

©1994 г.

СПЕКТРЫ ПОВЕРХНОСТНОЙ ФОТОЭДС n -GaAs (100)

А.Л. Мусатов, В.Г. Мокеров, А.А. Пахомов,[†] В.Ю. Санкович[†]

Институт радиотехники и электроники Российской академии наук,
103907, Москва, Россия

[†]Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе Российской академии наук,
194021, Санкт-Петербург, Россия

(Получена 13 апреля 1994 г. Принята к печати 18 апреля 1994 г.)

Приведены спектры поверхностной фотоэдс n -GaAs (100), выращенного методом молекулярно-лучевой эпитаксии. В спектрах в области энергий фотонов $\hbar\omega < \varepsilon_g$ видны четко выраженные ступеньки, расположенные через равные интервалы энергии $\Delta\varepsilon \approx 0.1\text{эВ}$. Теоретический анализ показывает, что наблюдаемые ступеньки можно объяснить сильным электрон-фононным взаимодействием в процессе фотоионизации глубокого уровня, причем энергия локального поверхностного фонона равна $\hbar\Omega = 0.11\text{эВ}$.

В последние годы проявляется большой интерес к изучению свойств поверхности GaAs (100) (см. [1-3] и библиографию в этих статьях). Это связано как с важностью этой поверхности GaAs для практических применений, так и с богатством поверхностных структур, наблюдаемых на ней. В [1-2] были проведены детальные исследования поверхностных структур, поверхностной химии, работы выхода и положения уровня Ферми на такой поверхности. В [3] методом низкоэнергетической катодolumинесценции на GaAs (100) были обнаружены глубокие поверхностные уровни.

Настоящая работа посвящена исследованию глубоких поверхностных уровней в запрещенной зоне GaAs (100) методом поверхностной фотоэдс [4,5]. Спектры поверхностной фотоэдс состоят из двух частей: коротковолновой части, соответствующей фундаментальному поглощению света в полупроводнике, и длинноволновой части, связанной с генерацией электронов с поверхностных состояний. Методом поверхностной фотоэдс мы обнаружили, что в слоях n -GaAs (100), выращенных методом молекулярно-лучевой эпитаксии с небольшим отклонением от оптимальных условий роста, величина сигнала поверхностной фотоэдс при $\hbar\omega < \varepsilon_g$ весьма велика. Это свидетельствует о большой плотности заполненных поверхностных состояний, связанных, по-видимому, с дефектами роста. При этом спектры фотоэдс при

$\hbar\omega < \varepsilon_g$ носили ярко выраженный ступенчатый характер. В настоящей работе проведен анализ этого эффекта и сделано предположение, что ступенчатая спектральная зависимость поверхностной фотоэдс и, следовательно, сечение фотоионизации поверхностных состояний связаны с сильным электрон-фононным взаимодействием в процессе фотоионизации поверхностных состояний.

1. Эксперимент

Исследования спектров поверхностной фотоэдс проводились в сверхвысоком вакууме ($P \approx 10^{-10}$ мм рт.ст) на эпитаксиальных пленках n -GaAs (100), выращенных методом молекулярно-лучевой эпитаксии (МЛЭ). После окончания процесса роста поверхность пленки GaAs закрывалась в ростовой камере слоем мышьяка толщиной в несколько тысяч ангстрем [1,2] и переносилась в исследовательскую камеру. Далее слой As удалялся прогревом в сверхвысоком вакууме и, таким образом, получалась GaAs-пленка с атомарно-чистой поверхностью. Процесс удаления As контролировался оже-спектрометром.

Поверхностная фотоэдс измерялась методом электронного пучка [5], при котором поверхность образца освещается модулированным светом и облучается пучком медленных электронов с энергией ~ 1 эВ. Возникновение фотоэдс приводит к модуляции электронного тока в цепи образца и возникновению переменного сигнала V_{ph} на нагрузочном сопротивлении, величина которого пропорциональна фотоэдс [5]. Измерения фотоэдс проводились на частоте 9.8 Гц селективным усилителем с синхронным детектором. При этом образец освещался монохроматическим светом в области длин волн 0.6–1.8 мкм. Интенсивность света составляла $10^{13} - 10^{15}$ фотон/см² · с. Плотность электронного тока была $\sim 10^{-7}$ А/см². Для устранения рассеянного света при измерениях в длинноволновой области спектра ($\hbar\omega < 1.38$ эВ) использовался

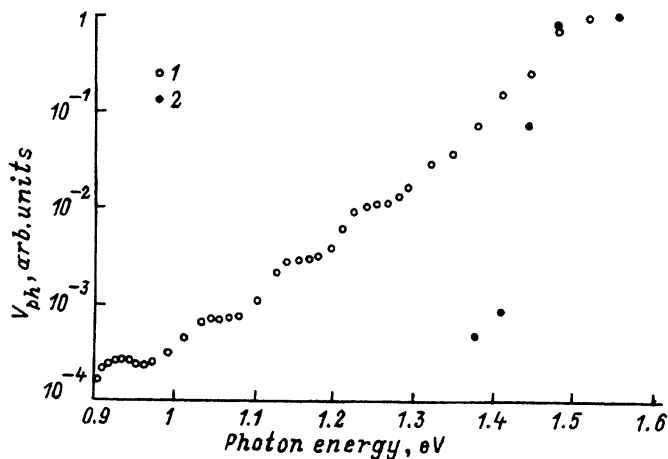


Рис. 1. Спектры поверхностной фотоэдс n -GaAs (100), выращенного разными методами. 1 — молекулярно-лучевая эпитаксия, 2 — газофазная эпитаксия.

фильтр из полированного GaAs с пропусканием около 40%. Измерения фотоэдс проводились при пониженной температуре ($T \approx 150$ K).

На рис. 1 приведен спектр поверхностной фотоэдс (точки 1) для эпитаксиального слоя n -GaAs (100), выращенного методом МЛЭ после удаления защитного слоя As. Образец был выращен с небольшим отклонением от оптимального режима роста. На этом же рисунке для сравнения (точки 2) приведен спектр поверхностной фотоэдс эпитаксиального слоя n -GaAs (100), выращенного методом газофазной эпитаксии, после очистки его поверхности прогревом в сверхвысоком вакууме. Как видно из рис. 1, для n -GaAs, изготовленного методом газофазной эпитаксии, сигнал в длинноволновой области ($\hbar\omega < 1.35$ эВ) отсутствует, что свидетельствует о малой плотности заполненных поверхностных состояний [5]. В то же время для n -GaAs, изготовленного методом МЛЭ, имеется значительная фотоэдс при $\hbar\omega < 1.35$ эВ вплоть до $\hbar\omega \approx 0.9$ эВ, что указывает на большую плотность заполненных поверхностных состояний в запрещенной зоне GaAs, связанных, по-видимому, с дефектом роста. Исследование природы этих дефектов является предметом отдельного рассмотрения. В данной работе мы хотели бы обратить внимание на особенности спектров поверхностной фотоэдс в области $\hbar\omega < 1.35$ эВ. Эти особенности представляют собой четко выраженные ступеньки, расположенные через равные интервалы энергии $\Delta\epsilon \approx 0.1$ эВ. Такие ступеньки можно в принципе объяснить существованием в запрещенной зоне GaAs нескольких эквидистантных поверхностных уровней. Однако, по нашему мнению, более вероятно, что наблюдаемые ступеньки связаны с сильным электрон-фононным взаимодействием при фотоионизации глубоких поверхностных уровней. Аналогичные эффекты для глубоких объемных примесных центров уже рассматривались [6]. Далее приведен расчет спектральной зависимости сечения фотоионизации глубоких поверхностных уровней и полученные выражения сравниваются с результатами эксперимента.

2. Теория

Покажем, что спектральную зависимость сечения фотоионизации глубокого поверхностного центра и, следовательно, спектральную зависимость поверхностной фотоэдс можно найти в довольно общем виде, не используя явный вид волновой функции локализованного состояния. Нам потребуются лишь два предположения о виде этой волновой функции:

1). Волновая функция локализованного поверхностного состояния Φ_0 экспоненциально убывает по мере удаления от центра на масштабе

$$r \propto \alpha^{-1} = \frac{\hbar}{\sqrt{2m\epsilon_i}}, \quad (1)$$

где ϵ_i — энергия ионизации центра.

2). Мы предполагаем потенциальный барьер на границе кристалла бесконечно высоким, так что волновые функции локализованного состояния $\Phi_0(r_{\perp}, z)$ и непрерывного спектра $\Psi_k(r_{\perp}, z)$ обращаются в нуль на этой поверхности (плоскости $z = 0$).

Матричный элемент оптического дипольного перехода, вычисленного на огибающих блоховских амплитудах Ψ_k и Φ_0 , можно представить в виде

$$M_k \propto \int d^3r \Phi_0(r_\perp, z) (\hat{\mathbf{p}}\mathbf{e}) \Psi_k(r_\perp, z) = \int d^3r \frac{\partial \chi_0}{\partial z} (\hat{\mathbf{p}}\mathbf{e}) \Psi_k = \\ = \int d^2r_\perp \chi_0(r_\perp, 0) [\hat{p}_z e_z \Psi_k(r_\perp, z)]_{z=0} - \int d^3r \chi_0 \frac{\partial}{\partial z} [\hat{p}_\perp e_\perp \Psi_k(r_\perp, z)], \quad (2)$$

где $\hat{\mathbf{p}} = -i\hbar\nabla$ — оператор импульса электрона; \mathbf{e} — единичный вектор поляризации света; введено обозначение

$$\chi_0(r_\perp, z) = \int_{-\infty}^z dz \Psi_0(r_\perp, z) \quad (3)$$

и использована формула интегрирования по частям по переменной z . Интегрирование в (2) ведется по полупространству $z = 0$, ось z направлена в глубь кристалла, дефект расположен в начале координат. Очевидно, что функция χ_0 не обращается в нуль на поверхности кристалла и убывает в глубь него на масштабе (1).

В случае, когда вектор поляризации света имеет отличную от нуля z -компоненту, основной вклад в матричный элемент вносит интеграл по поверхности $z = 0$ [первое слагаемое в (2)]. При малых значениях квазиимпульса конечного состояния k (что соответствует краю поглощения) вклад второго слагаемого имеет малость порядка k/α или $\sqrt{(\hbar\omega - \varepsilon_i)/\varepsilon_i}$. Используя явный вид волновой функции конечного состояния $\Psi_k \propto e^{ik_\perp r_\perp} \sin k_z z$ в приближении $k \ll \alpha$, имеем $|M_k(\mathbf{e})|^2 \propto k_z^2 e_z^2$, что соответствует спектральной зависимости сечения фотоионизации $\sigma(\hbar\omega) \propto (\hbar\omega - \varepsilon_i)^{3/2}$, аналогичной модели Луковского [7]. Отметим, однако, что такая спектральная зависимость получается только в том случае, когда дефект становится нейтральным после фотоионизации. Учесть влияние заряда дефекта можно, используя в качестве волновых функций не плоские волны, а комбинацию кулоновских волновых функций сплошного спектра, обращаясь в нуль на поверхности кристалла. Соответствующая комбинация кулоновских функций имеет вид

$$\Psi_k^c(r_\perp, z) \propto \psi_k^{(-)}(r_\perp, z) - \psi_k^{(-)}(r_\perp, -z), \quad (4)$$

где

$$\psi_k^{(-)}(\mathbf{r}) \propto e^{-\frac{r}{2k a_B}} \Gamma\left(1 - \frac{i}{ka_B}\right) e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} F\left(\frac{i}{ka_B}, 1, -i(kr - \mathbf{k}\mathbf{r})\right)$$

— стандартные кулоновские волновые функции сплошного спектра, имеющие при $r \rightarrow \infty$ вид комбинации плоской волны и сходящейся сферической волны [8]; $a_B = \hbar^2/mZ\epsilon e^2$ — боровский радиус; ϵ — диэлектрическая постоянная кристалла; Z — заряд дефекта после ионизации; $\Gamma(X)$ — гамма-функция; F — вырожденная гипергеометрическая функция.

Вычисления в приближении $k \ll \alpha$ с использованием соотношений (2)–(4) приводят к следующим выражениям для сечений ионизации:

$$\sigma(\hbar\omega) = \frac{\hbar\omega - \varepsilon_i + 7\varepsilon_B}{1 - \exp\left[-2\pi\left(\frac{\varepsilon_B}{\hbar\omega - \varepsilon_i}\right)^{1/2}\right]} \quad (5)$$

— для положительно заряженного после ионизации центра, и

$$\sigma(\hbar\omega) = \frac{\hbar\omega - \varepsilon_i + 7\varepsilon_B}{\exp\left[2\pi\left(\frac{\varepsilon_B}{\hbar\omega - \varepsilon_i}\right)^{1/2}\right] - 1} \quad (6)$$

— для отрицательно заряженного центра; $\varepsilon_B = mZ^2 e^4 / 2\hbar^2 \epsilon^2$ — боровская энергия.

При выводе соотношений (5), (6) пренебрегалось влиянием потенциала изображения, действующего на электрон вблизи границы полупроводник-вакуум [9]:

$$V(z) = \frac{e^2}{z} \frac{\epsilon - 1}{2\epsilon(\epsilon + 1)}. \quad (7)$$

Влияние этого потенциала можно приближенно учесть, заменив величину Z в выражении для боровской энергии на величину $Z^* = Z - 1/2$.

Наблюдаемую в эксперименте ступенчатую спектральную зависимость поверхностной фотоэдс можно объяснить, учитывая одновременно заряд дефекта и взаимодействие электрона с локальными колебаниями решетки при фотоионизации дефекта [6], используя соотношение

$$\sigma_{ph}(\hbar\omega) = \sum_{p=0}^{\infty} \frac{S^p}{p!} e^{-S} \sigma(\hbar\omega - p\hbar\Omega). \quad (8)$$

Здесь S — фактор Хуанга и Рис, характеризующий силу электрон-фононного взаимодействия, Ω — частота локальных колебаний, а σ определяется формулой (5).

Согласия с экспериментом удается достичь при следующих значениях параметров модели: $S = 7.5$, $Z^* = 2.5$, $\varepsilon_i = 0.901 \text{ эВ}$, $\hbar\Omega = 0.11 \text{ эВ}$.

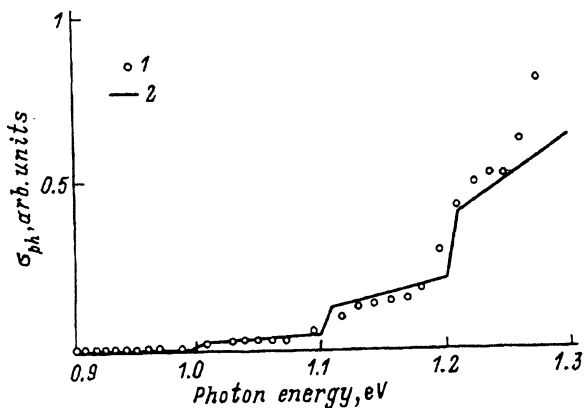


Рис. 2. Спектр поверхностной фотоэдс n -GaAs (100), выращенного методом молекулярно-лучевой эпитаксии (1) и теоретический спектр сечения фотоионизации глубокого поверхностного центра с учетом взаимодействия с локальными поверхностными фононами (2), $\hbar\Omega = 110 \text{ мэВ}$.

Результаты сравнения расчетной и экспериментальной зависимостей поверхностной фотоэдс представлены на рис. 2. Видно, что рассмотренная выше полуфеноменологическая теория правильно описывает основные качественные особенности спектра поверхностной фотоэдс. Заметим, однако, что проведенное рассмотрение непригодно для случая большой концентрации поверхностных дефектов, когда становится существенным их взаимное влияние.

3. Заключение

Сравнение теоретической спектральной зависимости сечения фотоионизации локальных поверхностных центров с глубоким уровнем с экспериментальной спектральной характеристикой поверхностной фотоэдс GaAs (рис. 2) показывает, что рассмотренная теория фотоионизации локальных поверхностных центров с участием фононов позволяет удовлетворительно описать основные особенности экспериментальных спектров поверхностной фотоэдс *n*-GaAs (100). При этом энергия локального фонона оказывается равной 0.11 эВ. В настоящее время у нас нет надежной информации о природе поверхностных дефектов или примесей, с которыми может быть связан данный локальный фонон. Следует, однако, отметить, что наличие на спектре поверхностной фотоэдс четко выраженных ступенек указывает на существование для данной поверхности только одного типа локального поверхностного фонона, связанного с поверхностным дефектом или поверхностным комплексом одного типа. Как известно [10], прогрев поверхности GaAs (100), защищенной As, в сверхвысоком вакууме до $T \approx 500-550^\circ\text{C}$ приводит к образованию поверхности, обогащенной мышьяком, с единичной поверхностной ячейкой (2×4), которая состоит из трех димеров мышьяка и одного отсутствующего димера. Мы полагаем, что именно эти димеры мышьяка могут быть ответственны за возникновение локальных фононов, наблюдаемых в данной работе.

Авторы признательны И.Н.Ясиевич за полезные дискуссии и С.Ю.Смирнову за помощь при проведении экспериментов. Эта работа была частично поддержана грантом Международного научного фонда Дж.Сороса, присужденным Американским физическим обществом.

Список литературы

- [1] G. Le Lay, D. Mao, A. Kahn, Y. Hwu, G. Margaritondo. Phys. Rev. B, **43**, 14301 (1991).
- [2] I.M. Vitomirov, A.D. Raisanen, A.C. Finnefrock, R.E. Vitturo, L.J. Brillson, P.D. Kirchner, G.D. Pettit, J. Woodall. Phys. Rev. B, **46**, 13293 (1992).
- [3] I.M. Vitomirov, A.D. Raisanen, A.C. Finnefrock. J. Vac. Sci. Techn. B, **10**, 1898 (1992).
- [4] H.G. Gatos, J. Lagowski. J. Vac. Sci. Techn., **10**, 130 (1992).
- [5] A.L. Musatov, S. Yu. Smirnov. Surf. Sci., **269/270**, 130 (1992).
- [6] А.А. Пахомов, А.Ф. Полупанов, В.И. Галиев, Э.З. Иманов. ФТТ, **33**, 730 (1991).
- [7] G. Lucovsky. Sol. St. Commun., **3**, 299 (1965).
- [8] Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц. *Квантовая механика. Нерелятивистская теория* (М., Наука, 1989).
- [9] Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц. *Электродинамика сплошных сред*. (М., Наука, 1989).
- [10] H.D. Pashlay, K.W. Haberern, J. Woodal. J. Vac. Sci. Techn. B, **6**(4), 1468 (1988).

Редактор В.В.Чалдышев