

ОСОБЕННОСТИ ЭНЕРГЕТИЧЕСКОГО СПЕКТРА ЭЛЕКТРОНОВ ВБЛИЗИ ПОВЕРХНОСТИ ПОЛУПРОВОДНИКА С ОТРИЦАТЕЛЬНЫМ ЭЛЕКТРОННЫМ СРОДСТВОМ

Горшкова Т. А., Шадрин В. Д.

Сформулировано граничное условие для нестационарных, т. е. находящихся выше порога эмиссии в вакуум, электронов на поверхности полупроводника с отрицательным электронным сродством. Показано, что в двух предельных случаях — хорошо отражающей электроны и хорошо пропускающей электроны границ раздела с вакуумом — состояния локализованных вблизи поверхности электронов являются долгоживущими, однако природа их в этих двух случаях принципиально различна. Для хорошо отражающих поверхностей в потенциальной яме изгиба зон существуют размерно-квантованные состояния, которые гибридизированы с таммовскими (поверхностными) состояниями. Учет гибридизации позволяет снять существовавшее ранее расхождение теории с экспериментом. Вблизи хорошо пропускающей электроны границы раздела с вакуумом возникают резонансные двумерные состояния, лежащие по энергиям на фоне объемных состояний электронов. Резонансные состояния электронов локализованы на макроскопических расстояниях вблизи поверхности и могут оказывать заметное влияние на процессы фотогенерации и энергетической релаксации электронов в полупроводниках с отрицательным электронным сродством.

Введение. Исследования закономерностей фотоэмиссии из полупроводников с отрицательным электронным сродством (ОЭС) с необходимостью привели к выводу о том, что ключом к пониманию механизма эмиссии электронов является изучение электронных процессов в приповерхностной области эмиттера. Согласно существующим представлениям [1], электроны имеют малый шанс выйти в вакуум при одном ударе о границу раздела, т. е. интегральная вероятность выхода их реализуется при многократных соударениях с поверхностью эмиттера. При этом электроны захватываются в потенциальную яму изгиба зон и релаксируют вниз по энергиям [2-4]. Для понимания особенностей энергетических и угловых распределений эмиссии, а также для расчетов функций распределения электронов и сравнения их с экспериментальными данными важно знать энергетический спектр электронных состояний в приповерхностной области изгиба зон. В прямозонных ОЭС полупроводниках на основе соединений элементов групп III и V ввиду малости эффективной массы электронов в потенциальной яме изгиба зон, ограниченной со стороны вакуума полупрозрачным барьером, уже при концентрациях акцепторной примеси $N_A \sim 10^{17} \div 10^{19} \text{ см}^{-3}$ происходит заметное размерное квантование (РК) энергетических уровней. Расчеты положений двумерных РК подзон, выполненные в [5] для *p*-GaAs, дают величину отщепления энергии основного состояния от дна ямы $E_0 = 0.15 \text{ эВ}$ при глубине ямы $V_s = 0.39 \text{ эВ}$, соответствующей концентрации $N_A = 5 \cdot 10^{17} \text{ см}^{-3}$. При увеличении концентрации верхние РК подзоны выталкиваются из ямы, так что переход к квантовому пределу (одна подзона) происходит при $N_A = 5 \cdot 10^{18} \text{ см}^{-3}$, а при $N_A = 5 \cdot 10^{19} \text{ см}^{-3}$ в потенциальной яме нет состояний.

Ввиду отсутствия измерений положений РК подзон прямыми методами, например методом фотоэмиссионной спектроскопии с разрешением по углам вылета электронов [6], о положениях подзон судят по пикам в энергетических распределениях фотоэмиссии из сильно легированных ($N_A > 10^{18} \text{ см}^{-3}$) ОЭС полупроводников [4, 7]. Экспериментальные данные, однако, не всегда соответствуют рассчитанным в [5] положениям РК подзон. Так, например, в [2] наблю-

далось понижение, а не выталкивание вверх низкоэнергетического пика при изменении концентрации N_A от $5 \cdot 10^{18}$ до $5 \cdot 10^{19} \text{ см}^{-3}$. Авторы [8] измерили смещение пика вниз на $\Delta E = 0.3 \text{ эВ}$, считая от дна зоны проводимости в объеме, что не укладывается в расчеты [5] при всех $N_A > 10^{18} \text{ см}^{-3}$. В [9] при $N_A \approx \approx 10^{19} \text{ см}^{-3}$ наблюдались распределения двух типов: пик $\Delta E_1 = 0.13 \text{ эВ}$ с плечом $\Delta E_0 = 0.26 \text{ эВ}$, соответствующие в рамках квантовой модели эмиссии из подзон с положениями, примерно равными ΔE_1 и ΔE_0 , а также двугорбые распределения, которые, в согласии с [4], описывают электроны, частично релаксировавшие на дно единственной РК подзоны с энергией $\Delta E_0 \approx 0.23 \text{ эВ}$. Таким образом, накопленные к настоящему времени экспериментальные данные по энергетическим распределениям фотоэмиссии из сильно легированных фотокатодов требуют пересмотра предположений, в которых выполнен расчет [5].

Напомним, что в [5] использованы нулевые граничные условия на поверхности эмиттера на огибающую волновой функции электронов. В действительности, поскольку речь идет о нестационарных состояниях, расположенных выше уровня вакуума, граничные условия на огибающую являются комплексными [10]. Нулевое граничное условие соответствует и нулевому току эмиссии в вакуум. Как показано в [10], при малой прозрачности барьера на границе раздела с вакуумом можно сформулировать, пренебрегая затуханием, вещественные граничные условия на логарифмическую производную огибающей. Нулевые граничные условия являются лишь частным случаем последних. Влияние ненулевых граничных условий на РК состояния глубоко под уровнем вакуума в пленках изучалось ранее в [11]. В настоящей статье мы рассмотрим проблему граничных условий на огибающие волновых функций электронов на поверхности ОЭС полупроводника в общей постановке задачи о граничном условии для нестационарных состояний электронов. Помимо изучения влияния ненулевых граничных условий на положения РК подзон в области изгиба зон ОЭС фотокатода нас интересует вопрос о возможных долгоживущих (квазистационарных) состояниях, которые могут существовать вблизи поверхности эмиттера. Рассматривая задачу об энергетических состояниях электронов, локализованных вблизи границы раздела с вакуумом, мы выберем в качестве модели, описывающей спектр объемных электронов полупроводника четырехзонную модель Кейна. Необходимость учета взаимодействия зоны проводимости и валентных зон следует из того, что в ОЭС эмиттерах на основе полупроводниковых соединений элементов групп III и V величина изгиба зон составляет заметную долю ширины запрещенной зоны E_g .

В п. 1 обсуждается граничное условие на огибающие и классифицируются возможные типы состояний электронов, локализованных вблизи поверхности. В п. 2 рассчитаны положения нижних уровней РК подзон в потенциальной яме изгиба зон эмиттера на основе $p\text{-GaAs}$, для которого к настоящему времени накоплен достаточно обширный экспериментальный материал по энергетическим спектрам фотоэмиссии.

1. *Граничные условия для огибающих и классификация особенностей спектра поверхностных электронов.* Для описания спектра объемных электронов воспользуемся изотропной моделью Кейна, пренебрегая спин-орбитальным взаимодействием. Для огибающих блоховских функций зоны проводимости $\varphi_c(\mathbf{r})$ и трех валентных зон $\varphi_v(\mathbf{r}) = (\varphi_x(\mathbf{r}), \varphi_y(\mathbf{r}), \varphi_z(\mathbf{r}))$ имеем уравнения [12]

$$\begin{aligned} [E - V(z)] \varphi_c(\mathbf{r}) + is \operatorname{div} \varphi_v(\mathbf{r}) &= 0, \\ \left(-\frac{\hbar^2}{2M} \operatorname{rot} \operatorname{rot} + E + E_g - V(z) \right) \varphi_v(\mathbf{r}) + is \operatorname{grad} \varphi_c(\mathbf{r}) &= 0. \end{aligned} \quad (1)$$

Здесь энергия E отсчитывается от дна зоны проводимости, $V(z)$ — потенциальная энергия электрона (ось Oz нормальна поверхности), M — масса тяжелых дырок, $s = (E_g/2m)^{1/2}$, m — масса электронов, \hbar — постоянная Планка. Полагая, что электроны отражаются от границы раздела $z=0$ зеркально, ограничимся рассмотрением движущихся по нормали к поверхности электронов. В этом случае все возможные решения однородны в плоскости xOy , что приводит к упрощению уравнений (1):

$$[E - V(z)] \varphi_c(z) + i s \frac{d}{dz} \varphi_z(z) = 0, \quad (2)$$

$$[E + E_g - V(z)] \varphi_z(z) + i s \frac{d}{dz} \varphi_c(z) = 0.$$

Уравнения (2) справедливы вплоть до границы раздела с вакуумом, на которой полная волновая функция электронов в кристалле должна быть спита с решением уравнения Шредингера в переходной к вакууму области. Вместо проведения процедуры шивки сформулируем, как это делается в теории таммовских состояний (см., например, [11]), граничные условия для огибающих.

Ввиду линейности системы (2) и уравнений шивки граничное условие в наиболее общем виде может быть записано как линейная комбинация решений (2)

$$i \varphi_z(0) - \Delta \varphi_c(0) = 0, \quad (3)$$

где для состояний, расположенных выше порога эмиссии, величина Δ является комплексной, а именно $\Delta = \Delta_R + i \Delta_I$ (i — мнимая единица). Этим (3) отличается от граничного условия для стационарных состояний, не переносящих ток, для которых $\Delta_I = 0$. Ясно, что мнимая часть величины Δ пропорциональна логарифмической производной вакуумной волновой функции электрона, соответствующей инфинитному движению. Асимптотика ее вдали от кристалла при $z \rightarrow +\infty$ должна быть выбрана такой, чтобы соответствовала уходящей волне. Если потенциальная энергия электрона в вакууме не зависит от координат, т. е. $V_{\text{вак}}(z) = V_0$, то волновая функция инфинитного движения имеет вид $\psi \sim \exp(ik_z z)$ (k_z — нормальная плоскости раздела составляющая волнового вектора электрона в вакууме). При этом $(\psi'/\psi)_{z=0} = ik_z$, т. е. $\Delta_I \sim k_z$. В действительности для низкоэнергетических электронов следует учесть потенциальную энергию в поле сил изображения $V_{\text{вак}}(z) = V_0 - (e^2/4z) [(x-1)/(x+1)]$, где e — элементарный заряд, x — статическая диэлектрическая проницаемость полупроводника. Влияние потенциала сил изображения приводит к тому, что логарифмическая производная вакуумной волновой функции вблизи порога эмиссии (выше его) не зависит от энергии электрона [13, 14]. Пороговое приближение хорошо выполняется вплоть до энергий порядка $E - V_0 \sim R y^*$, где $R y^* = (m_0 e^* \hbar^2) \approx 1$ эВ. Здесь эффективный заряд определяется соотношением $e^* = (e^2/4) [(x-1)/(x+1)]$. Этот диапазон энергий для ОЭС полупроводников, как правило, шире той области энергий вблизи уровня вакуума, в которой происходит эмиссия электронов, возбуждаемых квантами излучения с энергией $\hbar \omega$ вблизи порога поглощения $\hbar \omega - E_g \ll R y^*$. По этой причине мнимая часть Δ не зависит вблизи порога эмиссии, но выше его от энергии электрона в вакууме. Будем в дальнейшем полагать Δ_R и Δ_I вообще не зависящими от энергии, по крайней мере, в интересующем нас энергетическом диапазоне $E - V_0 < R y^*$ вблизи уровня вакуума. Такое предположение основывается, как и в теории таммовских состояний [11] глубоко под уровнем вакуума, на короткодействующем характере (по сравнению с длиной волны электрона) потенциальной энергии перехода кристалл—вакуум, а также на слабой зависимости от энергии других решений уравнения Шредингера в полупроводнике и вакууме, кроме выделенных уравнениями (2) огибающих.

Рассмотрим теперь возможные состояния электронов, описываемые системой уравнений (2) с граничными условиями (3). Мы интересуемся спадающими в глубь полупроводника ($z \rightarrow -\infty$) решениями. Заранее очевидно, что выше уровня вакуума все возможные состояния нестационарны, т. е. соответствуют комплексным значениям энергии $E = E_s - i\Gamma/2$. Нас интересуют долгоживущие, т. е. квазистационарные, состояния с малым затуханием $\Gamma \ll |E_s|$, распадающиеся вследствие эмиссии электронов из них в вакуум. При этом плотность потока в вакуум $v_z = 2s \operatorname{Re}(\varphi_c^* \varphi_z)_{z=0} = 2s \Delta_I |\varphi_c(0)|^2 > 0$. Это накладывает ограничение на знак Δ_I , а именно должно быть $\Delta_I > 0$. Квазистационарные решения с энергией связи $E_s < 0$ ранее были рассмотрены в [10] в приближении эффективной массы. Рассмотрим эти состояния с учетом непараболичности в схеме плоских зон $V(z) = 0$. Другими словами, мы рассматриваем квазиста-

ционарные таммовские состояния. Уравнение для определения энергии E_s и затухания Γ таких поверхностных состояний следует из (2) и (3)

$$\left(\frac{|E_s| + i(\Gamma/2)}{E_g - |E_s| - i(\Gamma/2)} \right)^{1/2} = \Delta_R + i\Delta_I.$$

Для квазистационарных состояний $|E_s| = E_g \Delta_R^2 / (1 + \Delta_R^2)$, $\Gamma = E_g 4\Delta_I \Delta_R / (1 + \Delta_R^2)^2$. Условие их существования являются неравенства $\Delta_R > 0$; $\Delta_R \gg \Delta_I$. При этом коэффициент прохождения электронов из объемных состояний зоны проводимости в вакуум [10], выражение для которого мы приведем с учетом непараболичности, мал

$$T(E) = \left[\frac{4\Delta_I [E(E + E_g)^3]^{1/2}}{E_g^2} \right] \left[\left(\frac{[E(E + E_g)^3]^{1/2}}{E_g^2} + \Delta_I \right)^2 + \Delta_R^2 \right]^{-1}. \quad (4)$$

Действительно, $T_{\max} = 2(\Delta_I/|\Delta_R|) \ll 1$, следовательно, состояния рассматриваемого типа могут существовать вблизи поверхности ОЭС эмиттера, хорошо отражающей электроны. При наличии потенциальной ямы изгиба зон обсуждаемые поверхностные состояния гибридизируются с размерно-квантованными состояниями. Положения нижних уровней гибридизированных подзон вычислены в п. 2.

Рассмотрим возможные решения уравнений (2), локализованные вблизи поверхности полупроводника в области положительных энергий $E_s > 0$, т. е. в непрерывном спектре зоны проводимости. По существующей классификации такие состояния называются резонансными. Выбрав волновую функцию в виде $\varphi_c(z) \sim \exp\{i[E(E + E_g)]^{1/2}z/\hbar s\}$, что обеспечивает ее экспоненциальное спадание, по крайней мере, для $\Delta_R > 0$ в глубь полупроводника $|\varphi_c(z)| \sim \sim \exp\{\Delta_R(E + E_g) + \Delta_I(\Gamma/2)z/\hbar s\}$, получим уравнение для определения энергий $E = E_s - i(\Gamma/2)$

$$i \left(\frac{E_s - i(\Gamma/2)}{E_g + E_s + i(\Gamma/2)} \right)^{1/2} = \Delta_R + i\Delta_I.$$

Резонансное состояние с энергией $E_s = E_g \Delta_I^2 / (1 - \Delta_I^2)$ и затуханием $\Gamma = [4\Delta_I \Delta_R / (1 - \Delta_I^2)] E_g$ существует при выполнении условий $0 < \Delta_R \ll \Delta_I < 1$. Интересно отметить, что при таких соотношениях между параметрами коэффициент (4) прохождения в вакуум для объемных электронов с энергией $E = E_s$ достигает в максимуме $T_{\max} \simeq 1$.

При наличии потенциальной ямы резонансные состояния формируются совместным действием потенциальной энергии $V(z)$ и граничных условий (3). При этом резонанс может существовать и для $\Delta_R < 0$. Это удобно проследить для столь больших концентраций легирующей примеси, при которых ширина L области пространственного заряда меньше длины волны электрона с энергией E_s : $\lambda_s = \hbar/(2mE_s)^{1/2}$. Параболическую потенциальную яму $V(z) = -V_s(L + z^2/L^2)$ ($-L \leq z \leq 0$) при условии $(L/\lambda_s) \ll 1$ можно заменить эквивалентной короткодействующей $V(z) = -(V_s L/3)\delta(z)$, где $\delta(z)$ — дельта-функция, т. е. включить потенциальную энергию в граничное условие на огибающие при $z=0$. В результате получим граничное условие (3), в котором величина Δ_R должна быть заменена на $\Delta_R + (V_s L/3\hbar s)$. Это означает, что условием существования резонанса является $\Delta_R > -(V_s L/3\hbar s)$, т. е. допустимы и отрицательные значения Δ_R .

Таким образом, вблизи поверхности ОЭС эмиттера возможно существование долгоживущих резонансных состояний, расположенных по энергиям выше дна зоны проводимости. Вероятности выхода в вакуум электронов из объемных состояний зоны проводимости и из локализованных резонансных существенно различаются. Объемные электроны с энергией вблизи резонанса выходят в вакуум с вероятностью $T_{\max} \simeq 1$, электроны же, попавшие в резонансное состояние, выходят в вакуум за время жизни $\tau = (\hbar/\Gamma)$, а вероятность их выхода в вакуум при одном ударе о поверхность можно оценить как $T_s \sim (\Gamma/E_s) \ll 1$.

2. Расчет положений нижних уровней подзон размерного квантования. Обратимся к расчету энергий электронных состояний, локализованных в потенциальной яме изгиба зон у поверхности, хорошо отражающей электроны: $|\Delta_R| \gg \Delta_I$.

Уравнение для огибающей $\varphi_c(\xi)$, зависящей от нормированной переменной $\xi=(z+L)/L$, следует из (2)

$$\frac{d}{d\xi} \left(\frac{\delta}{\delta - \varepsilon + \xi^2} \frac{d}{d\xi} \varphi_c(\xi) \right) + \gamma^2 (\xi^2 - \varepsilon) \varphi_c(\xi) = 0 \quad (5)$$

с граничными условиями

$$\begin{aligned} \varphi'_c(0) &= \gamma [\delta(\delta - \varepsilon)]^{1/2} \varphi_c(0), \\ \varphi'_c(1) &= \gamma \Delta_R (1 + \delta - \varepsilon) \varphi_c(1). \end{aligned} \quad (6)$$

Здесь $\varepsilon = -(E/V_s)$, $\gamma = (V_s/\hbar\omega_s)(V_s/E_g)^{1/2}$, $\delta = (E_g/V_s)$, $\omega_s = (4\pi N_A e^2/\kappa m)^{1/2}$.

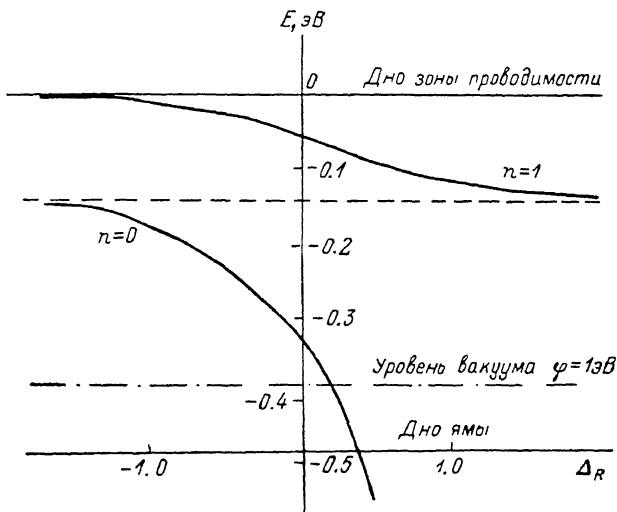


Рис. 1. Зависимость положений нижних уровней подзон в потенциальной яме вблизи поверхности p -GaAs с отрицательным электронным средством от параметра Δ_R .

Концентрация легирующей примеси $N_A = 6 \cdot 10^{18} \text{ см}^{-3}$.

Зависимость величин изгиба зон от концентрации N_A примеси учитываем в предположении «пиннинга» уровня Ферми на поверхности. Энергия закрепления уровня Ферми на поверхности ОЭС эмиттера на основе p -GaAs выбирали равной $E_F = 0.5 \text{ эВ}$, считая от потолка валентной зоны на поверхности. Собственные значения ε уравнения (5) с граничными условиями (6) находили численно на ЭВМ методом, изложенным в [5], в диапазоне концентраций примеси $N_A = 10^{17} \div 5 \cdot 10^{19} \text{ см}^{-3}$ и значений параметра $|\Delta_R| \leq 5$. Точность определения собственных значений была не хуже 10^{-4} .

На рис. 1 изображены энергии E_n нижних уровней, т. е. дна подзон, в зависимости от Δ_R для $N_A = 6 \cdot 10^{18} \text{ см}^{-3}$. Глубина потенциальной ямы для этой концентрации составляет $V_s = 0.48 \text{ эВ}$. При отрицательных $\Delta_R > -2$ существуют две подзоны, нижние уровни которых понижаются с увеличением Δ_R . При переходе к положительным значениям Δ_R уровень $n=0$, более других гибридизированный с поверхностным состоянием, пересекает дно потенциальной ямы и углубляется в пределы запрещенной зоны на поверхности полупроводника. Таким образом, в зависимости от величины Δ_R , фигурирующей в граничном условии (6), структура нижних уровней подзон претерпевает существенные изменения. Наряду с перестановкой уровней $E_{n+1} \rightarrow E_n$ при изменении параметра Δ_R от отрицательных к положительным значениям, связанным с изменением фазы волновой функции на поверхности на π , наблюдается отщепление поверхностного уровня, гибридизированного с основным ($n=0$) состоянием в потенциальной яме. При этом уровень $n=0$ ведет себя в зависимости от Δ_R как размерно-квантованный при отрицательных и как поверхностный — при положительных значениях Δ_R .

Зависимость изображений нижних уровней E_n от концентрации N_A акцепторной примеси изображена на рис. 2. Там же изображены уровень дна потенциальной ямы $V_s(N_A)$, а также уровень вакуума для двух значений работы выхода вплоть до $\varphi=0.8$ эВ — наименьшей работы выхода, наблюдавшейся для ОЭС эмиттера на основе p -GaAs по нижнему краю энергетического спектра фотоэмиссии [8]. Уровень дна поверхностной подзоны ($n=0$, $\Delta_R > 0$) показан для нескольких значений параметра Δ_R . Как следует из представленных результатов, уровни подзон, волновые функции которых имеют хотя бы один узел ($n \geq 1$), при увеличении концентрации выталкиваются из потенциальной ямы. Концентрация, при которой исчезает уровень $n=1$ в зависимости от значений Δ_R , находится в диапазоне $N_A=5 \cdot 10^{18} \div 5 \cdot 10^{19} \text{ см}^{-3}$. Однако это не означает отсутствия более глубокой подзоны с $n=0$. Так, например, при $\Delta_R=0$ основной

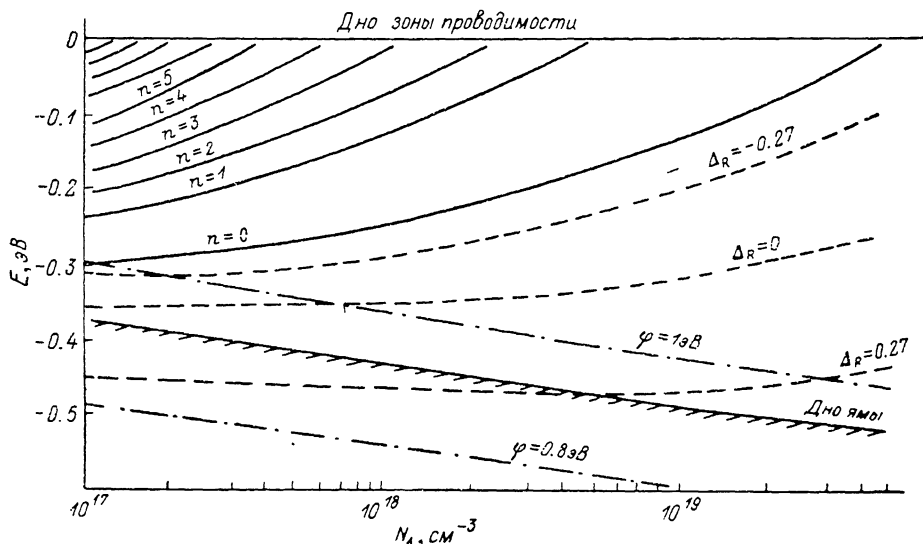


Рис. 2. Зависимость положений нижних уровней подзон в p -GaAs от концентрации примеси при $\Delta_R \rightarrow +\infty$.

Энергия E отсчитывается от дна зоны проводимости в объеме. Штриховые кривые — положение дна нижней ($n=0$) подзоны при различных Δ_R .

уровень $n=0$ хотя и расположен выше дна ямы, однако при увеличении концентрации ведет себя подобно поверхностному. Его положение слабо зависит от N_A , а в диапазоне $N_A=10^{17} \div 10^{18} \text{ см}^{-3}$ этот уровень несколько углубляется, что связано с большим влиянием на его положение увеличения глубины ямы по сравнению с уменьшением ее ширины.

Эксперимент показывает, что каждому определенному значению концентрации в области $N_A < 5 \cdot 10^{19} \text{ см}^{-3}$ соответствует определенное положение нижнего пика в энергетическом распределении фотоэлектронов. В области, близкой к квазиклассической, при концентрациях $N_A \approx 10^{17} \text{ см}^{-3}$, когда число подзон в потенциальной яме достигает $n=9$, пик энергетического распределения не привязан к нижнему краю спектра поверхностных электронов, а, как показывают расчеты [2], располагается вблизи дна зоны проводимости. Иная ситуация складывается в квантовой области. В этом случае сдвиг пика распределения вниз по энергиям, если считать от дна зоны проводимости, в объеме составляет $\Delta E \approx 0.1$ эВ, достигая в отдельных случаях [8] величины $\Delta E=0.3$ эВ. Наши расчеты показывают, что каждому значению ΔE в этой области концентраций вплоть до $N_A=5 \cdot 10^{19} \text{ см}^{-3}$ можно указать такое значение параметра Δ_R , что положение нижнего поверхностного либо первого РК уровня совпадет с экспериментальным значением ΔE . Это обстоятельство с учетом того, что решение кинетического уравнения для функции распределения электронов, релаксирующих по энергиям в двумерной подзоне, содержащее в предельном случае малой прозрачности поверхностного барьера пик, смещенный на дно подзоны [4], кажется нам важным для объяснения положения нижнего пика энергетического распределения фотоэмиссии в рамках квантовой модели [1].

Как отмечалось во *Введении*, в настоящее время не существует результатов измерений положений РК подзон прямыми методами, которые позволили бы определить величину Δ_R независимо, а затем сравнить положение низкоэнергетического пика фотоэмиссии с приведенными здесь расчетами положений подзон. Одним из прямых методов является метод фотоэмиссии с разрешением по углам вылета электронов. Этот метод, как показано в [6], позволяет в применении к ОЭС полупроводникам, во-первых, идентифицировать эмиссию из двумерных состояний, во-вторых, измерить положение дна каждой из двумерных подзон, существующих в области изгиба зон. Проведение таких измерений позволило бы окончательно разрешить вопрос не только о механизме эмиссии из полупроводников с отрицательным электронным сродством, но и о влиянии ненулевых граничных условий на спектр локализованных у поверхности электронов.

Заключение. В заключение кратко охарактеризуем полученные результаты. В расчетах положений уровней электронов в квантовой потенциальной яме изгиба зон нет оснований использовать только нулевое граничное условие на огибающую волновой функции даже в приближении эффективной массы. В предложенной выше схеме расчетов влияние границы раздела на огибающие электронов, находящихся по энергиям выше уровня вакуума, описывается двумя параметрами — Δ_R и Δ_I . Малым значениям коэффициента прохождения электронов в вакуум соответствует соотношение $|\Delta_R| \gg \Delta_I$. В этом случае величина Δ_I пропорциональна туннельной прозрачности барьера на границе раздела, а Δ_R^{-1} — длине рассеяния электронов на нем [10]. Предположение, что длина рассеяния электронов конечна, приводит к сдвигу уровней размерного квантования из положений, соответствующих нулевому граничному условию на огибающую ($|\Delta_R| \rightarrow \infty$), а также отщеплению от нижнего состояния ($n=0$) поверхностного состояния, которое при достаточно больших положительных Δ_R пересекает дно потенциальной ямы, углубляясь ниже его при возрастании Δ_R . В пределе больших концентраций легирующей примеси энергия поверхностного состояния ($n=0$, $\Delta_R > 0$) стремится к своему значению, вычисленному в схеме плоских зон $|E_s| = E_g \Delta_R^2 / (1 + \Delta_R^2)$.

Нами показана возможность существования вблизи поверхности ОЭС эмиттера долгоживущих резонансных состояний. Резонансные состояния являются своего рода ловушками для электронов, которые, будучи захваченными в них, имеют малую вероятность выйти в вакуум при однократном соударении с поверхностью. Именно по этой причине резонансные состояния должны рассматриваться в теории фотоэмиссии из полупроводников с отрицательным электронным сродством, хотя они и соответствуют эмиттерам, хорошо пропускающим в вакуум находящиеся в окрестности резонанса объемные электроны зоны проводимости. Резонансные локализованные состояния затухают в глубь полупроводника на макроскопических расстояниях и могут оказать влияние на процессы фотогенерации и энергетической релаксации электронов.

Л и т е р а т у р а

- [1] Коротких В. Л., Мусатов А. Л., Шадрин В. Д. Влияние размерного квантования энергетических уровней в полупроводниках на фотоэлектронную эмиссию. — Письма ЖЭТФ, 1978, т. 27, в. 11, с. 652—655.
- [2] Коган Ш. М., Коринфский А. Д., Мусатов А. Л., Полуланов А. Ф., Гейзер С. В. Спектры энергии фотоэлектронов, эмиттированных из фотокатодов с отрицательным электронным сродством. Эксперимент на GaAs и теория. — Изв. АН СССР, сер. физ., 1985, т. 49, в. 9, с. 1745—1750.
- [3] Неустроев Л. Н., Осипов В. В. Теория энергетических распределений фотоэмиссии из полупроводников с отрицательным электронным сродством. — ФТТ, 1985, т. 27, в. 11, с. 3340—3346.
- [4] Горшков В. А., Шадрин В. Д. Теория энергетических спектров фотоэмиссии из полупроводников с отрицательным электронным сродством. — ФТТ, 1984, т. 26, в. 7, с. 1926—1932.
- [5] Полуланов А. Ф. Спектр энергии и волновые функции электронов в приповерхностной потенциальной яме полупроводника. — ФТП, 1985, т. 19, в. 9, с. 1647—1650.
- [6] Шадрин В. Д. Угловое распределение электронов, эмиттированных из поверхностной подзоны полупроводника со сниженной работой выхода. — ФТТ, 1979, т. 21, в. 8, с. 2495—2497.

- [7] Мусатов А. Л., Коротких В. Л., Шадрин В. Д. Фотоэлектронные спектры GaAs и InGaAs фотокатодов с отрицательным электронным средством. — ФТТ, 1981, т. 23, в. 3, с. 929—931.
- [8] Полле Э. Л., Петров А. Э., Ботнев С. А. Влияние поверхности на вероятность выхода электронов из GaAs. — ФТТ, 1985, т. 28, в. 9, с. 2817—2819.
- [9] Drouhin H.-J., Herman C., Lampel G. — Phys. Rev., 1985, v. B31, N 6, p. 3859—3871; 1985, v. B31, N 6, p. 3872—3886.
- [10] Шадрин В. Д. Резонансное прохождение медленных электронов в вакуум из полупроводников с отрицательным электронным средством. — ФТП, 1983, т. 17, в. 5, с. 869—872.
- [11] Волков В. А., Пинскер Т. Н. Размерное квантование и поверхностные состояния в полупроводниках. — ЖЭТФ, 1976, т. 70, в. 6, с. 2268—2278.
- [12] Келдыш Л. В. Глубокие уровни в полупроводниках. — ЖЭТФ, 1963, т. 45, в. 8, с. 364—375.
- [13] Базь А. И., Зельдович Б. Я., Переломов А. М. Рассеяние, реакции и распады в нерелятивистской квантовой механике. М., 1971. 544 с.
- [14] Дмитриев С. Г. Влияние макроскопического поля вблизи границы кристалла на коэффициент отражения медленных электронов. — ЖЭТФ, 1981, т. 81, в. 8, с. 678—681.

Получена 20.08.1986
Принята к печати 16.06.1987
