

声子-电子耦合效应对半导体表面感应电势的影响^{*}

孟 显 王友年

(大连理工大学三束材料改性国家重点实验室, 大连 116023)

(1997 年 7 月 28 日收到; 1998 年 1 月 12 日收到修改稿)

根据“镜反射”模型, 研究快速运动的离子在平行于重掺杂半导体表面飞行时产生的表面感应电势和能量损失, 并采用一种局域介电函数, 研究声子-电子耦合效应对感应电势和能量损失的影响.

PACC: 6180M; 3480B

1 引 言

在离子束表面改性、表面分析、表面溅射等技术中, 固体表层的电子在入射离子的作用下将受到激发, 并产生一系列现象, 如二次电子发射、冲击电子的产生、尾势捕获电子等. 研究表面感应电势和离子能量损失对二次电子发射系数和离子散射能谱的计算有重要的现实意义.

近些年, 人们对离子在金属表面飞行时产生的表面感应电势和能量损失进行了较广泛的研究^[1-6], 并对其特性有了较深入的认识, 但目前尚未见到有关载能离子在半导体表面飞行时产生的表面感应电势和能量损失的研究报道. 事实上, 当离子同掺杂半导体表面相互作用时, 不仅会产生电子激发, 而且还会产生声子极化, 同时电子激发与声子极化有明显的耦合效应. 本文将根据“镜反射”模型^[7]和线性介电响应理论, 研究声子-电子耦合效应对表面感应电势和能量损失的影响.

2 基本理论

考虑一快速离子以速度 $\mathbf{v}$ 在靠近半导体表面层外的真空中飞行, 取 z 轴沿垂直于表面的方向, $z > 0$ 为真空区域, $z < 0$ 为半导体区域. 为了讨论方便, 引入如下记号: $\mathbf{r} = (\mathbf{R}, z)$, $\mathbf{v} = (\mathbf{v}_{//}, v_z)$, $\mathbf{v}' = (\mathbf{v}_{//}, -v_z)$, 其中 $\mathbf{R}$ 和 $\mathbf{v}_{//}$ 为平行于表面的分量. 入射离子的电荷分布为

$$\rho_{\text{ext}}(\mathbf{r}, t) = Z_1 e \delta(\mathbf{r} - \mathbf{v}t), \quad (1)$$

^{*} 国家自然科学基金(批准号: 19575008)和国家教育委员会重点科学技术项目基金(批准号: 97-129)资助的课题.

其像电荷分布为

$$\rho'_{\text{ext}}(\mathbf{r}, t) = Z_1 e \delta(\mathbf{r} - \mathbf{v}'t). \quad (2)$$

根据镜反射模型, 在 $z > 0$ 区域, 电势由入射离子的电荷分布 $\rho_{\text{ext}}(\mathbf{r}, t)$ 、像电荷分布 $\rho'_{\text{ext}}(\mathbf{r}, t)$ 和表面电荷分布 $\sigma_s(\mathbf{R}, t) \delta(z)$ 确定; 而在 $z < 0$ 区域, 电势由表面电荷分布 $\sigma_s(\mathbf{R}, t) \delta(z)$ 、感应电荷分布 $\rho_{\text{ind}}(\mathbf{r}, t)$ 和极化声子密度 $\rho_{\text{ph}}(\mathbf{r}, t)$ 确定. 因此, 电势 $\Phi(\mathbf{r}, t)$ 满足如下泊松方程:

$$\nabla^2 \Phi(\mathbf{r}, t) = -4\pi [\rho_{\text{ext}}(\mathbf{r}, t) + \rho'_{\text{ext}}(\mathbf{r}, t) + \sigma_s(\mathbf{R}, t) \delta(z)] \quad (z > 0), \quad (3)$$

$$\nabla^2 \Phi(\mathbf{r}, t) = -4\pi [-\sigma_s(\mathbf{R}, t) \delta(z) + \rho_{\text{ind}}(\mathbf{r}, t) + \rho_{\text{ph}}(\mathbf{r}, t)] \quad (z < 0). \quad (4)$$

在方程(3)和(4)中, 面电荷分布可由电势在表面上 ($z=0$) 的连续性条件确定, 感应电荷分布由线性介电响应理论确定, 而极化声子的密度由谐振子模型确定^[8,9].

对方程(3)和(4)进行傅里叶变换, 可得在真空中表面感应电势为

$$\begin{aligned} \Phi_{\text{ind}}(\mathbf{r}, t) &= \Phi(\mathbf{r}, t) - \Phi_{\text{ext}}(\mathbf{r}, t) \\ &= \frac{Z_1 e}{2\pi^2} \int d\mathbf{Q} d\omega \frac{|v_z| e^{-Qz} F(\mathbf{Q}, \omega)}{(\omega - \mathbf{Q} \cdot \mathbf{v}_{//})^2 + (Qv_z)^2} \exp[i(\mathbf{Q} \cdot \mathbf{R} - \omega t)] \quad (z > 0), \end{aligned} \quad (5)$$

其中

$$F(\mathbf{Q}, \omega) = \frac{\epsilon_s(\mathbf{Q}, \omega) - 1}{\epsilon_s(\mathbf{Q}, \omega) + 1}, \quad (6)$$

$$\epsilon_s(\mathbf{Q}, \omega) = \frac{Q}{\pi} \int_0^\infty \frac{dk_z}{k^2} \frac{1}{\epsilon(\mathbf{k}, \omega)}, \quad (7)$$

$\epsilon_s(\mathbf{Q}, \omega)$ 为表面介电函数^[10], $\epsilon(\mathbf{k}, \omega)$ 为体介电函数, $\mathbf{k} = (\mathbf{Q}, k_z)$.

由(5)式可以看出, 表面感应电势沿离子运动方向非对称分布, 由此产生一个阻止离子运动的电场力, 从而引起离子的能量损失. 根据(5)式, 可得在单位长度上该离子的能量损失, 即阻止本领 $-\frac{Z_1 e}{v} \frac{\partial \Phi_{\text{ind}}(\mathbf{r}, t)}{\partial t} \Big|_{\mathbf{r}=\mathbf{v}t}$ 的表示式为

$$S_e = -\frac{(Z_1 e)^2}{2\pi^2 v} \int d\mathbf{Q} d\omega \frac{(-i\omega) |v_z| e^{-Qz}}{(\omega - \mathbf{Q} \cdot \mathbf{v}_{//})^2 + (Qv_z)^2} F(\mathbf{Q}, \omega) \exp[i(\mathbf{Q} \cdot \mathbf{R} - \omega t)]. \quad (8)$$

由(5)和(8)式可见, 表面感应电势和能量损失依赖于体介电函数 $\epsilon(\mathbf{k}, \omega)$ 的确定.

3 局域介电函数

对于掺杂半导体, 存在纵向光学声子的极化与自由载流子(电子)激发的耦合, 因此, 体介电函数 $\epsilon(\mathbf{k}, \omega)$ 可表示为^[8]

$$\epsilon(\mathbf{k}, \omega) = \epsilon_\infty + \mathbf{P}_{\text{ph}} + \mathbf{P}_{\text{ee}}, \quad (9)$$

其中 $\mathbf{P}_{\text{ph}} = \epsilon_\infty (\omega_{\text{LO}}^2 - \omega_{\text{TO}}^2) / (\omega_{\text{TO}}^2 - \omega^2 - i\gamma\omega)$ 为声子极化率, ω_{LO} 和 ω_{TO} 分别为光学声子纵偏振和横偏振频率, ϵ_∞ 为高频介电常数, γ 为无穷小的正量, $\mathbf{P}_{\text{ee}}$ 为载流子极化率.

在如下讨论中, 为了使问题简化, 将采用一种只与频率有关的载流子极化率, 即

$$P_{ee}(\omega) = -\frac{\epsilon_{\infty} \omega_p^2}{\omega(\omega + i\gamma)}, \quad (10)$$

其中 $\omega_p = (4\pi e^2 n_0 / \epsilon_{\infty} m_e^*)^{1/2}$ 为等离子振荡频率, n_0 为载流子密度, m_e^* 为导带电子的有效质量. 因此, 总介电函数可简化为

$$\epsilon(\omega) = \epsilon_{\infty} \left[1 + \frac{\omega_{LO}^2 - \omega_{TO}^2}{\omega_{TO}^2 - \omega(\omega + i\gamma)} - \frac{\omega_p^2}{\omega(\omega + i\gamma)} \right]. \quad (11)$$

将(11)式代入(7)式, 很容易得到表面介电函数为 $\epsilon_s(\mathbf{Q}, \omega) = \epsilon^{-1}(\omega)$. 尽管这种与波数无关的局域介电函数的形式过于简单, 且仅适用于描述高速运动离子产生的激发现象, 但它能给出表面激发现象的主要特征.

4 离子平行于半导体表面飞行

在如下讨论中, 仅考虑离子平行于半导体表面飞行的情况. 在这种情况下, 令 $v_z \rightarrow 0$, 但保持 $|\mathbf{v}_z| t = z_0$ 为恒量, z_0 为离子距离表面的高度, 并且设离子沿 x 轴方向飞行. 这样由(11)和(5)式可得

$$\Phi_{\text{ind}}(\mathbf{r}, t) = \frac{Z_1 e}{2\pi} \int \frac{d\mathbf{Q}}{Q} \exp[i\mathbf{Q} \cdot (\mathbf{R} - \mathbf{v}t)] \exp[-Q(z + z_0)] F(\omega) \quad (\omega = \mathbf{Q} \cdot \mathbf{v}, z > 0), \quad (12)$$

其中

$$F(\omega) = -\frac{(\omega\tilde{\omega} - A^2)(\omega\tilde{\omega} - B^2)(1 + \epsilon_{\infty}) + 2\omega\tilde{\omega}(\omega_{TO}^2 - \omega\tilde{\omega})}{(1 + \epsilon_{\infty})(\omega + i\gamma + A)(\omega + i\gamma - A)(\omega + i\gamma + B)(\omega + i\gamma - B)}, \quad (13)$$

其中 $\tilde{\omega} = \omega + i\gamma$,

$$A^2 = \frac{1}{2} \frac{\omega_{TO}^2 + \epsilon_{\infty}(\omega_{LO}^2 + \omega_p^2)}{1 + \epsilon_{\infty}} - \sqrt{\frac{1}{4} \left[\frac{\omega_{TO}^2 + \epsilon_{\infty}(\omega_{LO}^2 + \omega_p^2)}{1 + \epsilon_{\infty}} \right]^2 - \frac{\epsilon_{\infty} \omega_{TO}^2 \omega_p^2}{1 + \epsilon_{\infty}}}, \quad (14)$$

$$B^2 = \frac{1}{2} \frac{\omega_{TO}^2 + \epsilon_{\infty}(\omega_{LO}^2 + \omega_p^2)}{1 + \epsilon_{\infty}} + \sqrt{\frac{1}{4} \left[\frac{\omega_{TO}^2 + \epsilon_{\infty}(\omega_{LO}^2 + \omega_p^2)}{1 + \epsilon_{\infty}} \right]^2 - \frac{\epsilon_{\infty} \omega_{TO}^2 \omega_p^2}{1 + \epsilon_{\infty}}}. \quad (15)$$

从(13)式可看出, 在有声子存在时的激发谱共有两支, 一支频率为 A , 另一支频率为 B , 且均为声子-电子的耦合谱. 将(13)式代入(12)式, 并利用残数积分公式, 最终可以将表面感应电势写为

$$\begin{aligned} \Phi_{\text{ind}}(\mathbf{r}, t) = & -\left(\frac{\epsilon_{\infty} - 1}{\epsilon_{\infty} + 1} \right) \frac{Z_1 e}{\sqrt{L^2 + \tilde{x}^2}} + \frac{Z_1 e B}{v} \frac{2}{1 + \epsilon_{\infty}} \\ & \times \int_0^{\infty} dQ J_0 \left(\frac{qBL}{v} \right) \exp \left(-\frac{qB}{v} |\tilde{x}| \right) \left[\frac{D_2^2 - D_1^2}{q^2 + D_2^2} - \frac{q^2 + D_2^2}{(q^2 + D_1^2)(q^2 + 1)} \right] \\ & + \frac{Z_1 e B}{v} \frac{4(D_2^2 - 1)}{(1 + \epsilon_{\infty})(D_1^2 - 1)} K_0 \left(\frac{BL}{v} \right) \sin \left(\frac{B\tilde{x}}{v} \right) \quad (\tilde{x} < 0) \\ & + \frac{Z_1 e B}{v} \frac{4(D_2^2 - D_1^2)}{(1 + \epsilon_{\infty})(1 - D_2^2)} K_0 \left(\frac{AL}{v} \right) \sin \left(\frac{A\tilde{x}}{v} \right) \quad (\tilde{x} < 0), \end{aligned} \quad (16)$$

其中 $J_0(x)$ 为零阶贝塞尔函数, $K_0(x)$ 为零阶修正贝塞尔函数, $L = \sqrt{y^2 + |z + z_0|^2}$, $\tilde{x} =$

$x - vt$, $q = v(Q^2 + k_z^2)^{1/2}/B$, $D_1 = A/B$, $D_2 = \omega_{TO}/B$. 从(16)式可看出, 在有声子存在时表面感应电势由 4 项组成, 其中第 1 项为裸离子的库仑势, 第 2 项为屏蔽势, 第 3, 4 项为振荡势, 分别来自上述两支激发谱.

从(14)和(16)式可看出, 在不考虑声子时, 即 $\omega_{TO} = 0$, $\omega_{LO} = 0$, 可得 $A^2 = 0$, $B^2 = \omega_s^2$, 其中 $\omega_s = \omega_p/(1 + \epsilon_\infty)^{1/2}$ 为表面等离子振荡频率. 在这种情况下, 仅存在一支激发谱, 即表面等离子激发谱: $\omega = \omega_s$. 这样表面感应电势为

$$\Phi_{\text{ind}}(\mathbf{r}, t) = - \left(\frac{\epsilon_\infty - 1}{\epsilon_\infty + 1} \right) \frac{Z_1 e}{\sqrt{L^2 + \tilde{x}^2}} - \frac{Z_1 e \omega_s}{v} \frac{2}{1 + \epsilon_\infty} \int d\mathbf{q} J_0 \left(q \frac{q \omega_s L}{v} \right) \times \exp \left(- \frac{q \omega_s}{v} |\tilde{x}| \right) \frac{1}{1 + q^2} + \frac{Z_1 e \omega_s}{v} \frac{4}{1 + \epsilon_\infty} K_0 \left(\frac{\omega_s L}{v} \right) \sin \left(\frac{\omega_s \tilde{x}}{v} \right). \quad (17)$$

类似于表面感应电势的推导过程, 离子的能量损失(8)式可表示为

$$S_e = \left(\frac{Z_1 e \omega_s}{v} \right)^2 \frac{2(\omega_{TO}^2 - A^2) D_1^2}{(1 + \epsilon_\infty)(1 - D_1^2) \omega_s^2} \int_1^\infty \frac{dq}{\sqrt{q^2 - 1}} \exp(-2Aqz_0/v) - \left(\frac{Z_1 e \omega_s}{v} \right)^2 \frac{2(\omega_{TO}^2 - B^2)}{(1 + \epsilon_\infty)(1 - D_1^2) \omega_s^2} \int_1^\infty \frac{dq}{\sqrt{q^2 - 1}} \exp(-2Bqz_0/v). \quad (18)$$

在不考虑声子的贡献时, 上式可简化为

$$S_e = \left(\frac{Z_1 e \omega_s}{v} \right)^2 \frac{2}{1 + \epsilon_\infty} \int_1^\infty \frac{dq}{\sqrt{q^2 - 1}} \exp(-2q\omega_s z_0/v). \quad (19)$$

根据方程(16)–(19), 将在下节采用数值方法研究声子-电子耦合效应对表面感应电势和能量损失的影响.

5 结果与讨论

在如下数值计算中, 将以 InSb 半导体为例. 这种半导体的参数^[8]如下: $\epsilon_\infty = 15.68$,

$\hbar\omega_{TO} = 22.90 \text{ meV}$, $\hbar\omega_{LO} = 16.29 \text{ meV}$, $n_0 = 9.268 \times 10^{16} \text{ cm}^{-3}$, $m_e^*/m_e = 0.01837$. 计算结果如图 1 至图 3 所示.

图 1 示出考虑声子情况下表面感应电势沿离子运动方向的空间变化. 从图 1 可看出: 表面感应电势沿离子运动方向上的分布呈现明显的非对称性, 在离子的后面, 表面感应电势快速地振荡, 且随着距离 $|x - vt|$ 的增加, 其绝对值按指数形式衰减. 此外, 在离子的附近, 随着 L 值增大, 感应电势的绝对值按指数形式衰减, 且明显地减小.

图 2 将有无声子时的感应电势进行了比较. 可以看到, 在有声子时, 表面感应电势的振

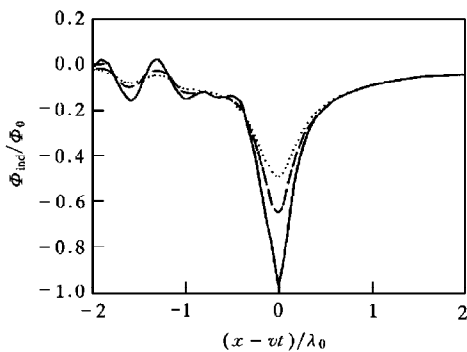


图 1 考虑声子情况下, 表面感应电势沿离子运动方向的空间变化 $\Phi_0 = Z_1 \omega_s / v$, $\lambda = v / \omega_s$, — 为 $L/\lambda_0 = 1.0$, --- 为 $L/\lambda_0 = 1.5$, ... 为 $L/\lambda_0 = 2.0$

荡形式呈现明显的不规则性.这可从(16)和(17)式看出,有声子时的表面感应电势的振荡项为两项,由于它们的振荡周期不同,其叠加结果导致了振荡形式不规则,而无声子时表面感应电势的振荡项只有一项,因此振荡形式较规则.从图2还可看出,声子-电子的耦合效应对表面感应电势的幅值影响较小.这主要是由于 InSb 属于 III-V 族半导体材料,在这类材料中极性 LO 声子同电子的弗洛里希(Fröhlich)相互作用较弱.

图3示出入射离子的能量损失随离子距表面距离的变化.从图3可看出,对于较小的 z_0 值,声子-电子的耦合效应对能量损失值起明显的增强作用,而对于较大的 z_0 值,这种耦合效应对能量损失的影响较小.

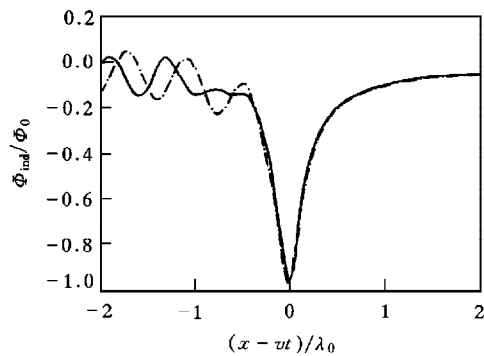


图2 表面感应电势的空间变化 ——为有声子情况,---为无声子情况, $L/\lambda_0 = 1.0$, 其他符号意义同图1

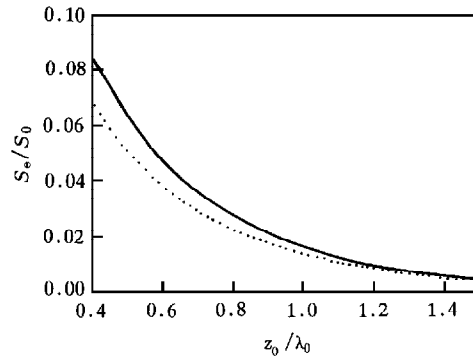


图3 入射离子能量损失随离子距表面距离的变化
 $S_0 = (Z_1 e \omega_s / v)^2$, $L/\lambda_0 = 1.0$, 曲线说明同图2

总之,我们根据镜反射模型和线性介电响应理论,研究了带电粒子在平行于半导体材料表面飞行时产生的表面感应电势和能量损失,并借助于一种与频率有关的局域介电函数,推导出表面感应电势和能量损失的解析表示式.发现在考虑声子-电子的耦合效应时,有两支激发谱对表面感应电势和能量损失有贡献,且这种耦合效应可以改变表面感应电势的振荡形式,并对能量损失起一定的增强作用.

- [1] F.J. Garcia de Abajo, P.M. Echenique, *Phys. Rev.*, **B46**(1992), 2663.
- [2] F.J. Garcia de Abajo, P.M. Echenique, *Phys. Rev.*, **B48**(1993), 13399.
- [3] G. Gumbs, M.L. Glasser, *Phys. Rev.*, **B37**(1988), 1391.
- [4] Y.N. Wang *et al.*, *Chem. Phys. Lett.*, **254**(1996), 122.
- [5] Y.N. Wang *et al.*, *Phys. Rev.*, **A54**(1996), 636.
- [6] Y.N. Wang, *Journal of Function Materials and Devices*, **3**(1997), 35(in Chinese).
- [7] R.H. Ritchie, A.L. Marusk, *Surf. Sci.*, **4**(1966), 234.
- [8] T. Inaoka, *Surf. Sci.*, **257**(1991), 237.
- [9] T. Kaneto, K.W. Kim, M.A. Littlejohn, *J. Appl. Phys.*, **72**(1992), 4139.
- [10] D.M. Newns, *Phys. Rev.*, **B1**(1970), 3304.

EFFECT OF PHONON-ELECTRON COUPLING ON THE SURFACE WAKE POTENTIAL^{*}

MENG XIAN WANG YOU-NIAN

(*State Key Laboratory for Materials Modification by Laser, Ion and Electron Beams,
Dalian University of Technology, Dalian 116023*)

(Received 28 July 1997; revised manuscript received 12 January 1998)

ABSTRACT

The wake potential and energy loss of a swift ion moving parallel to a heavily doped semiconductor surface in vacuum are studied with the specular-reflection model and the dielectric response theory. The phonon-electron coupling effect on the surface wake potential and the energy loss is investigated by using a frequency-dependent dielectric function. We find that there are two branches of phonon-electron coupling excitations which contribute to the wake potential and the energy loss. Numerical results show that the oscillation form of the wake potential is obviously influenced by the phonon-electron coupling effect.

PACC: 6180M; 3480B

^{*}Project supported by the National Natural Science Foundation of China under the Grant No. 19575008 and by the Foundation for Science and Technology of the State Education Commission of China under the Grant No. 97-129.