

Institut Fizyki UMCS
Zakład Fizyki Teoretycznej
Kierownik: prof. dr hab. Stanisław Szpikowski

Ewa TARANKO

Powierzchniowa fotoemisja elektronów z metali w zewnętrznym polu elektrycznym

Поверхностный фотоэффект из металлов во внешнем электрическом поле

Surface Photoemission from Metals in the External Electric Field

W ostatnich latach obserwuje się duże zainteresowanie zjawiskami emisji polowej i fotoemisji elektronów z metali, które okazały się bardzo użyteczne do badania struktury energetycznej emiterów oraz gęstości stanów elektronowych w pobliżu powierzchni metalu. Szczególnie interesującą jest fotoefekt w obecności przyłożonego z zewnątrz pola elektrycznego, tzw. efekt fotopolowy, gdyż umożliwia badanie szerokiego zakresu stanów energetycznych, zarówno na zewnątrz, jak i wewnątrz powierzchni Fermiego.

W niniejszej pracy w oparciu o formalizm teorii rozpraszania [1, 2, 3] badamy wpływ na fotoefekt powierzchniowy zewnętrznego pola elektrycznego o natężeniu $F \lesssim 3 \cdot 10^7$ V/cm. Celem pracy jest wyliczenie rozkładu energetycznego elektronów dla przypadku emisji fotopolowej ($\hbar\omega < \varphi$) z większą dokładnością niż to zrobiono w pracy [2] oraz uogólnienie formalizmu teorii rozpraszania na przypadek ($\hbar\omega > \varphi$).

Przyczyną efektu powierzchniowego jest duża zmiana potencjału w pobliżu powierzchni metalu, gdyż w jej wyniku możliwa jest absorpcja fotonów przez elektrony metalu. Przyjmujemy więc taki model metalu, który uniemożliwi absorpcję fotonów wewnątrz objętości próbki. Jako model metalu wybieramy metal swobodnoelektronowy, zajmujący półprzestrzeń $z \leq 0$, a oś z jako kierunek prostopadły do powierzchni metalu. Energia potencjalna w całym obszarze może być w najprostszym przypadku zapisana w postaci:

$$V(\mathbf{r}) = -V_0 \Theta(-z) - eFz \Theta(z) \quad (1)$$

gdzie $\Theta(z)$ — funkcja schodkowa.

Na powierzchnię metalu pada fala elektromagnetyczna o częstotliwości ω i wektorze falowym $p = \omega/c$. W naszym modelu praca wyjścia elektronów

z metalu $\varphi = -E_F$, $E_F = \frac{\hbar^2 q_F^3}{2m} - V_0 < 0$ jest energią Fermiego mierzona względem poziomu próżni, q_F — wektor falowy Fermiego.

Oznaczmy początkowy nie wzbudzony stan elektronu w metalu odpowiadający energii ε przez

$$\varphi_0(\mathbf{r}) = \frac{1}{(2I)^{3/2}} \exp(i\mathbf{K} \cdot \varrho) \cdot f_0(z) \quad (2)$$

gdzie: ϱ — wektor radialny w płaszczyźnie x, y , a \mathbf{K} wektor falowy elektronu równoległy do powierzchni metalu.

Niezburzony Hamiltonian układu można napisać w postaci

$$H_0 = H_e + H_r \quad (3)$$

gdzie:

$$H_e = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(\mathbf{r})$$

$$H_r = \sum_p \hbar \omega_p a_p^+ a_p$$

a_p^+ a_p — operatory kreacji i anihilacji dla fotonu o wektorze falowym p .

Zaburzenie spowodowane falą elektromagnetyczną jest równe

$$H' = -\frac{ie\hbar}{mc} \mathbf{A} \cdot \nabla = \sum_p \gamma_p (a_p e^{i\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}} + a_p^+ e^{-i\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}}) \cdot \nabla_z \quad (4)$$

gdzie:

$$\gamma_p = -\frac{ie\hbar}{m} \left(\frac{2I\hbar}{\omega\Omega} \right)^{1/2} (\hat{e}_p \cdot \hat{z})$$

Ω — objętość normalizacyjna, \hat{e}_p , \hat{z} — wektory jednostkowe odpowiednio w kierunku polaryzacji i osi z .

Funkcję falową elektronu po wzbudzeniu można napisać jako [1, 2]

$$\varphi(\mathbf{r}) = \varphi_0(\mathbf{r}) + \varphi_1(\mathbf{r}) \quad (5)$$

gdzie $\varphi_1(\mathbf{r})$ jest poprawką odpowiedzialną za wzbudzenie optyczne i jest ona równa

$$\varphi_1(\mathbf{r}) = \gamma_p \sqrt{n_p} \int d\mathbf{r}' G(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \nabla_z \varphi_0(\mathbf{r}) \quad (6)$$

n_p — liczba fotonów o energii $\hbar\omega$, $G(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ — oznacza funkcję Greena dla Hamiltonianu H_e przy energii $\varepsilon + \hbar\omega$.

Możemy rozłożyć ją w szereg Fouriera

$$G(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \frac{1}{(2\pi)^2} \sum_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}'(\mathbf{r}-\mathbf{r}')} G(z, z') \quad (7)$$

Tu $G(z, z')$ jest jednowymiarową funkcją Greena, spełniającą niejednorodne równanie Schrödingera:

$$\left\{ W_1 + \frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dz^2} - V(z) \right\} G(z, z') = \delta(z - z') \quad (8)$$

gdzie $W_1 = W + \hbar\omega$, $W = \varepsilon - \hbar^2 K^2 / 2m$ jest energią odpowiadającą składowej pędu prostopadłej do powierzchni metalu.

Można pokazać [4], że

$$G(z, z') = \begin{cases} C u(z) v(z') & z > z' \\ C u(z') v(z) & z < z' \end{cases} \quad (9)$$

$$C = -\mu / W(u, v)$$

gdzie $\mu = 2m/\hbar^2$, a u i v oznaczają dwa liniowe niezależne rozwiązania jednorodnego równania Schrödingera z potencjałem (1) i energią W_1 spełniające odpowiednie warunki graniczne, $W(u, v)$ oznacza Wronskian rozwiązań u i v . Podstawiając (9) i (7) do (6) otrzymamy asymptotyczne wyrażenie na φ_1 w postaci

$$\varphi_1(\mathbf{r}) = \frac{1}{z \rightarrow \infty} \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \Gamma \exp(i\mathbf{K}\rho \cdot) \cdot u(z) \quad (10)$$

$$\Gamma = -\frac{\gamma_p \sqrt{n_p} \mu}{W(u, v)} \int dz' v(z') \nabla_z f_0(z')$$

Łatwo pokazać, że

$$\int dz' v(z') \nabla_z f_0(z') = -\frac{1}{\hbar\omega} \int dz' v(z') \nabla_z \cdot \mathbf{V} f_0(z') \quad (11)$$

Cząstkową gęstość prądu, który powstaje w wyniku wzbudzenia fotonami o energii $\hbar\omega$ można otrzymać ze znanego wzoru:

$$J_z(W, \mathbf{K}) = -\frac{i\hbar e}{2m} \{ \varphi_1^*(\mathbf{r}) \nabla_z \varphi_1(\mathbf{r}) - (\nabla_z \varphi_1(\mathbf{r}))^* \varphi_1(\mathbf{r}) \} \quad (12)$$

i jest ona równa

$$J_z(W, \mathbf{K}) = \frac{(\mu e F)^{1/3} \hbar |I|^2}{m \pi (2\pi)^3} \quad (13)$$

Dla prostego modelu potencjału (1)

$$\Gamma = - \frac{\mu \gamma_p n_p}{\hbar w W(u, v)} \left\{ V_0 v(0) f_0(0) - eF \int_0^{\infty} dz' v(z') f_0(z') \right\} \quad (14)$$

Całka we wzorze (14) w przybliżeniu jest równa

$$\frac{1}{\hbar \mu w} W(f_0 v) \Big|_{z=0} \quad (15)$$

i znalezienie gęstości prądu cząstkowego sprowadza się do znalezienia rozwiązań u , v i f_0 w pkt $z=0$.

Funkcja $f_0(z)$ jest rozwiązaniem równania Schrödingera z potencjałem (1) i energią W , i jej wartość w $z=0$ wynosi:

$$f_0(0) = - \frac{\sqrt{2} q_0}{(q_0^2 + \tilde{k}_0^2)^{1/2}} \quad (16)$$

gdzie:

$$q_0^2 = \mu(W + V_0), \quad k_0^2 = -\mu W, \quad \tilde{k}_0 = k_0 + \frac{1}{4} eF/W$$

Funkcje u i v spełniają jednorodne równanie Schrödingera z potencjałem (1) i energią W_1 . Jego rozwiązaniem w obszarze $z > 0$ są funkcje Airy'ego $Ai(y)$, $Bi(y)$, których liniowa kombinacja postaci

$$\begin{aligned} u(z) &= Ai(y) - iBi(y) \quad z > 0 \\ y &= -(\mu eF)^{1/3} (z + W_1/eF) \end{aligned} \quad (17)$$

reprezentuje falę rozchodzącą się od metalu. Drugie liniowo niezależne rozwiązanie wybieramy w postaci:

$$\begin{aligned} v(z) &= aAi(y) + bBi(y) \quad z > 0 \\ &= e^{-iqz} \quad z < 0 \end{aligned} \quad (18)$$

gdzie $q^2 = \mu(W_1 + V_0)$. Współczynniki a i b można wyznaczyć z warunku ciągłości funkcji $v(z)$ i jej pochodnej w punkcie $z=0$.

Rozważymy dwa przypadki fotoemisji w zewnętrznym polu elektrycznym. Pierwszy dotyczy zwykłej fotoemisji w obecności bardzo słabego ($F \sim 10^5$ V/cm) pola elektrycznego, kiedy wzbudzone elektrony poruszają się ponad barierę potencjału. W tym przypadku $\hbar w > \varphi$, $W_1 = W + \hbar w > 0$ i $y_0 = y|_{z=0} = -(\mu eF)^{1/3} W_1/eF$ ma bardzo dużą wartość ujemną. Można wówczas przy wyznaczaniu gęstości cząstkowej fotoprądu skorzystać z wyrażeń asymptotycznych dla funkcji $u(z)$, która dla $z > 0$ jest proporcjonalna do funkcji Hankela pierwszego rodzaju rzędu $1/3$. Wykorzystując rozwi-

nięcie asymptotyczne dla funkcji Hankela oraz wyliczone współczynniki a i b znajdujemy cząstkową gęstość prądu w postaci:

$$J_z(W, \mathbf{K}) = C(\mu W_1)^{1/2} \frac{q_0^2 V_0^2}{(\tilde{k}_0^2 + q_0^2)(k+q)^2} \left\{ 1 - 2r_1 \tilde{k}_0 + r_1^2 (\tilde{k}_0^2 + q^2) \right\} \quad (19)$$

gdzie:

$$r_1 = eF/\mu \hbar \omega V_0, \quad k^2 = \mu W_1, \quad C = \frac{2 \hbar e n_p \mu^2 |\gamma_p|^2}{m (\hbar \omega)^2 (2\pi)^3}.$$

Całkowitą gęstość prądu przy $T=0^\circ\text{K}$ otrzymamy przez scałkowanie wyrażenia (19) po początkowym rozkładzie stanów elektronowych

$$J = \frac{1}{2} P \int dx (1-x) x^{1/2} (x + \tilde{\omega} - \nu)^{1/2} f(x, F) \frac{(x + \tilde{\omega})^{1/2} - (x + \tilde{\omega} - \nu)^{1/2}}{(x + \tilde{\omega})^{1/2} + (x + \tilde{\omega} - \nu)^{1/2}} \quad (20)$$

$$\nu = V_0/W_F, \quad \tilde{\omega} = \hbar \omega/W_F, \quad W_F = \hbar^2 q_F^2/2m,$$

gdzie:

$$P = \frac{8 e^3}{\pi m \hbar^2 \omega^3} \frac{n_p}{\Omega} (\hat{e}_p \cdot \hat{z})^2 \frac{\hbar^4}{4m^2} q_F^6$$

$$f(x, F) = \frac{1}{1 - eF/2rV_0} \left\{ 1 - 2rr_1 + r_1^2 \mu W_F (\nu + \tilde{\omega} - eF/2rW_F) \right\}$$

$$r = (\mu W_F (\nu - x))^{1/2}$$

Dolna granica całkowania w (20) określona jest z warunku $(x + \tilde{\omega} - \nu) > 0$. Wzór (20) w granicy przy $F \rightarrow 0$ daje wzór Adawiego [1] dla prądu fotoemisji z metali.

Drugi przypadek dotyczy tzw. emisji fotopolowej, gdy wzbudzone elektrony tunelują poprzez barierę potencjału. W tym przypadku $\hbar \omega < \varphi$, $W_1 = W + \hbar \omega < 0$, $y_0 = -(\mu e F)^{1/3} W_1/eF \gg 1$ dla natężeń pól elektrycznych $F \leq 3 \cdot 10^7$ V/cm. Przy wyznaczaniu gęstości prądu tunelujących elektronów można więc znów skorzystać z wyrażen asymptotycznych dla funkcji $u(z)$. Postępując analogicznie jak w przypadku poprzednim otrzymamy $J_z(W, \mathbf{K})$ w postaci:

$$J_z(W, \mathbf{K}) \sim q_0^2 (-\mu W_1)^{1/2} \exp \left[-\frac{4}{3} \sqrt{\mu} \frac{(-W_1)^{3/2}}{eF} \right] \left\{ 1 + \frac{2eF}{k_0 V_0} \left(\frac{1}{4} + \frac{W}{\hbar \omega} \right) \right\} \quad (21)$$

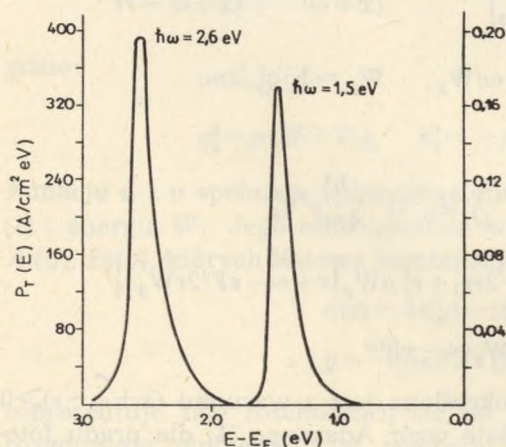
Ze wzoru (21) wynika bezpośrednio wyrażenie otrzymane w pracy [2] (wzór 3.25), jeśli pominiemy drugi składnik w nawiasie klamrowym.

Rozkład tunelujących wzbudzonych elektronów względem ich całkowitej energii wyraża się wzorem

$$P_T(E) = 2 \sum_{q, \mathbf{K}} f(E - \hbar\omega) J_z(q_0, \mathbf{K}) \delta\left(E - \hbar\omega - \frac{\hbar^2 K^2}{2m} - W\right) \quad (22)$$

E — całkowita energia stanu końcowego $E > E_F$, $f(E - \hbar\omega)$ — funkcja rozkładu Fermiego.

Na podstawie wzoru (22) przeprowadzono obliczenia rozkładu emitowanych elektronów dla różnych natężeń pola elektrycznego i różnych energii fotonów w zależności od całkowitej energii emitowanych elektronów. Do obliczeń wybrano parametry odpowiadające w przybliżeniu parametrom wolframu: $V_0 = 10,7$ eV, $\varphi = 4,5$ eV, dla którego znane są doświadczalne krzywe rozkładu $P_T(E)$. Otrzymane wyniki $P_T(E)$ dla energii fotonów $\hbar\omega = 1,5$ eV i 2,6 eV oraz natężenia pola $F = 2,3 \cdot 10^7$ V/cm przedstawione są na wykresach w zależności od $E - E_F$ (ryc. 1).



Ryc. 1. Krzywe rozkładu energetycznego elektronów emisji fotonowej dla natężenia pola elektrycznego $F = 2,3 \cdot 10^7$ V/cm i dwu różnych energii fotonów

Porównanie wyników teorii z wynikami doświadczanymi $P_T(E)$ dla wolframu [5] pokazuje właściwy kształt krzywych rozkładu emitowanych elektronów. Zaobserwowana niezgodność w położeniu maksimum krzywych jest prawdopodobnie wynikiem przyjęcia prostego swobodnoelektronowego modelu metalu, podczas gdy wolfram ma skomplikowaną strukturę energetyczną.

Uogólnienie przedstawionej metody na dwufotonową emisję fotonową zostanie opublikowane w następnej pracy.

PIŚMIENNICTWO

1. Adawi J.: Phys. Rev. **134 A** 788 (1964).
2. Bagchi A.: Phys. Rev. **B10**, 542 (1974).

3. Mahan G. D.: Phys. Rev. B2, 4334 (1970).
4. Byron F. W., Fuller R. W.: Matematyka w fizyce klasycznej i kwantowej, t. 2, PWN, Warszawa 1974.
5. Lee M. J. G.: Phys. Rev. Lett. 30, 1193 (1973).

РЕЗЮМЕ

В работе исследовано влияние на поверхностный фотоэффект из металлов внешнего электрического поля напряженностью $F \leq 3 \cdot 10^7$ в/см. Проведено вычисления энергетического распределения эмитированных электронов. Полученные результаты для различных энергий фотонов представлены на графике 1.

SUMMARY

The influence of the external electric field $F \leq 3 \cdot 10^7$ V/cm on the photoemission from metals has been investigated. The total energy distribution of the emitted electrons $P_T(E)$ has been numerically calculated. The obtained results for various photon energy have been presented in Figure 1.

