

Динамические силы изображения вблизи границ раздела полупроводник–вакуум: роль квантовомеханических поправок

© А.И. Войтенко, А.М. Габович

Институт физики Национальной академии наук Украины,
03650 Киев, Украина

E-mail: collrphen@iop.kiev.ua

(Поступила в Редакцию 26 февраля 2001 г.)

Методом теории возмущений рассчитана энергия динамических сил изображения, действующих на зараженную частицу, движущуюся перпендикулярно границе раздела полупроводник–вакуум или в вакуумном промежутке между двумя полупроводниками. В используемом диэлектрическом подходе учитываются пространственная и временная дисперсии диэлектрических функций электродов. Показано, что необходимо принимать во внимание квантовомеханический характер экранировки. В частности, динамические поправки к статическим силам изображения оказываются меньшими по сравнению с таковыми в квазиклассической модели. Таким образом, расширяется область внешних электростатических полей и энергий частиц, где применим используемый метод теории возмущений.

Работа выполнена при частичной поддержке Украинского фонда фундаментальных исследований.

Термином "силы изображения" обозначают поляризационные силы, возникающие вблизи границ раздела (ГР) отличающихся друг от друга сред. В рамках диэлектрического формализма [1–4] эти силы можно рассматривать с весьма общих позиций, учитывая пространственную (\mathbf{k}) и временную (ω) дисперсии диэлектрической проницаемости $\varepsilon_i(\mathbf{k}, \omega)$ [5]. В классической модели такой подход является наиболее общим, поскольку позволяет ввести в рассмотрение данной задачи квазичастичные возбуждения (например, в случае металла [6]). Однако ряд квантово-механических эффектов выходит за рамки диэлектрического подхода, в частности, диссипация, имеющая место благодаря рождению квантов реальных плазмонов [7,8], возбуждениям электрон-дырочной среды [8] или явлению отдачи [7]. В этом случае более адекватным, по-видимому, является гамильтонов метод [7].

При расчетах сил изображения или соответствующей потенциальной энергии W основная трудность заключается в адекватном описании ГР как неоднородности системы и характера отражения от нее квазичастиц [4,9,10]. Два наиболее простых приближения, а именно бесконечно большого потенциального барьера (infinite barrier model — IBM), т.е. резкой ГР, и зеркального отражения квазичастиц, делают задачу решаемой аналитически в статическом пределе, так что конечное выражение для W включает объемные диэлектрические функции $\varepsilon_i(\mathbf{k}, \omega = 0)$. Другие приближения допускают некоторую степень размытости ГР и диффузности рассеяния на ней квазичастиц, но в большинстве случаев приводят к численно мало отличающимся результатам для интересующих нас величин [11].

В то же время модели IBM и зеркального отражения позволяют исследовать более интересный случай движущихся зарядов [3,7,8,11–24]. Оказалось, что для ГР металл–вакуум пространственная дисперсия диэлектрической проницаемости (экранировка) [1,2,11,15],

квантовомеханическая отдача [7] и конечность скорости падающей частицы [11] — каждое явление в отдельности и совокупно — приводят к насыщению W на ГР и устранению классической расходимости.

Статическая теория сил изображения для резкой ГР вакуум–полупроводник была разработана нами раньше для приближения зеркального отражения [1,2,16]. Далее изложена теория, обобщенная на трехслойные структуры с учетом динамических поправок.

В работе [17] также изучались силы изображения в структурах металл–вакуум–полупроводник. Однако там рассматривался только статический случай, и для диэлектрической функции полупроводника использовалась полуклассическая модель Инксона [18]. В данной работе показана необходимость учета квантовомеханической природы носителей заряда экранирующих сред в задачах подобного типа. Этот учет в рамках диэлектрического подхода может быть проведен, например, путем введения соответствующих поправок в диэлектрическую функцию полупроводника [19]. Сразу же отметим, что из-за большого значения диэлектрической постоянной металла для металлических электродов квантовые поправки оказываются не столь существенными.

Здесь ограничимся рассмотрением только области вакуума, хотя профили потенциала сил изображения $W(r)$, где r — координата, отсчитываемая от ГР, могли бы быть получены и в объеме полупроводника ($r < 0$) в рамках того же метода [1,16]. Вообще говоря, поведение W внутри электрода важно, например, при формировании приповерхностных барьеров и может сказаться на результирующих туннельных токах. Однако экранирующие свойства полупроводников (а тем более металлов) таковы, что профиль потенциала сил изображения внутри полупроводника чрезвычайно быстро достигает уровня постоянного внутриобъемного (bulk) значения, так что, как было показано ранее [17], даже замена точного профиля $W(r < 0)$ на это постоянное

значение слабо влияет на туннельные характеристики. Рассчитываемый нами вакуумный участок зависимости $W(r > 0)$ в значительно большей степени зависит от параметров задачи и вносит основной вклад в формирование приповерхностного барьера. Мы не будем здесь более касаться этого вопроса, поскольку исследование туннелирования в полупроводниковых структурах выходит за рамки данной публикации. Отметим также, что знание профилей $W(r > 0)$ вблизи поверхности полупроводника необходимо не только при изучении электронного туннелирования, но и для адекватного описания рассеяния заряженных частиц на такой поверхности и при рассмотрении ряда задач химической кинетики.

1. Теория

На рис. 1 схематически представлена исследуемая конфигурация: плоско-параллельный трехслойный сэндвич с межэлектродным расстоянием $2l$ и заряд q , движущийся перпендикулярно ГР вдоль оси z по закону $z_0(t)$, где t — время. Временная дисперсия диэлектрических проницаемостей ε_i учитывается во всех трех средах, тогда как пространственная — не только во внешних слоях ($i = 1, 3$).

Потенциальная энергия сил изображения W , т. е. энергия внешнего заряда q в потенциальном поле V_{ind} , индуцированном поляризационными зарядами, наведенными в электродах, равна

$$W(z_0(t)) = \frac{1}{2} qV_{ind}[x = y = 0, z_0(t), t]. \quad (1)$$

В модели ИВМ с зеркальным отражением на ГР возникновение V_{ind} связано [11] с появлением заряженных плоскостей ($x, y, z = \mp l$), совпадающих с ГР. При этом полностью пренебрегается "провисанием" электронов в межэлектродный промежуток [10], эффектами изгиба

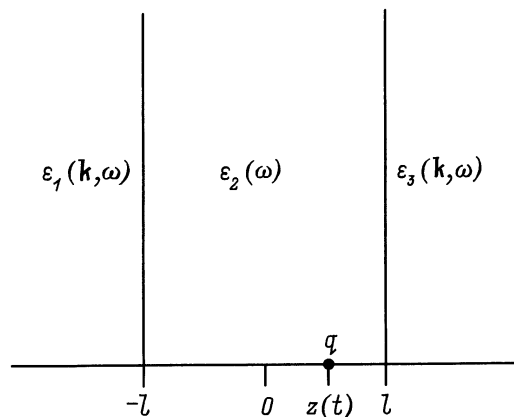


Рис. 1. Заряд q , движущийся по закону $z_0(t)$ поперек прослойки шириной $2l$ в трехслойной системе. В диэлектрических проницаемостях ε_i всех трех слоев учитывается временная дисперсия, тогда как пространственная — только в обкладках ($i = 1, 3$).

зон [20] и возможным образованием поверхностных состояний вблизи полупроводника [21]. Таким образом, внешние обкладки считаются однородными вплоть до соответствующей ГР.

Вывод общего уравнения для $W[z_0(t)]$, когда закон движения заряда $z_0(t)$ в промежутке произволен, дан в работах [3,14]. Для нерелятивистских скоростей $v \ll c$, c — скорость света, мы разработали общий метод получения методом возмущений динамических (неадиабатических) поправок $\Delta W[z_0(t)]$ к энергии статических сил изображения $W_{st}[z_0(t)]$, т. е. первые предполагаются малыми по сравнению со вторыми. Конечно, используемые разложения могут оказаться неправильными, например при аккумуляровании вкладов от всех предыдущих моментов $t' < t$ при достаточно протяженной траектории частицы. В частности, если пространственная дисперсия предполагается отсутствующей, энергия W для заряда, эмиттируемого из металла в вакуум с постоянной скоростью [11] или постоянным ускорением [22], содержит на больших расстояниях от ГР осциллирующие слагаемые, сравнимые по величине с соответствующими асимптотическими значениями классической модели

$$W_{cl}^{met}[z_0(t)] = -\frac{q^2}{4z_0(t)}. \quad (2)$$

Они появляются вследствие рождения реальных поверхностных плазмонов [11]. Однако учет имеющего затухания плазмонов существенно уменьшает амплитуду колебаний [23], что значительно расширяет область применимости метода. В любом случае правильность полученного пертурбационного решения может быть проверена a posteriori после вычисления ΔW и W_{st} .

Ограничимся анализом недиссипативных ε_i , которые в этом случае являются четными функциями ω . При этом, разумеется, нельзя претендовать на описание поглощения и генерации реальных плазмонов или квантов полярных фононов (такие процессы могут быть адекватно описаны в рамках гамильтониана метода [7]). Тогда ΔW принимает только действительные значения. Приведенные далее численные расчеты показывают, что для поставленных целей достаточно ограничиться первой динамической поправкой.

Для простоты рассмотрим вакуумный промежуток с $\varepsilon_2 \equiv 1$. Тогда в принятом приближении энергия статических сил изображения и динамическая поправка принимают вид [3]

$$W_{st}[z(t)] = -\frac{q^2}{2} \int_0^\infty dk_{\parallel} \frac{\exp(-2k_{\parallel}l)}{1 - \alpha_1(k_{\parallel}, 0)\alpha_3(k_{\parallel}, 0) \exp(-4k_{\parallel}l)} \times \left[\alpha_1(k_{\parallel}, 0)e^{-2k_{\parallel}z} + \alpha_3(k_{\parallel}, 0)e^{2k_{\parallel}z} - 2\alpha_1(k_{\parallel}, 0)\alpha_3(k_{\parallel}, 0)e^{-2k_{\parallel}l} \right], \quad (3)$$

$$\begin{aligned} \Delta W[z(t)] = & \frac{q^2}{4} \int_0^\infty dk_{\parallel} \frac{\exp(-2k_{\parallel}l)}{[1 - \alpha_1(k_{\parallel}, 0)\alpha_3(k_{\parallel}, 0)\exp(-4k_{\parallel}l)]^2} \\ & \times \left\{ k_{\parallel}(\ddot{z} + k_{\parallel}\dot{z}^2)e^{2k_{\parallel}z} [\alpha_3''(k_{\parallel}, 0) \right. \\ & + \alpha_1''(k_{\parallel}, 0)\alpha_3^2(k_{\parallel}, 0)e^{-4k_{\parallel}l}] - k_{\parallel}(\ddot{z} - k_{\parallel}\dot{z}^2)e^{-2k_{\parallel}z} \\ & \times [\alpha_1''(k_{\parallel}, 0) + \alpha_3''(k_{\parallel}, 0)\alpha_1^2(k_{\parallel}, 0)e^{-4k_{\parallel}l}] \\ & - 2k_{\parallel}^2\dot{z}^2e^{-2k_{\parallel}l} [\alpha_1''(k_{\parallel}, 0)\alpha_3(k_{\parallel}, 0) \\ & \left. + \alpha_3''(k_{\parallel}, 0)\alpha_1(k_{\parallel}, 0)] \right\}, \quad (4) \end{aligned}$$

где с целью упрощения вида уравнений здесь и далее будем писать $z(t)$ вместо $z_0(t)$; точки и штрихи обозначают дифференцирование по времени и частоте соответственно, $k_{\parallel} = |\mathbf{k}_{\parallel}|$, волновой вектор \mathbf{k}_{\parallel} представляет собой компоненту трехмерного волнового вектора $\mathbf{k} = (\mathbf{k}_{\parallel}, k_z)$, направленную вдоль ГР,

$$\alpha_i(k_{\parallel}, \omega) = \frac{\varepsilon_{si}(k_{\parallel}, \omega) - \varepsilon_2(\omega)}{\varepsilon_{si}(k_{\parallel}, \omega) + \varepsilon_2(\omega)}, \quad (i = 1, 3), \quad (5)$$

а

$$\varepsilon_{si}(k_{\parallel}, \omega) = \left[\frac{k_{\parallel}}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dk_z}{\mathbf{k}^2 \varepsilon_i(\mathbf{k}, \omega)} \right] - \quad (6)$$

так называемые поверхностные диэлектрические функции модели с зеркальным отражением.

2. Диэлектрическая проницаемость полупроводников

Для изотропных металлов диэлектрическая проницаемость $\varepsilon_L(\mathbf{k}, \omega)$ была получена Линдхардом [24] в рамках модели электронного газа с учетом квантовой интерференции электронных волн на поверхности Ферми. Хорошо известным различием между статическим пределом $\varepsilon_L(\mathbf{k}, \omega = 0)$ и полуклассической функцией экранировки Томаса–Ферми

$$\varepsilon_{TF}(\mathbf{k}) = 1 + \frac{\kappa^2}{k^2} \quad (7)$$

является присутствие в $\varepsilon_L(\mathbf{k}, 0)$ слабой квантовомеханической сингулярности при $k = 2k_F$, где k — волновой вектор Томаса–Ферми, а k_F — фермиевский импульс электронов металла. Ее наличие приводит, в частности, к фриделевским осцилляциям электронной плотности и коновским аномалиям в фоновом спектре. С другой стороны, существует иное следствие квантовой природы экранировки заряда, которое часто упускают из вида. А именно, коротковолновая асимптотика $\varepsilon_L(\mathbf{k}, 0)$ имеет вид

$$\lim_{|\mathbf{k}| \rightarrow \infty} \varepsilon_L(\mathbf{k}, 0) \approx 1 + \frac{4\kappa^2 k_F^2}{3k^4}. \quad (8)$$

Более быстрое стремление к единице выражения (8) по сравнению с (7) изменяет экранировку кулоновского поля на малых расстояниях.

В собственных полупроводниках потенциальные носители тока связаны, а запрещенная зона определяет их экранирующую способность. Большое количество теоретических исследований их диэлектрической проницаемости $\varepsilon_{semi}(\mathbf{k}, 0)$ было выполнено в приближении хаотических фаз [25] в рамках модели почти свободного электронного газа с учетом отражения электронных волн на брэгговских плоскостях [26]. Впоследствии модель Пенна [26] была дополнена [27], чтобы включить также и временную дисперсию. В то же время существует иной подход, предложенный Реста [28], который решил линейаризованный вариант уравнения Томаса–Ферми для полупроводника, рассматриваемого как среда с конечной длиной неполного экранирования. Все выражения для $\varepsilon_{semi}(\mathbf{k}, \omega)$, полученные в этих теориях, либо неаналитичны, либо громоздки, хотя отнюдь не выведены из первых принципов. Следует заметить, что диэлектрический подход, базирующийся на модели квазисвободного электронного газа, не учитывает возможные межзонные переходы электронов остова (d - или f -), которые решающим образом важны, например, для Cu [8]. С другой стороны, зондирование таких полупроводников как Si быстрыми электронами выявляет хорошо определенные плазменные колебания валентных электронов [8,29]. Во всяком случае, надлежащее описание электронного газа (жидкости) для оптического диапазона частот ω остается под вопросом [13].

В то же время Инксон [30] предложил простую интерполяционную формулу для $\varepsilon_{semi}(\mathbf{k}, \omega)$, которая удовлетворяет набору фундаментальных требований для истинной диэлектрической функции собственного полупроводника

$$\varepsilon_I(\mathbf{k}, \omega) = 1 + \left(\frac{1}{\varepsilon_0 - 1} + \frac{k^2}{\kappa^2} - \frac{\omega^2}{\omega_p^2} \right)^{-1}, \quad (9)$$

где ω_p — плазменная частота гипотетического свободного электронного газа с той же плотностью, что и у валентных электронов. Для сильной ионности ($\varepsilon_0 \rightarrow \infty$) формула (9) стремится к гидродинамическому пределу, описывающему проводящие среды. Примечательно, что именно формула (9) с точностью до обозначений часто используется для описания диэлектрической функции полярных растворителей [9].

К сожалению, несмотря на все преимущества $\varepsilon_I(\mathbf{k}, \omega)$ не удовлетворяет квантовомеханическому пределу (8), хотя связанные электроны при $|\mathbf{k}| \rightarrow \infty$ перестают отличаться от свободных. Чтобы улучшить поведение $\varepsilon_I(\mathbf{k}, \omega)$ для больших \mathbf{k} , предлагаем следующую модификацию:

$$\varepsilon_{SU}(\mathbf{k}, \omega) = 1 + \left[\frac{1}{\varepsilon_0 - 1} + \frac{k^2}{\kappa^2} \left(1 + \frac{3k^2}{4k_F^2} \right) - \frac{\omega^2}{\omega_p^2} \right]^{-1}, \quad (10)$$

которая при $\omega = 0$ совпадает со статической функцией Шульце–Унгера [16,19] и будет так же называться далее. Как $\varepsilon_I(\mathbf{k}, \omega)$, так и $\varepsilon_{SU}(\mathbf{k}, \omega)$ используется в дальнейшем для вычисления энергии сил изображения вблизи ГР полупроводник–вакуум.

3. ГР полупроводник–вакуум

Рассмотрим сначала ГР полупроводник–вакуум. Уравнение для этого случая могут быть легко получены из уравнений (3) и (4) для вакуумного промежутка введением расстояний $r_{\mp}(t) = l \pm z(t)$ до левой (правой) ГР и последующим устремлением $l \rightarrow \infty$. Тогда из-за экспоненциальных множителей все члены уравнений, включающие α_i и α_i'' для удаленной обкладки, обращаются в нуль. Соответственно в этом разделе мы вправе опустить все индексы, указывающие на конкретную ГР. Результирующие уравнения значительно упрощаются

$$W_{st}(r) = -\frac{q^2}{2} \int_0^{\infty} dk_{\parallel} \alpha(k_{\parallel}, 0) \exp(-2k_{\parallel}r), \quad (11)$$

$$\Delta W(r) = \frac{q^2}{4} \int_0^{\infty} dk_{\parallel} k_{\parallel} (k_{\parallel} \dot{r}^2 - \ddot{r}) \alpha''(k_{\parallel}, 0) \exp(-2k_{\parallel}r). \quad (12)$$

Рассмотрим два наипростейших и в то же время наиважнейших случая: движение заряда с постоянной скоростью v перпендикулярно ГР и равноускоренное движение частицы под действием внешнего поля F . Все вопросы, касающиеся проблем самосогласования, остаются за рамками данной статьи.

Для аппроксимации Инксона (9) могут быть получены дальняя и ближняя асимптотики уравнений (11) и (12). Например, для равноускоренного движения, когда $\kappa r \sqrt{\frac{\varepsilon_0}{\varepsilon_0 - 1}} \ll 1$,

$$W_{st}(r) \approx -\frac{q^2 \kappa \sqrt{\varepsilon_0(\varepsilon_0 - 1)}}{4} \left\{ 1 - \frac{\varepsilon_0 - 1}{\sqrt{\varepsilon_0}} \tan^{-1} \frac{1}{\varepsilon_0} + \frac{\kappa r}{\sqrt{\varepsilon_0(\varepsilon_0 - 1)}} \log \left(\gamma \kappa r \sqrt{\frac{\varepsilon_0}{\varepsilon_0 - 1}} \right) + \frac{\kappa r}{2\sqrt{\varepsilon_0(\varepsilon_0 - 1)}} \left[\varepsilon_0 - 2 - (\varepsilon_0^2 - 1) \log \frac{\varepsilon_0 + 1}{\varepsilon_0} \right] \right\}, \quad (13)$$

$$\Delta W(r) \approx -\frac{q^3 \kappa^2 F \varepsilon_0 (\varepsilon_0 - 1)}{8m\omega_p^2} \left\{ \frac{3}{2\varepsilon_0} - 1 + (\varepsilon_0 - 1) \log \frac{\varepsilon_0 + 1}{\varepsilon_0} + \frac{\kappa r}{\sqrt{\varepsilon_0(\varepsilon_0 - 1)}} \left[5\varepsilon_0^2 - \frac{14}{3}\varepsilon_0 - 3 - \frac{(\varepsilon_0^2 - 1)(5\varepsilon_0 - 3)}{\sqrt{\varepsilon_0}} \tan^{-1} \frac{1}{\sqrt{\varepsilon_0}} \right] \right\}, \quad (14)$$

(очевидно, что статический вклад (13) одинаков для равномерного и равноускоренного движений) и

$$W_{st}(r) \approx -\frac{q^2 \alpha_0}{4r} \left[1 - \frac{1}{\kappa r} \frac{\sqrt{\varepsilon_0(\varepsilon_0 - 1)}}{\varepsilon_0 + 1} \right], \quad (15)$$

$$\Delta W(r) \approx \frac{q^3 \alpha_0^2 F}{4m\omega_p^2 r^2}, \quad (16)$$

когда $\kappa r \sqrt{\frac{\varepsilon_0}{\varepsilon_0 - 1}} \gg 1$. Здесь

$$\alpha_0 = \frac{\varepsilon_0 - 1}{\varepsilon_0 + 1}, \quad (17)$$

m — масса частицы, и $\gamma = 1.7810\dots$ — постоянная Эйлера. Таким образом, в соответствии с вышесказанным как энергии статических сил изображения, так и динамическая поправка, благодаря пространственной дисперсии диэлектрической проницаемости, достигают насыщения на ГР. С другой стороны, на больших расстояниях восстанавливается обычная асимптотика классических статических сил изображения. При повышении ионности происходит приближение к металлическому пределу гидродинамической модели [3,12].

Следует заметить, что в случае равноускоренного движения знаки динамических поправок различны на больших и малых расстояниях. Общий анализ различных законов движения заряда приводится в работе [3].

Поразительная на первый взгляд схожесть экранирующих свойств (а следовательно, и сил изображения) для сред со свободными и связанными носителями тока находится в противоречии с распространенной до сих пор классической точкой зрения (см. например, [31]). Согласно последней, объемная экранировка в собственном полупроводнике уменьшает эффективное значение экранируемого заряда в ε_0 раз на любых расстояниях, где ε_0 — постоянная. С другой стороны, в квазиклассическом приближении [17,18,30] экранированный потенциал имеет вид (R — расстояние от заряда)

$$V_{semicl}(R) = \frac{q}{\varepsilon_0 R} \left[1 + (\varepsilon_0 - 1) \exp \left(-\kappa R \sqrt{\frac{\varepsilon_0}{\varepsilon_0 - 1}} \right) \right], \quad (18)$$

и классическая формула $V_{cl}(R) = q/\varepsilon_0 R$ следует отсюда при $R \gg \kappa^{-1}$. Однако в непосредственной близости от заряда $V_{semicl}(R \rightarrow 0) \approx q/R$, т.е. совпадает с ближней асимптотикой Томаса–Ферми. И это не удивительно, поскольку $\varepsilon_{semi}(\mathbf{k} \rightarrow \infty, \omega = 0) \rightarrow 1$, а не ε_0 . Опять-таки для большой ионности зависимость Томаса–Ферми для экранировки свободными электронами $V_{TF}(R) = (q/R) \exp(-\kappa R)$ может быть получена из полуклассической формулы (18) для полупроводников.

Учет пространственной дисперсии ε , но в координатном представлении был проведен в работе [32] при исследовании примесных состояний в сферических квантовых точках GaAs–Ga_{1-x}Al_xAs. А именно для диэлектрической функции была принята модель Хермансона [33]

$$\varepsilon^{-1}(R) = \varepsilon_0^{-1} + (1 - \varepsilon_0^{-1}) \exp(-R/R_0), \quad (19)$$

где R_0 — радиус экранирования. Легко видеть, что в этом случае потенциал вокруг точечного заряда $\tilde{V} = q/\varepsilon(R)$ имеет ту же асимптотику, что и $V_{semicl}(R)$ (уравнение (18)).

Возвращаясь к поставленной задаче, отметим, что все количественные оценки на основе формул (13)–(16) могут быть подтверждены численными расчетами, кото-

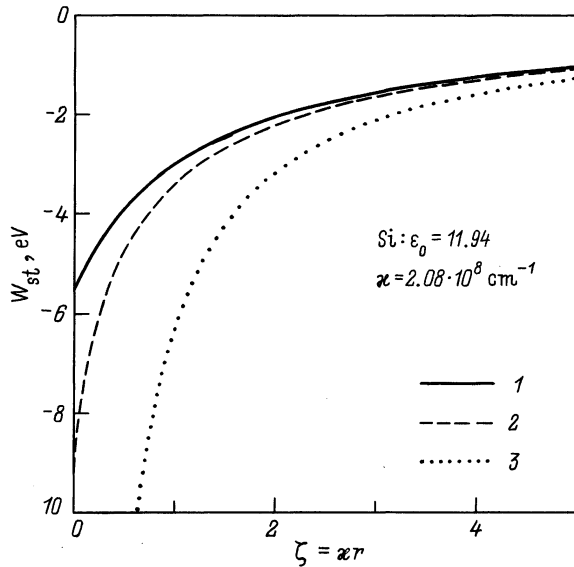


Рис. 2. Профили $W_{st}(r)$ вблизи границы раздела Si-вакуум для различных моделей. 1 — модель Шульце–Унгера, 2 — модель Инксона, 3 — классическая модель.

рые здесь не приводятся для сохранения компактности изложения.

В качестве модельного полупроводника был выбран Si со следующими параметрами: $\epsilon_0 = 11.94$, $\kappa = 2.08 \cdot 10^8 \text{ cm}^{-1}$, $k_F = 1.81 \cdot 10^8 \text{ cm}^{-1}$ и $\omega_p = 2.6 \cdot 10^{16} \text{ s}^{-1}$. Величина κ соответствует гипотетическому значению, когда все валентные электроны участвуют в экранировании [16]. В дальнейшем в качестве движущейся частицы рассматривается свободный электрон с соответствующими значениями q и m . На рис. 2 представлены профили статической поляризационной энергии W_{st} в вакууме вблизи ГР с Si в рамках моделей Инксона и Шульце–Унгера, а также проведено их сравнение с классической формулой

$$W_{cl}^{semi}(r) = -\frac{q^2 \alpha_0}{4r}. \quad (20)$$

Во всем диапазоне расстояний важных для физики и химии поверхности наблюдается громадное расхождение кривых, полученных с учетом и без учета зависимости $\epsilon_{semi}(\kappa, \omega)$. Становится очевидным, что квантовые эффекты в экранировке (8) весьма существенно влияют на ход зависимости $W_{st}(r)$ вблизи ГР: не только исчезает нефизическая особенность $[dW_{st}/dr]_{r \rightarrow 0}$, но и сама зависимость Шульце–Унгера является более полой, чем зависимость Инксона. Так, например, поверхностное значение $W_{st}^{SU}(0)$ почти в 2 раза меньше $W_{st}^I(0)$, что свидетельствует о том, что модель Инксона приводит к слишком большому значению этой величины.

Еще более необходимым становится учет квантовых эффектов при вычислении динамических поправок $\Delta W(r)$ и соответствующих полных профилей $W(r)$ энергии сил изображения. Дело в том, что значительно

уменьшается сама динамическая поправка по сравнению с таковой в модели Инксона, так что область применимости нашей схемы расчета [3,12,14] значительно расширяется. Это утверждение иллюстрируется рис. 3, где приведены профили $W_{st}(r)$ и $W(r)$ для исследуемых законов движения заряда и разных моделей. В случае равномерного движения скорость $v = (2E_0/m)^{1/2}$, где E_0 — кинетическая энергия частицы. Таким образом, учет квантового характера экранировки в $\epsilon(\kappa, \omega)$ делает наш подход справедливым практически во всем реальном диапазоне как внешних полей, так и энергий эмиттируемых (падающих) электронов, тогда как модель Инксона приводит к избыточной динамической перенормировке $W(r)$. Кроме того, так как эффективный параметр

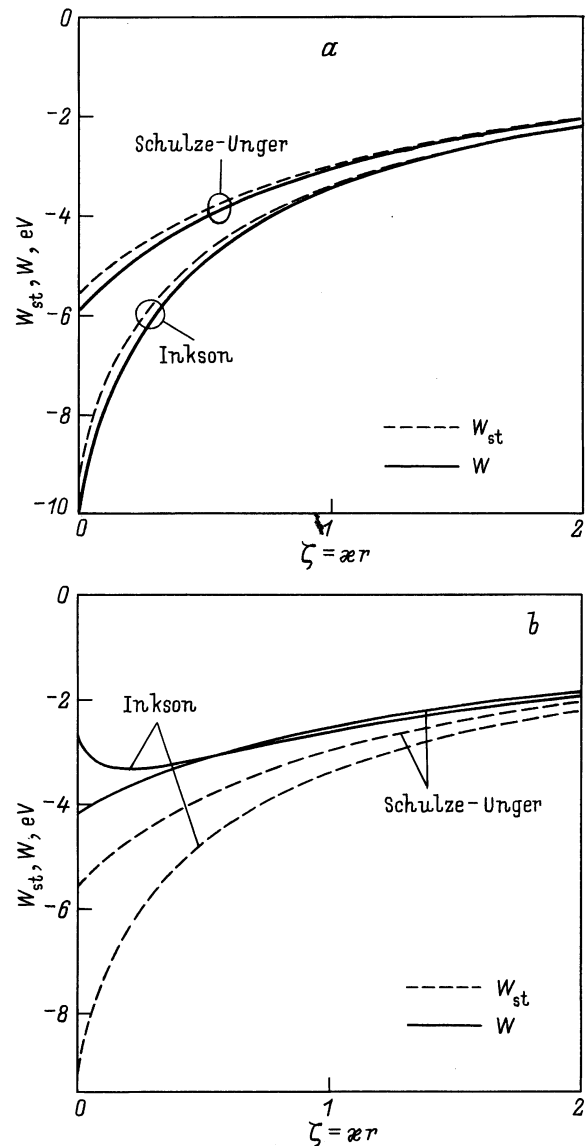


Рис. 3. Сравнение энергий динамических сил изображения W и их статических компонент W_{st} для различных описаний полупроводника (Si) в случае движений заряда: *a* — равномерного, под действием внешнего поля $F = 5 \cdot 10^8 \text{ V/cm}$; *b* — равномерно, с кинетической энергией $E_0 = 10 \text{ eV}$.

разложения $\omega_*^2/\omega_p^2 \propto |\Delta W/W_{st}|$, где ω_* — характерная частота, то для сил изображения более важен характер поведения $\varepsilon(\mathbf{k}, \omega)$ при малых ω , чем при ω , соответствующих оптическому диапазону. Поэтому межзонные переходы, которые не описываются полуэмпирическими интерполяциями (9) и (10), не играют практически никакой роли [8,13,29].

Однако эти рассуждения годятся для собственных полупроводников с большим значением ω_p . Если же полупроводник является примесным с небольшой плотностью носителей тока, то соответствующее значение частоты ω_{pi} может быть на несколько порядков меньше, чем ω_p для валентных электронов. Тогда динамические эффекты могут сказываться в большей мере и применяемая здесь схема расчета будет справедлива только для малых полей и скоростей [3].

4. Вакуумная прослойка между полупроводниками

Аналогичные расчеты были проведены и для энергии сил изображения в вакуумном промежутке между двумя полупроводниками (рис. 1). Здесь ограничимся симметричной структурой с $\varepsilon_1(\mathbf{k}, \omega) = \varepsilon_3(\mathbf{k}, \omega)$, поскольку иначе в теории фигурировали бы дополнительные параметры, которые не внесли бы ничего концептуально нового.

Асимптотические приближения профилей по всей толщине промежутка для тонких слоев с $\delta\sqrt{\frac{\varepsilon_0-1}{\varepsilon_0-1}} \ll 1$, где $\delta \equiv \kappa l$, удалось получить только в модели Инксона. В частности,

$$W_{st}(\xi) \approx -\frac{q^2\kappa}{2} \left\{ \sqrt{\frac{\varepsilon_0-1}{\varepsilon_0}} + \delta \left[\log \left(\gamma\delta\sqrt{\frac{\varepsilon_0}{\varepsilon_0-1}} \right) + \frac{\varepsilon_0-1}{\varepsilon_0} \left(\log 2 - \frac{1}{2} \right) - \frac{1}{2} + \frac{1}{2} (1-\xi) \log(1-\xi) + \frac{1}{2} (1+\xi) \log(1+\xi) \right] \right\}, \quad (21)$$

и, например, для равноускоренного движения

$$\Delta W(\xi) \approx \delta \frac{q^3 F \kappa^2}{12m\omega_p^2} \sqrt{\frac{\varepsilon_0-1}{\varepsilon_0}} \{4 + \xi f(\varepsilon_0)\}, \quad (22)$$

где $\xi = z/l$, так что $-1 \leq \xi \leq 1$, а $f(\varepsilon_0)$ — некая громоздкая плавная функция.

Все выводы предыдущего раздела относительно необходимости учета квантовой природы экранировки в равной мере применимы и для промежутка между полупроводниками. В частности, на рис. 4 представлены профили $W_{st}(\xi)$ для различных моделей $\varepsilon(\mathbf{k}, \omega)$. Легко понять, что при уменьшении ширины прослойки $2l$ сильное отличие значений для кривых Инксона и Шульце–Унгера будет иметь место не только вблизи ГР, но и по всему промежутку. Это в свою очередь значительно повлияет на туннельные характеристики подобных переходов.

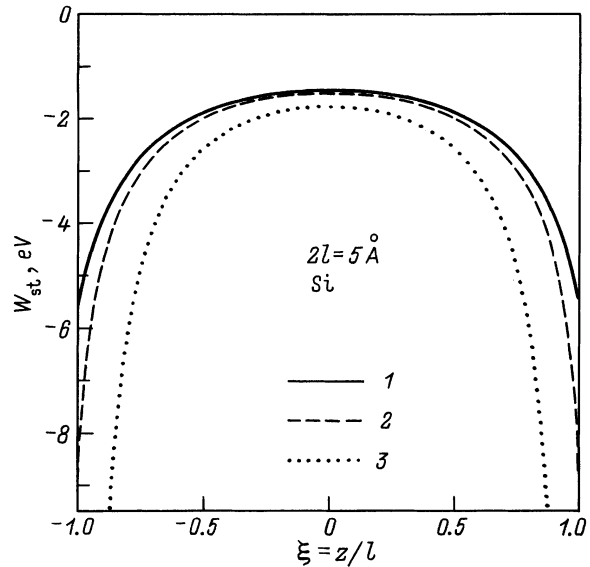


Рис. 4. Зависимости $W_{st}(z)$ в вакуумном промежутке между обкладками из Si для моделей: 1 — Шульце–Унгера, 2 — Инксона, 3 — классической.

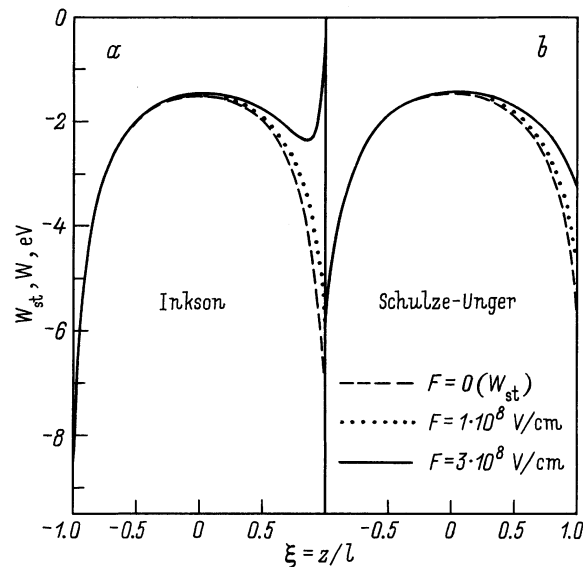


Рис. 5. Сравнение энергий динамических сил изображения W и их статических компонент W_{st} в вакуумном промежутке между обкладками из Si ($2l = 5 \text{ \AA}$) для моделей Инксона (a) и Шульце–Унгера (b) и различных значений внешнего поля F в случае равноускоренного движения заряда.

Наконец, сравним энергии динамических сил изображения W и их статической составляющей W_{st} для разных моделей $\varepsilon(\mathbf{k}, \omega)$ и разных законов движения: равноускоренного (рис. 5) и равномерного (рис. 6). И снова в более точном приближении Шульце–Унгера неадиабатические поправки оказываются достаточно малыми, тогда как приближение Инксона перестает работать для больших полей F или больших кинетических энергий частицы.

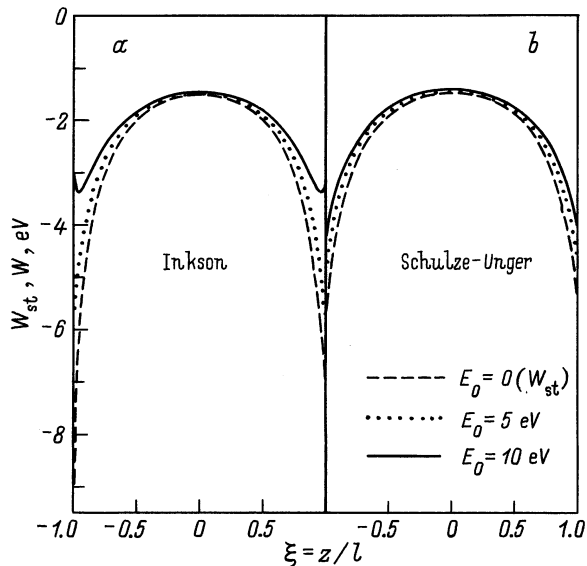


Рис. 6. То же, что и на рис. 5, но для равномерного движения заряда с различными кинетическими энергиями E_0 .

Остаются справедливыми и замечания относительно примесных полупроводников. В этой связи отметим, что эксперименты [34] могут рассматриваться как свидетельство немалого динамических поправок. С другой стороны, эти результаты могут быть следствием понижения туннельного барьера, обусловленного статическими силами изображения, при малых l (см. уравнение (21)). Таким образом, в настоящее время неясно, действительно ли в измерениях [34] проявлялся динамический характер сил изображения.

В заключение следует отметить, что проведенные расчеты свидетельствуют о необходимости адекватного учета квантового характера экранировки в полупроводнике при больших k для правильного вычисления энергии динамических сил изображения вблизи ГР полупроводник–вакуум. Динамические поправки оказываются достаточно малыми для разумных значений скоростей движения внешнего заряда. Это оправдывает применение разработанного нами ранее метода теории возмущений. Оказывается, что отсутствуют качественные различия между поляризационными энергиями $W(z)$ вблизи ГР вакуум–металл и вакуум–собственный полупроводник. При этом, важным обстоятельством является то, что параметры экранировки полупроводника κ и ω_p имеют тот же порядок величины, что и в случае металлов [29]. Поэтому модель зеркального отражения и бесконечного барьера обладает для полупроводников той же сферой применимости, что и для металлов, вопреки высказанной ранее точке зрения [35].

Хотя наличие динамических поправок ΔW не является решающим в случае собственных полупроводников, они могут быть важны при рассмотрении ГР с плазмopodobными средами с малыми плотностями носителей тока. Тогда ω_p малы и динамический вклад перестает быть малой поправкой. В этом случае вместо пертурбативного подхода следует применять более изощренные

методы [7]. Возможно, что динамические явления действительно наблюдались для полупроводниковых гетероструктур [34].

Список литературы

- [1] А.М. Габович, Л.Г. Ильченко, Э.А. Пашицкий. ФТТ **21**, 1683 (1979).
- [2] A.M. Gabovich, L.G. Il'chenko, E.A. Pashitskii, Yu.A. Romanov. Surf. Sci. **94**, 179 (1980).
- [3] A.M. Gabovich, V.M. Rozenbaum, A.I. Voitenko. Surf. Sci. **186**, 523 (1987).
- [4] F. Bechstedt, R. Enderlein, D. Reichardt. Phys. Stat. Solid. **B117**, 261 (1983).
- [5] В.М. Агранович, В.Л. Гинзбург. Кристаллооптика с учетом пространственной дисперсии и теория экситонов. Наука, М. (1979).
- [6] F.J. Garcia de Abajo, P.M. Echenidue. Phys. Rev. **B46**, 2663 (1992).
- [7] J.R. Manson, R.H. Ritchie. Phys. Rev. **B24**, 4867 (1981).
- [8] R. Núñez, P.M. Echenique, R.H. Ritchie. J. Phys. **C13**, 4229 (1980).
- [9] М.А. Воротынцев, А.А. Корнышев. Электростатика сред с пространственной дисперсией. Наука, М. (1993).
- [10] N.D. Lang. In: Theory of the Inhomogeneous Electron Gas (Physics of Solids and Liquids) Ed. by S. Lundqvist, N.H. March. Plenum Press, N.Y. (1983). P. 309.
- [11] J. Heinrichs. Phys. Rev. **B8**, 1346 (1973).
- [12] А.И. Войтенко, А.М. Габович, В.М. Розенбаум. ЖЭТФ **87**, 1964 (1984).
- [13] A. Rivacoba, N. Zabala, J. Aizpurua. Progr. Surf. Sci. **65**, 1 (2000).
- [14] А.И. Войтенко, А.М. Габович, В.М. Розенбаум. ФНТ **22**, 86 (1996).
- [15] А.В. Сидякин. ЖЭТФ **58**, 573 (1970).
- [16] A.M. Gabovich, A.I. Voitenko. Phys. Stat. Solid. **B110**, 407 (1982).
- [17] Z.-H. Huang, M. Weimer, R.E. Allen. Phys. Rev. **B48**, 15 068 (1993).
- [18] J.C. Inkson. J. Phys. **C4**, 591 (1971).
- [19] K.-R. Schulze, K. Unger. Phys. Stat. Solid. **B66**, 491 (1974).
- [20] A.G. Milnes, D.L. Feucht. Heterojunctions and Metal-Semiconductor Junctions. Academic Press. N. Y. (1972).
- [21] S.G. Davison, J.D. Levine. Solid State Phys. **25**, 1 (1970).
- [22] А.М. Габович. ФТТ **25**, 1885 (1983).
- [23] A.M. Gabovich, V.M. Rozenbaum, A.I. Voitenko. Phys. Stat. Solid. **B214**, 29 (1999).
- [24] J. Lindhard. Kgl. Danske Videnskab. Selskab. Mat.-Fys. Medd. **28**, 1 (1954).
- [25] H. Ehrenreich, M. Cohen. Phys. Rev. **115**, 786 (1959).
- [26] D.R. Penn. Phys. Rev. **128**, 2093 (1962).
- [27] A.C. Sharma, S. Auluck. Phys. Rev. **B28**, 965 (1983).
- [28] R. Resta. Phys. Rev. **B16**, 2717 (1977).
- [29] D. Pines. Elementary Excitations in Solids. W.A. Benjamin, N.Y. (1963).
- [30] J.C. Inkson. J. Phys. **C5**, 2599 (1972).
- [31] M. Krčmar, W.M. Saslow, M.B. Weimer. Phys. Rev. **B61**, 13 821 (2000).
- [32] Z.-Y. Deng, J.-K. Guo, T.-R. Lai. Phys. Rev. **B50**, 5736 (1994).
- [33] J. Hermanson. Phys. Rev. **150**, 660 (1966).
- [34] P. Guéret, E. Marclay, H. Meier. Appl. Phys. Lett. **53**, 1617 (1988).
- [35] J. Krupski. J. Phys.: Condens. Matter **1**, 3009 (1989).