бозе — Эйнштейна для флуктуационных плазменных колебаний в кристалле (плазмонов). Величина $\tilde{\alpha}$ определяется сечением $|t(E)|^2$. При выводе использовалось реализуемое обычно условие $t_a(k_i) \approx t_a(k_f)$, хотя можно показать, что и оно не обязательно. Вероятность того, что электрон, отразившийся от кристалла в телесный угол $d\Omega_f$, потеряет энергию $\hbar\omega$, есть

$$W^{\text{loss}}(\mathbf{k}_f, \mathbf{k}_i) = \frac{4}{\alpha} \tilde{W}^{\text{loss}}(\mathbf{k}_f, \mathbf{k}_i). \quad (10)$$

Следует отметить, что характерная для рассматриваемого процесса угловая зависимость в (9) и (10) получается и при более простом рассмотрении (работа [1] и др.), когда взаимодействие с кристаллической решеткой описывается феноменологически с помощью комплексного коэффи-

циента упругого отражения $R(U_{bs})$ — одномерный скачок потенциала). Для более последовательного описания всего процесса (и рассеяния на дальнедействующем флуктуационном потенциале (2), и упругого отражения на большой угол на U_{bs}) мы применили подход, аналогичный использованному в [15] при записи рядов, определяющих сечение (3), и метод, изложенный в [19] при суммировании рядов (рис. 1, а) до точного учета упругого рассеяния внешнего электрона на атомных остовах кристалла.

Вероятность $W_s^{s^{ia}}(k_f, k_i)$ увеличения энергии электрона при рассеянии на потенциале (2) на величину $\hbar\omega$ определяется формулой, аналогичной (9) и (10), с заменой $n(\omega)+1$ на $n(\omega)$. Это есть вероятности однократных изменений энергии. Если приведенные тепловые множители достаточно велики, то будут существенны потери многократные. Вероятность $W(k_f, k_i)$ (в дальнейшем вероятность однократного рассеяния, определяемую формулами (9) и (10), будем отмечать индексом s) многократного неупругого рассеяния связана с $W_s(k_f, k_i)$ [24, 25] следующим образом:

$$W(\omega) = \int dt e^{-i\omega t} \exp \left\{ \int_0^{\infty} d\omega' W_s(\omega') [(n(\omega')+1)[e^{i\omega't} - 1] + n(\omega')[e^{-i\omega't} - 1]] \right\}. \quad (11)$$

Величина $W_s(\omega)$ получается из $W_s(k_f, k_i)$ интегрированием по $d\Omega_f$. При этом необходимо учитывать геометрию процесса рассеяния. Вектор k_f расположен вблизи зеркального отражения вектора k_i , ибо $k \sim 10^{18} \text{ см}^{-1}$, $g \sim k\hbar\omega/2E \ll k$. Угол между k_f и отражением k_i обозначим ϑ , азимутальный угол k_f — через Φ . Для $E_i \sim 10 \text{ эВ}$, $\hbar\omega \sim 20 \text{ мэВ}$ (что соответствует $T \sim 10^3 \text{ К}$ для кремния) имеем $\vartheta \sim \hbar\omega/2E \equiv \vartheta_E \sim 10^{-3} \ll 1$. В формуле (10) $\varepsilon = \varepsilon(q_{\parallel}, \omega)$ (см. (8)). В частном случае, когда в (8) $d \approx 0$, $\varepsilon(q_{\parallel}, \omega) \approx \varepsilon_b(\omega)$, и тогда

$$W_{sb}(\omega) = \frac{2\sqrt{1-2\vartheta_E}}{\pi^2 a_B E_i k_i \cos \vartheta_i} \text{Im} \frac{-1}{\varepsilon_b(\omega) + 1} \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^{\vartheta_m} d\vartheta \vartheta \times \\ \times \frac{[(\vartheta_E \sin \vartheta_i - \vartheta \cos \vartheta_i \cos \varphi)^2 + \vartheta^2 \sin^2 \varphi]^{1/2}}{[\vartheta^2 + \vartheta_E^2]^2}, \quad (12)$$

где предел интегрирования ϑ_{\max} определяется апертурой анализатора. Обычно $\vartheta_m \geq 3^\circ$, при этом $\vartheta/\vartheta_E \gg 1$. Для таких ϑ_m легко получить

$$W_{sb}(\omega) = \frac{2}{a_B k_i \omega \cos \vartheta_i} \text{Im} \frac{-1}{\varepsilon_b(\omega) + 1}. \quad (13)$$

Если в (8) имеет место неравенство $q_{\parallel} d \ll 1$, то ε разлагаем в ряд и получаем

$$W_s(\omega) = W_{sb}(\omega) + W_{ss}(\omega). \quad (14)$$

При этом величина W_{ss}/W_{sb} мала, порядка $q_{\parallel} d$, что подтверждают и экспериментальные данные [1].

Формулы (11), (12) описывают энергетический спектр отраженных с малыми потерями энергии электронов. Так как потери (изменения) энергии составляют величины (от десятых долей до десятков мэВ), много меньшие или порядка тепловой энергии kT , то рассматриваемое неупругое рассеяние проявляется обычно в виде «размывания» уширения пика упругоотраженных электронов. Исходное, близкое к гауссовскому, энергетическое распределение электронов в результате неупругого рассеяния трансформируется в распределение, описываемое зависимостью $W(\omega)$. Вследствие малости изменений энергии такое рассеяние принято называть квазиупругим.

Важной характеристикой спектра квазиупруго отраженных электронов является полуширина кривой $W(\omega)$. Она соответствует энергетической

полуширине пика отраженных от кристалла вблизи зеркального положения электронов. Эту полуширину можно оценивать непосредственно из зависимости (11) или же вычисляя среднеквадратичное отклонение

$$\Delta^2 = \langle (\hbar\omega)^2 \rangle - \langle \hbar\omega \rangle^2.$$

На основе вышеизложенного несложно получить

$$\Delta^2 = \int_0^{\infty} d\omega W_s(\omega) (\hbar\omega)^2 [2n(\omega) + 1]. \quad (15)$$

2. Неупругое рассеяние медленных электронов в поверхности кремния при высоких температурах

В предыдущем разделе отмечено, что коррелятор электрических полей в среде $\langle E_i(\mathbf{r}, t) E_k(\mathbf{r}', t) \rangle_T$, а вместе с ним и спектры вероятности неупругого отражения (9)—(14) вычисляются аналитически в случае кристалла с приповерхностным диэлектрическим слоем конечной толщины (см. (8)). Такая модель хорошо описывает электронные свойства легированных полупроводников.

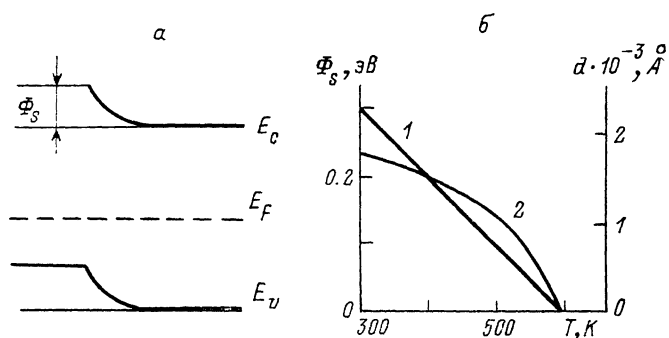


Рис. 2. Температурная зависимость величины Φ_s изгиба зон в кремнии ($N_d \sim 10^{16} \text{ см}^{-3}$) на поверхности (1) и толщины d обедненного основными носителями приповерхностного слоя (2).

Будем рассматривать взаимодействие электрона энергии $E \sim 10$ эВ с полубесконечным кристаллом кремния, легированным донорами концентрации $N_d \sim 10^{16} \text{ см}^{-3}$. Вообще говоря, внешний электрон может возбуждать в полупроводнике плазменные колебания разных диапазонов энергии: «обычные» — колебания валентных электронов с энергией $\hbar\omega \sim 10 \div 20$ эВ — объемные и поверхностные. Также возможны, например, колебания электронов зоны проводимости гораздо более низких энергий (~ 1 мэВ), определяемых концентрацией свободных носителей зарядов. Эти колебания нас и интересуют. Концентрация свободных носителей внутри кристалла у его поверхности определяется ходом электростатического потенциала в приповерхностной области.

Вследствие того, что мы имеем дело с ограниченным образцом, на поверхности появляются поверхностные электронные зоны, которые могут лежать, что и имеет место в кремнии, в запрещенной для объема зоне. За счет этого на поверхности кремния может образовываться некий избыточный электронный заряд, происходит перераспределение заряда в объеме, наблюдается так называемое явление изгиба энергетических зон вблизи поверхности. Величина изгиба зон на поверхности равна Φ_s (рис. 2, а). Зная положение уровня Ферми на поверхности кремния (см., например, [26, 27]), несложно получить зависимость Φ_s от T (рис. 2, б). Изгиб зон приводит к тому, что вблизи поверхности образуется слой тол-

щины $d = [\epsilon \Phi_s / 2\pi e N_d]^{1/2}$. Примерная зависимость $d(T)$ в интервале до $T = 550 \div 600$ К представлена на рис. 2, б. Обозначив диэлектрическую проницаемость слоя d через $\epsilon_s(\omega)$, а объемную диэлектрическую проницаемость кремния — через $\epsilon_b(\omega)$, получим для полной диэлектрической проницаемости кристалла формулу (8). Перед тем как использовать развитый в предыдущем разделе подход к описанию квазиупругого отражения от кремния в широком интервале температур, кратко остановимся на результатах исследований, проведенных при низких (до 300 К) температурах [1-10].

Показано, что в данном интервале температур квазиупругий пик отраженных от кремния электронов формируется в результате рассеяния внешнего электрона на электронах поверхностных зон. Величина однократной потери при таком рассеянии мала — менее 2 мэВ при достаточно высокой температуре. Величина $n(\omega) \gg 1$, и уширение пика происходит в результате многократного теплового рассеяния. Из-за высокой кратности результат уширения будет симметричным и не зависящим от дисперсии поверхностной моды. Величина (15) среднеквадратичного отклонения энергии, определяющая уширение за счет поверхностных состояний, описывается формулой [10]

$$\Delta^2 = \frac{4}{\pi} A (1 + \cos^2 \theta_i) \hbar \omega_s T \ln \frac{T}{\hbar \omega_s}. \quad (16)$$

При этом контур потерь будет гауссовским. Если учесть затухание или малую дисперсию колебаний, контур станет близким к лоренцевскому.

При отражении электронов от металлов, например никеля, уширение отсутствует [14]. Аналогичные результаты были получены в области до $T \sim 800$ К [12-14]. В приведенных работах детально не исследовалась симметрия квазиупругого пика, речь шла о симметричном вследствие большой кратности уширении. Однако при температурах $T \geq 300 \div 800$ К наблюдается асимметричное уширение квазиупругого пика, причем реальное уширение больше предсказываемого (16).

Следовательно, при температуре более 300 К необходимо учитывать потери за счет процессов в приповерхностной области, определяемые величиной $W(\omega)$, полученной в разделе 1.

Сразу следует отметить, что включение в рассмотрение более высокоэнергетичных, чем поверхностные, приповерхностных колебаний необходимо приводит к появлению асимметрии квазиупругого пика, проявляющейся уже при $T \geq 500 \div 800$ К и существенной при $T > 1000$ К.

Оценим величину Δ^2 для приповерхностного слоя. Неравенство $W_{ss}/W_{sb} \sim q_1 d \ll 1$ позволяет пренебречь величиной W_{ss} . В качестве объемной диэлектрической проницаемости возьмем

$$\epsilon_b = \epsilon_\infty - \omega_p^2 / (\omega + i/\tau) \omega, \quad (17)$$

где $\epsilon_\infty = \epsilon_b(\infty)$, $\omega_p^2 = 4\pi n e^2 / m^*$, m^* — эффективная масса, n — концентрация свободных электронов. Если пренебречь дисперсией плазменных колебаний

$$\text{Im} \frac{-1}{\epsilon_b(\omega) + 1} \approx \frac{\pi \omega_{sp}}{2(\epsilon_\infty + 1)} \delta(\omega - \omega_{sp}), \quad (18)$$

$\omega_{sp}^2 = \omega_p^2 / (\epsilon_\infty + 1)$. В случае учета конечного времени τ релаксации (а при $T \sim 300$ К величина $\omega_{sp} \tau \sim 1$, где τ вычисляется с учетом N_d) получаем из (13)

$$\Delta^2 = \frac{A}{\pi} \hbar \omega_{sp} T \left(\frac{\pi}{2} + \arctg \frac{2(\omega_{sp} \tau)^2 - 1}{\sqrt{(2\omega_{sp} \tau)^2 - 1}} \right) \frac{1}{\sqrt{1 - (2\omega_{sp} \tau)^{-2}}}, \quad (19)$$

где

$$A = \frac{2\pi}{a_p k_i \cos \theta_i (\epsilon_\infty + 1)}. \quad (20)$$

Мы можем не только оценить величину Δ^2 , но и определить точно форму квазиупругого пика и его полуширину. Вероятность $W(\omega)$ электрону при отражении изменить свою энергию на величину $\hbar\omega$ за счет многократного рассеяния определяется формулой (11). В свою очередь $W(\omega)$ определяется величиной однократного рассеяния (13) и (14). Считая дисперсию колебаний малой, после несложных преобразований получаем

$$W(\omega) = \frac{1}{2\pi} \exp\left(-\frac{\pi}{a_B k_i \cos \theta_i (\epsilon_\infty + 1)} \frac{\exp(\hbar\omega_{sp}/T) + 1}{\exp(\hbar\omega_{sp}/T) - 1}\right) \times \\ \times \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{-i\omega t} \exp(a[n(\omega_{sp}) + 1]e^{i\omega_{sp}t} + n(\omega_{sp})e^{-i\omega_{sp}t}). \quad (21)$$

В области температур, где $n(\omega_{sp}) + 1 \approx n(\omega_{sp})$, для вероятности изменения энергии электрона на $\hbar\omega$ в единицу времени из (21) следует

$$W(\omega) = e^{-z} I_{\omega/\omega_{sp}}(z), \quad (22)$$

где

$$z = \frac{\pi}{a_B k_i \cos \theta_i (\epsilon_\infty + 1)} \frac{\exp(\hbar\omega_{sp}/T) + 1}{\exp(\hbar\omega_{sp}/T) - 1} \approx \frac{AT}{\hbar\omega_{sp}}, \quad (23)$$

$I_\nu(z)$ — модифицированная функция Бесселя 1-го рода. Формула (22) определяет форму спектра потерь при высоких ($T/\hbar\omega_{sp} > 1$) температурах. Полуширина спектра определится из условия

$$I_{\Delta\omega/\omega_{sp}} = \frac{1}{2} I_0.$$

Для больших z

$$I_\nu(z) \approx e^z (2\pi z)^{-1/2} \left(1 - \frac{4\nu^2 - 1}{8z}\right).$$

Отсюда получаем

$$(\Delta\hbar\omega/\hbar\omega_{sp})^2 = z,$$

что совпадает с (19), если пренебречь дисперсией. Численный учет дисперсии в (21) не вносит ничего нового (при $n/(n+1) \approx 1$) в проведенное рассмотрение. Наличие дисперсии приводит лишь к мелкому «дребезжанию» аргумента гармонической функции в интеграле, определяющем $I_\nu(z)$, сохраняя общий ход зависимости $W(\omega)$.

При очень высоких температурах (вплоть до 1800 К) характерной особенностью процесса является уменьшение кратности ($n \geq 1$) потерь вследствие увеличения энергии однократной потери за счет теплового роста собственной концентрации электронов в полупроводнике. В этом случае форма линии потерь и ее полуширина существенно зависят от дисперсии плазмонов. Для диэлектрической проницаемости (17) в случае $\hbar\omega_{sp} \gg T$ можно получить, что

$$\Delta^2 = \frac{12}{\pi} A \frac{(\hbar/\tau) T^3}{(\hbar\omega_{sp})^2}.$$

Как и следовало ожидать, $\Delta \rightarrow 0$ при $\tau \rightarrow \infty$. С ростом температуры все больше проявляется асимметрия пика. При T порядка 1200—1800 К квазиупругий пик должен быть резко асимметричным.

Проведенное теоретическое рассмотрение позволяет описывать формирование пика квазиупруго отраженных от полупроводникового кристалла медленных электронов во всем интервале температур. Необходимо учитывать три или четыре (в зависимости от степени легирования образца) механизма формирования уширения пика. Это, во-первых, энергетический разброс первичного пучка. Многократное же тепловое рассеяние может

иметь различную природу. При $T \leq 300$ К существенно рассеяние на свободных электронах поверхностных зон (при наличии последних). Вследствие этого наблюдается уширение пика на величину, определяемую по формуле (16). При более высоких температурах определяющую роль играет рассеяние на протяженном потенциале (2) приповерхностных флуктуационных возбуждений. Соотношение парциальных вкладов в (14) зависит от величины d , определяемой в свою очередь Φ_s и N_d . Форма спектра, обусловленного объемными приповерхностными процессами, выражается через (22). При очень высоких температурах ($T \sim 1500$ К) необходимо учитывать дисперсию приповерхностных высокоэнергетических колебаний.

Список литературы

- [1] Mills D. L. // Surf. Sci. 1975. V. 48. N 1. P. 59—79.
- [2] Wallis R. F. // Progress in surface science. N. Y.: Pergamon Press, 1974. V. 4. P. 233.
- [3] Andersson S., Persson B. N. J. // Phys. Rev. Lett. 1980. V. 45. N 17. P. 1421—1424.
- [4] Propst F. M., Piper. // J. Vac. Sci. Technol. 1967. V. 4. N 1. P. 53—58.
- [5] Lucas A. A., Sunjic M. // Phys. Rev. Lett. 1971. V. 26. N 5. P. 229—232.
- [6] Evans E., Mills D. L. // Phys. Rev. B. 1972. V. 5. N 10. P. 4126—4139; V. 7. N 2. P. 853—868.
- [7] Kelly M. K., Magaritondo G., Papagno L., Lapeyre G. J. // Phys. Rev. B. 1986. V. 34. N 8. P. 6011—6013.
- [8] Chen Yu., Frankel D. J., Andersson J. R., Lapeyre G. J. // J. Vac. Sci. Technol. A. 1988. V. 6. N 3. P. 752—753.
- [9] Himpfel F. J. et al. // Phys. Rev. B. 1981. V. 24. N 2. P. 1120—1123.
- [10] Persson B. N. J., Demuth J. E. // Phys. Rev. B. 1984. V. 10. N 10. P. 5968—5986.
- [11] Backes U., Ibach H. // Sol. St. Commun. 1981. V. 40. N 5. P. 575—577.
- [12] Backes U., Ibach H. // Sol. St. Commun. 1983. V. 48. N 5. P. 455—447.
- [13] Dubois L. H., Schwartz G. P., Camley R. E., Mills D. L. // Phys. Rev. B. 1984. V. 29. N 6. P. 3208—3216.
- [14] Demuth J. E., Persson B. N. J. // Phys. Rev. Lett. 1985. V. 54. N 6. P. 584—587.
- [15] Duke C. B., Laramore G. E. // Phys. Rev. B. 1970. V. 2. N 12. P. 4765—4795; V. 3. N 6. P. 3183—3197.
- [16] Bohm D., Pines D. // Phys. Rev. 1951. V. 82. N 5. P. 625—634.
- [17] Moller C. // Z. Phys. 1931. Bd 70. H. 5. S. 786—795.
- [18] Кухаренко Ю. А. // ДАН СССР. 1978. Т. 243. № 2. С. 321—322.
- [19] Румянцев В. В., Кораблев В. В., Дубов В. В., Морозов Ю. А. // Изв. АН СССР, сер. физ. 1982. Т. 46. № 7. С. 1336—1341.
- [20] Howie A., Stern R. M. // Z. Naturforsch. 1972. Bd 27a. H. 2. S. 382—389.
- [21] Ohtsuki Y. H. // J. Phys. Soc. Japan. 1968. V. 24. N 3. P. 555—560.
- [22] Duke C. B., Tucker C. W. // Surf. Sci. 1971. V. 24. N 1. P. 31—43.
- [23] Абрикосов А. А., Горьков Л. П., Дзялошинский И. Е. Методы квантовой теории поля в статистической физике. М.: ГИФМЛ, 1962. С. 31.
- [24] Lukas A. A., Sunjic M. // Progress in surface science. N. Y.: Pergamon Press, 1972. V. 2. P. 75.
- [25] Schaich M. L. // Surf. Sci. 1982. V. 122. N 2. P. 175—189.
- [26] Doniach S. // Adv. Phys. 1969. V. 18. N 76. P. 819—848.
- [27] Duke C. B., Ford W. K. // Surf. Sci. 1981. V. 111. N 2. P. L685—L689.

Ленинградский
технический университет

Поступило в Редакцию
2 октября 1989 г.
В окончательной редакции
23 мая 1990 г.