

Особенности энергетического спектра полярных граней арсенида галлия

Наконечников А.В., Блиев А.П.

Северо-Осетинский государственный университет им. К.Л. Хетагурова

В настоящее время существуют противоречивые данные по энергетическому спектру полярных граней GaAs. Видимо это связано с недостатками метода ионной бомбардировки, которыми получена атомарно-чистая поверхность. Поэтому для исследования энергетического спектра GaAs, атомарно – чистая поверхность полярных граней в нашем случае была получена сколом в сверхвысоком вакууме, причем замечено, что наилучшее качество исследуемой поверхности получается, когда скалывающие усилия прилагаются в направлении $\langle 211 \rangle$. Методом электронного пучка Андерсона была измерена работа выхода на образцах с дырочной проводимостью. Для грани (111)В она составляла 4,77 эВ, А для грани (111)А – 4,42 эВ. Аналогичные измерения для кристаллов с электронной проводимостью показали, что: для грани (111)В $\phi=4.62$ эВ, а для (111)А $\phi=4.3$ эВ. Таким образом, для образцов обоих типов проводимости разность потенциалов между гранями В и А составляет $0,35 \pm 0,03$ эВ. Различие в работе выхода электрона для граней А и В, очевидно связано с различием атомной и электронной структуры для этих граней. В частности, это может обуславливаться различным характером поверхностных состояний на гранях А и В арсенида галлия. Различие в работе выхода для граней (111)А и (111)В может быть объяснено и различием в сродстве к электрону для этих граней, которое может быть вызвано разностью электроотрицательностей атомов галлия и мышьяка.

По Полингу электроотрицательность для галлия и мышьяка соответственно равна 1,6 и 2,0, а ионность связи составляет 4%.

Можно предположить, что за счёт разности электроотрицательностей атомов галлия и мышьяка на поверхности полярных граней возникает двойной электрический слой со скачком потенциала. Знак скачка потенциала таков, что отрицательно заряженная обкладка двойного слоя находится у

атома с большей электроотрицательностью (мышьяка), а положительно заряженная - у атома с меньшей электроотрицательностью (галлия). Этот скачок должен повышать на грани В и понижать на грани А сродство к электрону, то есть соответственно изменять работу выхода электрона.

Величина дипольного момента двойного слоя может быть рассчитана по формуле:

$$m = q \cdot l,$$

где q -эффективный заряд, l -дипольное расстояние между центрами зарядов.

Эффективный заряд одной ионной связи для GaAs составляет $0,2e$, l -рассчитывается из элементарной объёмной ячейки и оказывается равным

$l = \frac{a}{4\sqrt{3}}$, где $a=5,654$ А-постоянная решётки для GaAs. Расчёт дипольного

момента с учётом q и l , а также 4% ионности связи для GaAs даёт величину $0,2$ Дебая. Изменение работы выхода электрона, вызываемое этим дипольным моментом можно оценить по формуле:

$$\Delta j = \frac{eSm}{e_0}$$

где Δj - изменение работы выхода, вызываемое дипольным моментом; e -заряд электрона; $s=8,85 \cdot 10^{14} \text{ см}^{-2}$ -поверхностная плотность атомов; m -дипольный момент; e_0 -диэлектрическая постоянная. Расчёт показывает, что $\Delta j = \pm 0,67 \text{ эВ}$. Таким образом, если бы атомы на поверхности занимали положения, эквивалентные объёмным, то разница в работе выхода между гранями А и В, вызываемое дипольным моментом возникающим из-за разности электроотрицательностей атомов галлия и мышьяка составит $1,34 \text{ эВ}$. Однако атомы поверхностного слоя претерпевают смещение в направлении перпендикулярном поверхности. Поверхностный атом будет проявлять тенденцию к sp^2 -гибридизации. Следовательно, на поверхности А атомы галлия немного опустятся, занимая промежуточное положение между sp^3 и sp^2 -конфигурациями связей.

На грани А структура «уплотняется» по сравнению с объёмом, а это должно приводить к уменьшению дипольного момента (так как уменьшается l) и, следовательно, вызываемое им уменьшение работы выхода будет меньше, чем $0,67\text{эВ}$.

Экспериментально установлено, что «уплотнение» на грани А составляет 16%, а на грани В «разрыхление» составляет 3%, причем смещение атомов на грани В в 1,5-2,5 раза больше, чем на грани А. Тогда на грани А $\Delta\phi = 0,67\text{эВ}$, а на грани В $\Delta\phi = 0,8\text{эВ}$. Следовательно, по расчетным данным контактная разность потенциалов должна составлять $1,34\text{эВ}$, а эксперимент показывает, что она равна $0,35\text{эВ}$. Следовательно, если бы работа выхода определялась только средством к электрону, то с учётом «уплотнения» и «разрыхления» граней А и В контактная разность потенциалов между гранями А и В была бы больше, чем $1,34\text{эВ}$.

Можно предположить, что уменьшение контактной разности потенциалов связано с наличием поверхностных состояний, имеющих различную природу на гранях А и В. На грани А поверхностные состояния обусловлены «оборванными» связями атомов Ga, элемента III группы. Следовательно, они должны проявлять акцепторный характер и при их заполнении поверхность заряжаться отрицательно, что приводит к изгибу зон вверх. На грани В поверхностные состояния обусловлены «оборванными» связями атомов As, элемента V группы, следовательно, они проявляют донорные свойства, и при их ионизации поверхность будет заряжаться положительно, что приводит к изгибу зон вниз.