

УДК 537.533

© 1993

## ОПРЕДЕЛЕНИЕ ОСОБЕННОСТЕЙ ЭЛЕКТРОННОГО СТРОЕНИЯ ТВЕРДОТЕЛЬНЫХ ОБЪЕКТОВ НА ОСНОВЕ АНАЛИЗА ЭНЕРГЕТИЧЕСКОГО СПЕКТРА АВТОЭЛЕКТРОНОВ

*Н. А. Анисимов, О. В. Духовный, Е. Н. Моос, Т. А. Тумарева*

В модели Янга рассчитаны полные ширины на половине высоты (ПШПВ) энергетических спектров автоэлектронов при различных температурах поверхности эмиттера и для разных значений работы выхода и поля. Показано изменение ПШПВ спектров после прохождения электронов через анализатор с различной функцией пропускания. Сравнение результатов расчетов и экспериментальных спектров использовано для получения сведений об электронном строении системы иридий—церий.

Анализ энергетических спектров автоэлектронов дает информацию об электронном строении исследуемых объектов. Сведения такого рода особенно важны при рассмотрении процессов в микрообъектах, так как позволяют выявить происходящие в них физико-химические и структурные превращения, не доступные наблюдению другими способами.

Для обнаружения изменений в распределении плотности состояний электронов необходимо проводить измерения энергетических спектров автоэлектронов с разрешением  $\sim 20\div 50$  мэВ. В настоящей работе энергоанализатор с высоким разрешением [1] был использован для исследования одной из перспективных в эмиссионной электронике систем — системы иридий—церий.

Как показали исследования, некоторые изменения характеристик распределения плотности состояний электронов вблизи уровня Ферми удается обнаружить, выявляя отклонения полной ширины на половине высоты (полуширины)  $\sigma(T)$  экспериментально измеренного спектра от рассчитанного Янгом в модели свободных электронов [2]. Для этого случая Янгом предложена формула для определения полуширины спектра

$$\sigma(0) = 0.693d, \quad (1)$$

где

$$d = \hbar e F [2 \sqrt{2m} \varphi^{1/2} t(y)]^{-1},$$

$$y = \frac{e^{3/2} F^{1/2}}{\varphi},$$

$\varphi$  — работа выхода электрона,  $m$  и  $e$  — масса и заряд электрона,  $F$  — напряженность электрического поля,  $t(y)$  — эллиптическая функция Фаулера—Нордгейма от безразмерного аргумента  $y$ .

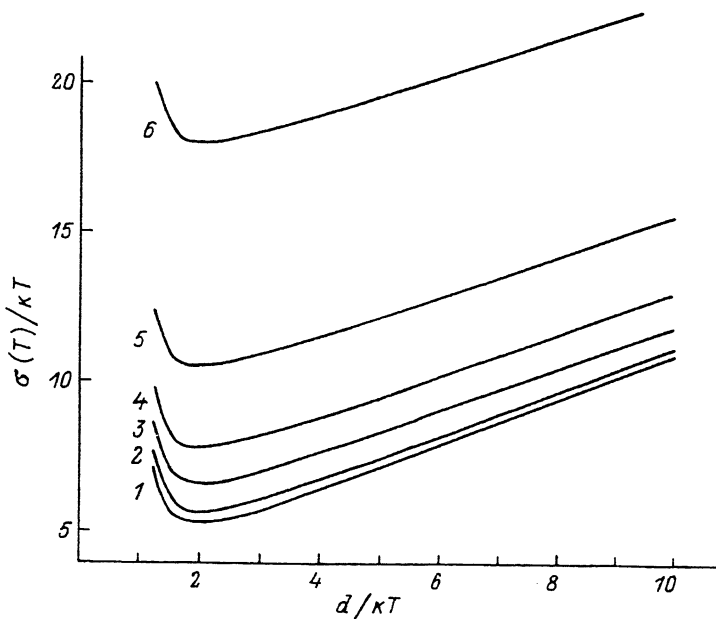


Рис. 1. Зависимость приведенной полуширины спектра  $\sigma/kT$  от безразмерных параметров.  $a/kT = 0$  (1), 1 (2), 2 (3), 3 (4), 5 (5), 10 (6).

Однако формула получена для эмиттера, находящегося при температуре  $T$ , равной абсолютному нулю. Для выявления особенностей на автоэлектронных спектрах необходимо знать  $\sigma(T)$  для любых реальных условий эксперимента. В связи с этим в настоящей работе был проведен расчет автоэмиссионных спектров для широкого интервала  $T$ ,  $F$  и  $\varphi$  по уравнению Янга, описывающему спектральные характеристики автоэлектрона, и для каждого случая определено значение  $\sigma(T)$ . Результаты расчета представлены в виде универсальной зависимости

$$\frac{\sigma(T)}{kT} = f\left(\frac{d}{kT}\right) \quad (2)$$

(рис. 1, кривая 1), которая хорошо аппроксимируется зависимостью

$$\frac{\sigma(T)}{kT} = 3.688 + 0.775 \left(\frac{d}{kT} - 1\right) + 0.805 \left(\frac{d}{kT} - 1\right)^{-1}. \quad (3)$$

Пользуясь кривой 1 (рис. 1) или формулой (3), можно быстро определить  $\sigma(T)$  для любых значений электрического поля, температуры и работы выхода эмиттера. Корректное сравнение полуширины экспериментального спектра с расчетным требует учесть, что в экспериментальном приборе поток электронов проходит через энергоанализатор, разрешение которого имеет конечную величину, а это вносит искажение в регистрируемый на опыте спектр.

Для учета искажений, вносимых анализатором в полученное на эксперименте распределение, были проведены расчеты (рис. 1, кривые 2—6). При расчетах полагалось, что энергетический анализатор имеет гауссову функцию пропускания, определяемую выражением

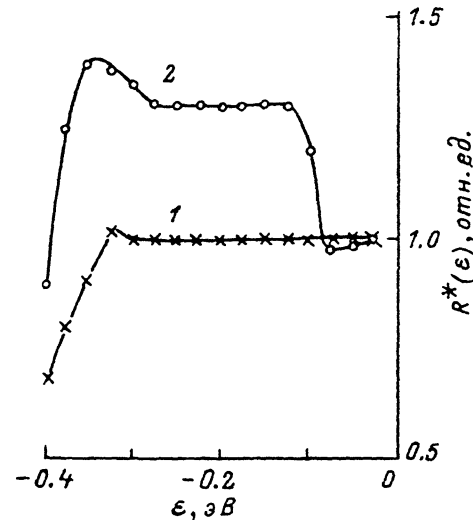
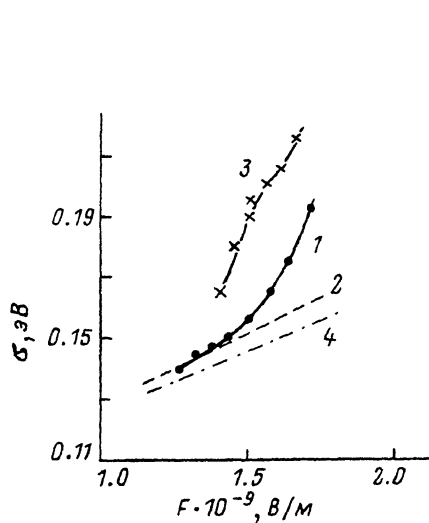


Рис. 2. Зависимость полуширины спектра от напряженности электрического поля при  $T = 120$  К.

Рис. 3. Зависимость фактора усиления от энергии  $\varepsilon$  для Ir (135) + Ce (1) и Ir (012) + Ce (2).

1, 3 — эксперимент, 2, 4 — расчет. 1, 2 — система Ir (135) + Ce, 3, 4 — система Ir (012) + Ce при  $a = 0.03$  эВ.

$$G(\varepsilon) = \frac{1.67}{\pi a} \exp \left[ - \left( \frac{1.67\varepsilon}{d} \right)^2 \right],$$

где  $a$  — полуширина этой функции (или разрешение анализатора) и функция нормировалась так, чтобы

$$\int_{-\infty}^{\infty} G(\varepsilon) d\varepsilon = 1.$$

Регистрируемый в эксперименте спектр  $j'(\varepsilon)$  является сверткой гауссовой функции пропускания анализатора с энергетическим распределением автоэлектрона  $j_0'(\varepsilon)$

$$j'(\varepsilon) = \int_{-\infty}^{\infty} j_0'(\varepsilon') G(\varepsilon - \varepsilon') d\varepsilon'.$$

Из результатов расчетов (рис. 1, кривые 2—б) видно существенное влияние разрешения анализатора на полуширину распределения. (Расчеты проводились на ЭВМ численным интегрированием выражения (8) методом Симпсона).

На рис. 2 приведены результаты сравнения полуширин, полученных экспериментально и с помощью расчета с использованием результатов (рис. 1) для заданных экспериментальных условий. Данные приведены для пленки церия толщиной 6 монослоев, осажденной на иридиевое острие, находящееся при температуре 1700 К, которая обеспечивала получение на поверхности достаточно равномерного покрытия. Для уменьшения шумов спектры снимались при охлаж-

денции катодной сборки жидким азотом. Как показали предварительно проведенные исследования, температура острия при этом достигала 120 К. Значения работы выхода  $\varphi$  и фактора усиления поля  $\beta$ , которые использовались при расчете, были определены методом сочетания наклонов низкоэнергетичного фронта энергетического распределения и характеристики Фаулера—Нордгейма [3].

На рис. 2 точками показаны данные для системы Ir (135) + Ce, характеризующейся значениями  $\varphi = 2.3 \pm 0.1$  эВ и  $\beta = 1.7 \cdot 10^{-5}$  м<sup>-1</sup>. Штриховой линией показано изменение полуширины спектра для Ir (135) + Ce с изменением напряженности электрического поля, полученное из графика рис. 1 при  $a = 0.03$  эВ. Из рис. 2 видно, что при полях менее  $1.5 \cdot 10^9$  В/м полуширина экспериментальных спектров достаточно мала и хорошо совпадает с определенной из расчетов в рамках модели Янга (рис. 1). В то же время полуширины экспериментальных спектров, нанесенные крестиками, для системы Ir (012) + Ce ( $\varphi = 2.7 \pm 0.1$  эВ,  $\beta = 1.72 \cdot 10^{-5}$  м<sup>-1</sup>) существенно превосходят ожидаемые из расчетов значения (рис. 2, штрихпунктирная линия). Этот экспериментальный факт позволяет сразу сделать вывод о том, что система Ir (012) + Ce не описывается моделью свободных электронов.

Действительно, если выполнить полный расчет экспериментальных спектров по формуле Янга, то можно построить для обеих рассматриваемых систем фактор усиления  $R^*(\epsilon)$  ( $R^*(\epsilon)$  является результатом деления спектра, полученного в эксперименте, на рассчитанный для тех же условий в модели Янга с учетом величины инструментального разрешения).

Из рис. 3 видно, что для системы Ir (135) + Ce  $R^*(\epsilon)$  во всем исследованном интервале равно единице, в то время как на зависимости  $R^*(\epsilon)$  для системы Ir (012) + Ce имеется явный рост при энергиях  $\geq 0.15$  эВ, что означает рост плотности состояний электронов при этих энергиях. Так как рост плотности состояний происходит вблизи уровня Ферми, то он существенно сказывается на полуширине спектра.

Вычисления зонной структуры, выполненные Андерсеном [4] методом присоединенных плоских волн, показали, что для ряда граней иридия сильно гибридизованные  $d$ -зоны находятся вблизи уровня Ферми, причем вершины некоторых  $d$ -зон лежат ниже уровня Ферми и, следовательно, электроны этих уровней будут давать вклад в автоэмиссионный ток. В работе [5] на факторе усиления  $R^*(\epsilon)$  для грани (012) в полном соответствии с расчетами Андерсена для объемной зонной структуры Ir обнаружен рост плотности состояний в интервале 0.03—1.2 эВ. Обнаруженный в настоящей работе рост плотности состояний для Ir (012) + Ce, вероятно, является проявлением особенности зонной структуры Ir (012), которая сохраняется при адсорбции церия. Энергетическое расположение особенности, близкое к уровню Ферми, резко увеличивает полуширину всего спектра.

Некоторое смещение начала роста плотности состояний по сравнению с данными [5] на зависимости  $R^*(\epsilon)$  может быть связано с влиянием адсорбированного слоя церия или с несколько разными в работе [5] и в настоящей работе способами нормировки спектров при определении  $R^*(\epsilon)$ .

Для грани Ir (135) нет сведений о локализации плотности состояний электронов вблизи уровня Ферми. Результаты данной работы показывают возможность использования для оценки полуширины спектра электронов с грани Ir (135) модели свободных электронов.

В заключение еще раз вернемся к рис. 2. Аномальный по отношению к теории Янга рост  $R^*(\epsilon)$  при  $F > 1.5 \cdot 10^9$  В/м может являться результатом целого ряда процессов, основными из которых следует считать разогрев поверхности эмиттера в процессе отбора автоэмиссионного тока и кулоновское взаимодействие электронов при движении в вакууме при больших плотностях автоэмиссионного тока. Выяснение причин этого явления будет проведено в следующей работе.

Список литературы

- [1] Иванов В. А., Кирсанова Т. С., Тумарева Т. А. // ФТТ. 1981. Т. 23. № 3, С. 664—668.
- [2] Joung R. D. // Phys. Rev. 1959. V. 1. N 113. P. 110—115.
- [3] Иванов В. А., Кирсанова Т. С. // ФТТ. 1989. Т. 31. № 4. С. 82—85.
- [4] Anderson O. K. // Phys. Rev. B. 1970. V. 2. P. 883—890.
- [5] Dionne N. J., Rhodin T. N. // Phys. Rev. B. 1976. V. 14. N 2. P. 322—335.

Государственный технический университет  
Санкт-Петербург

Поступило в Редакцию  
15 апреля 1992 г.