

П.В. Галій¹, О.Я. Тузяк¹, О.П. Поплавський², О.В. Цветкова¹

Вплив областей просторового заряду на релаксаційну емісію електронів опромінених діелектричних поверхонь

¹Львівський національний університет імені Івана Франка, вул. Драгоманова, 50, Львів, 79005

²Прикарпатський національний університет імені Василя Стефаника,
фізико-технічний факультет, вул. Шевченка, 57, Івано-Франківськ, 76000, Україна
E-mail: galiy@electronics.wups.lviv.ua

На основі теоретично розрахованих характеристик енергетичних спектрів народжених екзоелектронів у широкозонних кристалах CsI методом Монте-Карло досліджено вплив областей просторового заряду та електрон-фононних взаємодій на транспорт до поверхні та вихід у вакуум низькоенергетичних екзоелектронів. Застосовуючи комп'ютерне моделювання процесів розсіяння на LO-фононах у присутності однорідного електричного прискорюючого поля, одержано модельні енергетичні спектри екзоелектронів, що досягли поверхні, як межі розділу. Спектри демонструють, що енергії, набуті екзоелектронами при їх дрейфовому русі у приповерхневому шарі і які досягли поверхні, можуть бути достатні для подолання ними поверхневого енергетичного бар'єру та виходу з кристалу (екзоемісії).

Ключові слова: екзоемісія, цезій галоїди, транспорт електронів.

Стаття постуила до редакції 15.10.2010; прийнята до друку 15.12.2010.

Вступ

Діелектричні лужно-галоїдні кристали (ЛГК) CsBr, CsI та їх тонкі шари є високоефективними емітерами фотонів та електронів – при електронному, X-, ВУФ- чи УФ-опроміненні, чим пояснюється їх використання у якості сцинтилюючих детекторів іонізуючого випромінювання, ефективних емітерів вторинних електронів та X-, ВУФ- чи УФ- фотокатодів [1-7]. З іншого боку, кристали CsI, як чисті, так і леговані Na, Tl, CO₃ є ефективними сцинтиляторами [1,3]. Підчас і після опромінення кристалів електронно-йонні їх релаксації супроводжуються емісією як фотонів (сцинтиляції, люмінесценція), так і низькоенергетичних електронів (вторинних, екзоелектронів). Супроводжуюча релаксацію опромінених кристалів екзоелектронна емісія (ЕЕ) є також одним з шляхів втрати інформації про дозу опромінення, а її кількісний теоретичний опис є актуальним завданням, оскільки дає змогу уточнити дозиметричну інформацію у бік її збільшення [8-10].

У ЛГК вихід (емісія) вільних низькоенергетичних електронів, збуджених у зону провідності тим чи іншим способом, є високим завдяки переважаючому впливу слабких електрон-фононних взаємодій при їх русі до поверхні як межі розділу, а також через відносно низьке електронне споріднення (рис. 1). З метою кількісних оцінок спроби опису руху вільних низькоенергетичних електронів у діелектриках та до

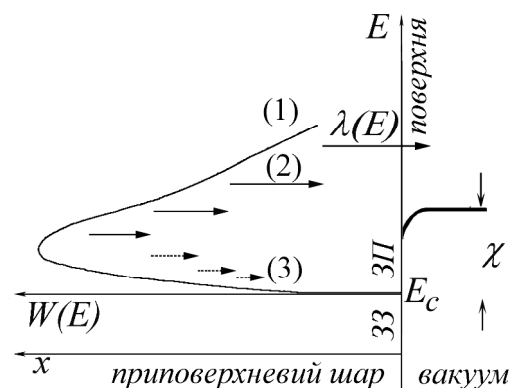


Рис. 1. Енергетично-просторова схема прискорення електричним полем низькоенергетичних екзоелектронів, звільнених з екзоемісійно-активних центрів у кристалі CsI. Вісь x напрямлена у глибину кристалу. (1) – енергетичний спектр народжених екзоелектронів, (2) – процес формування “гарячих” електронів прискорюючою структурою просторового заряду з напруженістю тягнучого електричного поля більше критичного $F_0 \geq 3,3 \cdot 10^5$ В/см, (3) – “охладження” народжених екзоелектронів за відсутності тягнучого поля, або коли $F_0 < 3,3 \cdot 10^5$ В/см.

Таблиця 1

Характеристики збуджених на F-центрах екзоелектронів кристалів CsBr/CsI:

співставлення перших та других координаційних сфер $R_I=0,37/0,40$, $R_{II}=0,43/0,46$ нм; p – ймовірність “віртуальної локалізації”; a – область “віртуальної локалізації” збудженого електрона; W_{tot} – повна ймовірність народження; $\langle E^* \rangle$ – середня енергія, а E_n – найімовірніша енергія народжених вільних екзоелектронів.

p	a , нм	W_{tot}	$\langle E^* \rangle$, eB	E_n , eB
0,5	0,39/1,64	0,64/0,04	2,00/0,14	1,12/0,1
0,75	0,56/2,30	0,53/–	1,01/–	0,56/–

поверхні робилися у різні роки різними авторами [4, 11-13].

Запропонована робота є продовженням проведених раніше авторами досліджень релаксаційної ЕЕ [3,8-10,14] та проблем транспорту до поверхні народжених низько-енергетичних екзоелектронів [3, 15]. У роботі на основі теоретично розрахованих раніше [14] характеристик енергетичних спектрів народжених екзоелектронів для широкозонних кристалів CsBr та CsI, методом Монте-Карло досліджено вплив областей просторового заряду та електрон-фононних взаємодій на транспорт до поверхні та вихід у вакуум (емісію) низькоенергетичних екзоелектронів.

I. Енергетичні спектри екзоелектронів при наявності областей просторового заряду

1.1. Вихідні умови модельних досліджень транспорту екзоелектронів

Екзоемісія, котра корелює з релаксацією енергетично-нерівноважних поверхонь, супроводжуючи їх релаксацію, є надзвичайно інформативним неруйнівним методом дослідження. За величиною струму ЕЕ можна робити висновки про концентрацію поверхневих дефектів, енергетичний спектр електронних пасток у поверхневому шарі, енергетичну нерів-новажність поверхні, процеси самовільної та індукованої релаксації та самовільного/індукованого стирання записаної на центрах інформації [16]. Дослідження екзоемісії електронів, процесів їх генерації, транспорту до поверхні та подолання поверхневого енергетичного бар'єру є актуальними [14] і такими, що розвивають

методологію релаксаційної екзоелектронної емісійної спектроскопії (ЕЕС). Для нашого розгляду вважатимемо, що елементарний акт екзоемісії складається з наступних етапів: 1) генерація екзоелектрона, 2) транспорт його до поверхні, 3) і за певних умов [14,15] подолання поверхневого потенціального бар'єру та вихід у вакуум. Об'єктами нашого дослідження є ЛГК CsI та CsBr.

Однією з важливих характеристик ЕЕ та ЕЕС поверхні є енергія як народжених, так і емітованих екзоелектронів, яка, як правило, приблизно на порядок перевищує енергії “нетермалізованих” електронів при кімнатній (0,027 eB) та вищих температурах. Саме енергія народжених електронів визначає можливість досягнення поверхні (транспорт), емісії (подолання поверхневого енергетичного бар'єру) та енергію емітованих електронів.

Для УФ-опромінених кристалів CsBr та опромінених електронами тонких плівок CsBr, CsI, CsBr_{1-x}I_x, одержані енергетичні спектри емітованих екзоелектронів, положення максимумів яких свідчить про надтеплові енергії екзоелектронів, що з енергетичних міркувань дозволяє припустити їх народження в особливих Оже-подібних рекомбінаційних процесах. Теоретичні дослідження цих процесів, що наведені у наших працях [8,9,14], дозволили впевнитись у правильності зробленого вище припущення, оскільки енергетичні спектри екзоелектронів, народжених в Оже-рекомбінаційних процесах, задовільно корелюють з експериментальними енергетичними спектрами емітованих екзоелектронів (рис. 2).

На основі Оже-подібного механізму електронних релаксацій радіаційних дефектів, описаного рівнянням (1),

$$[V_k / H, F] \xrightarrow{E} F(v_a^+ e^-) \Rightarrow v_a^+ + e^- \uparrow, \quad (1)$$

для кристалів CsBr/CsI розраховані енергетичні спектри народжених екзоелектронів, під дією миттєвого збурення – енергії, що виділилася при анігіляції віртуального екситона e_{as}^0 , утвореного [H,F]-рекомбінацією, що детально описано у нашій праці [14]. Наведені у рівняння (1) V_k , H, F радіаційні дефекти (РД) утворюються радіаційним опроміненням кристалів.

Розраховані в одноелектронному наближенні енергетичні спектри народжених екзоелектронів є насправді не чим іншим, як ймовірностями переходу електрона F-центра у вільний стан з тою чи іншою енергією. Вираз для розрахунку густини цієї ймовірності має вигляд (2):

$$W_{F \rightarrow free}(E, a) = \frac{2 a^3 \hbar^2}{7 m q E} \left(\frac{2 a^3}{3} - \frac{\hbar}{\sqrt{2 m q E}} \int_0^a \frac{\sin(\sqrt{8 m q E} (r-a) / \hbar)}{r-a} r^2 dr \right)^{-1} \times \left(\int_0^a r (1+a-r) e^{-a r} \left(\sin\left(\frac{\sqrt{2 m q E}}{\hbar} r\right) - \frac{r \sin((2a-r)\sqrt{2 m q E} / \hbar)}{2a-r} \right) dr \right)^2. \quad (2)$$

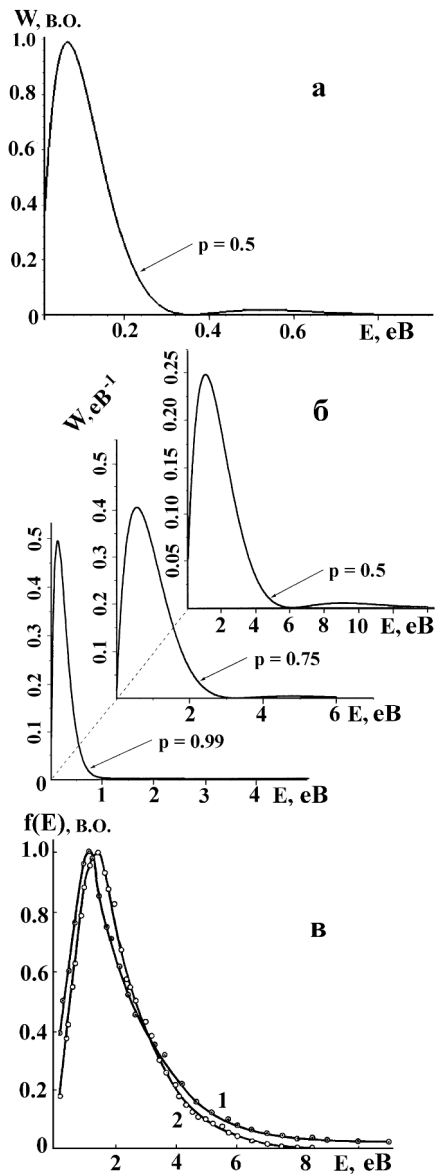


Рис. 2. Співставлення енергетичних спектрів народжених та емітованих екзоелектронів для CsI та CsBr: а). Один з пронормованих енергетичних спектрів народжених екзоелектронів, розрахований для CsI (для найменшої “області віртуальної локалізації” електрона F-центра $a = 1,64$ нм). б). Розраховані ненормовані енергетичні спектри збуджених екзоелектронів для CsBr (при значеннях параметра $p = 0,5; 0,75; 0,99$), або ж “областей віртуальної локалізації” збуджених екзоелектронів. в). Експериментальні нормовані енергетичні спектри емітованих екзоелектронів, отримані методом затримуючого поля для полікристалічних плівок: 1 – CsBr; 2 – CsI, опромінених електронним пучком ($E = 2,5$ кеВ) при густині струму $j = 0,1$ А/м² протягом часу $t = 20$ хв.

У рівнянні (2): a – область локалізації збудженого екзоелектрона з електронного F-центру; m – ефективна маса, а q – заряд електрона; E – енергія вільного народженого екзоелектрона.

Розраховані параметри енергетичних спектрів екзоелектронів для CsBr/CsI наведені у таблиці 1.

Отримані середні енергії електронів 2 еВ для найбільш фізично ймовірної області віртуальної локалізації народженого екзоелектрона 0,39 нм, близької до величини першої координаційної сфери CsBr (0,37 нм), дозволили зробити висновок, що одержані величини є реальними, а модель адекватно описує електронну релаксацію точкових РД (V_k, H, F) з народженням екзоелектронів (рівняння (1)). Одержані теоретичні спектри народжених разом з експериментальними спектрами емітованих екзоелектронів подані на рис. 2. Порівняння параметрів розрахованих спектрів з експериментальними (табл. 1 та рис. 2), дозволили порівняти їх та впевнитись в адекватності моделі, що розглядається, для опису ЕЕ.

Закономірності формування енергетичних спектрів народжених екзоелектронів є важливими, оскільки вони разом з процесами руху до поверхні (як межі розділу) формують енергетичні спектри емітованих екзоелектронів. Труднощі при дослідженні експериментальних енергетичних спектрів емітованих екзоелектронів з кристалічних зразків товщиною 0,3-0,5 мм при попередньому збудженні екзоемісії електронами з енергіями ≤ 3 кеВ і, відповідно, глибиною проникнення $\leq 100-130$ нм виникають, впершу чергу, внаслідок зарядження приповерхневого шару і неможливості їх одержання для кристалічних зразків, вказаних товщин. Експериментальні енергетичні спектри емітованих екзоелектронів можуть бути і отримані та наведені на рис. 2 для тонких полікристалічних плівок CsBr/CsI, напилених на провідну молібденову підкладку, плівки товщиною співмірною з глибиною проникнення опромінюючих електронів, що дозволяє мінімізувати чи майже уникнути зарядові ефекти. Крім того труднощі при дослідженні енергетичних спектрів емітованих екзоелектронів виникають через низькі інтенсивності ЕЕ, що можуть бути на рівні 15 ел/(см²·с). Водночас, спектри народжених екзоелектронів, одержані з теоретичних розрахунків, та спектри емітованих, одержані при коректно поставлених експериментах, можуть слугувати критерієм адекватності фізичної моделі явища ЕЕ, котра найбільш повно і коректно описує процес ЕЕ.

Виявлені відмінності між експериментальними та теоретичними спектрами народжених екзоелектронів для CsBr, а особливо для CsI, та їх характеристиками (величина повної ймовірності ЕЕ та середня енергія народжених екзоелектронів (табл. 1)) є пов’язані з особливостями релаксації електронних збуджень у CsI (при врахуванні його електронного споріднення $s = 0,7$ еВ) та не ставлять під сумнів адекватність опису явища Оже-подібною рекомбінаційною моделлю (1). Про деякі особливості і виявлені антагонізми при розгляді характеристик для кристалу CsI, наведених у табл. 1 та на рис. 2, детально йтиме мова нижче.

Далі у роботі, використовуючи розраховану

середню енергію народжених екзоелектронів, змодельовано процеси їх руху до поверхні. Етап руху електронів до поверхні є найскладнішим для теоретичного опису внаслідок різноманітних процесів, що мають місце при цьому: розсіяння на фононах, заряджених та нейтральних дефектах, прискорення у можливих заряджених приповерхневих структурах. Важливою для з'ясування механізму ЕЕ є інформація про товщину шару, що бере участь в ЕЕ, так званого екзоемісійно-активного шару.

Згідно результатів розрахунку енергетичних спектрів народжених екзоелектронів, середня енергія народжених екзоелектронів становить 2 еВ (CsBr) та 0,14 еВ (CsI), у той час як одержані експериментально найбільш ймовірні енергії емітованих екзоелектронів для них різняться незначно і становлять приблизно 1 еВ.

Той факт, що експериментально спостережувана енергія емітованих екзоелектронів для CsBr є менша за теоретично розраховану, є логічним, адже народжений екзоелектрон є низькоенергетичним, і при транспорті до поверхні зазнаватиме переважно енергетичних втрат за рахунок розсіяння на фононах, тому емітуватиметься з меншою енергією. Також можна стверджувати, що ймовірність виходу екзоелектрона обернено пропорційна глибині, його народження (шляху, який він пройшов до поверхні). У випадку CsI ситуація протилежна – екзоелектрон при народженні володіє енергією меншою за ту, з якою він емітується, більше того, вона навіть не перевищує електронне споріднення кристалу (0,7 еВ), тобто народжений на поверхні кристалу CsI екзоелектрон не вийде за його межі. Однак, оскільки струм екзоемісії з цього кристалу спостерігається, приходимо до дещо несподіваного висновку: ймовірність виходу екзоелектрона з CsI росте з ростом глибини його народження.

Для того, щоб пояснити причину такої до певної міри антагоністичної ситуації у випадку кристалів CsI, нагадаємо: на сьогодні доведено, що необхідною передумовою для протікання екзоемісії електронів є наявність у твердому тілі дефектів структури, котрі у ЛГК є також центрами забарвлення і ефективно утворюються при їх радіаційному опроміненні, як і області просторового заряду. Коротко вкажемо на особливості накопичення РД та утворення областей просторового заряду у приповерхневому шарі кристалів CsBr та CsI при електронному опроміненні.

1.2. Утворення радіаційних дефектів та формування областей просторового заряду при електронному опроміненні кристалів CsBr та CsI

Опромінення ЛГК електронами чи іншим високоенергетичним випромінюванням з енергією, що перевищує їх ширину забороненої зони ($E > 2-3E_g$), приводить до деструкції поверхонь по леткій компоненті, якою для ЛГК є галогід (I, Br⁻, I⁰, Br⁰). Як наслідок, маємо утворення вільних аніонних вакансій (J_a^+), що формують область просторового позитивного заряду у поверхневому шарі, або ж, при

захопленні аніонними вакансіями (J_a^+) електронів, утворюються електрично нейтральні електронні $F(J_a^+e^-)$ -центри.

Тобто при радіаційному дефектоутворенні у поверхневому шарі можлива деструкція поверхні по галогену і накопичення тільки однієї компоненти комплементарної пари – аніонних вакансій $a(J_a^+)$ або $F(J_a^+e^-)$ -центрів у поверхневому шарі, а на поверхні $a_s(J_{as}^+)$ або $F_s(J_{as}^+e^-)$ – поверхневих центрів. Це є причиною більш швидкого радіаційного руйнування поверхні кристалів CsBr та CsI, ніж їх об'єму.

Утворювані на початкових стадіях опромінення з “технологічних” дефектів (аніонних J_a^+ і катіонних J_c^+ вакансій, дислокацій, що з'явилися в процесі вирощування кристалів та обробки їх поверхні), центри захоплення зарядів, а також РД поверхневого шару можуть ставати центрами емісії екзоелектронів і проявлятися у спектрах термостимульованої ЕЕ. Тому термостимульована ЕЕ, як одна із мод ЕЕС, може слугувати високочутливим неруйнівним методом для виявлення “технологічних” дефектів поверхні, а також початкових стадій утворення та накопичення РД у приповерхневому шарі ($n_{ds} \approx 10^{10}-10^{11} \text{ см}^{-2}$), використовуватись для порівняння радіаційної стійкості поверхонь кристалів [3].

Для того, щоб селективно утворити аніонні екситони та РД в аніонній підгратці, кристал CsBr ($E_g = 7,3 \text{ еВ}$) достатньо опромінити помірними дозами ($D \leq 10^4 \text{ Гр}$) ультрафіолету при енергії кванта $hn \leq 7 \text{ еВ}$. У випадку CsI утворювані комплементарні пари дефектів є слабо просторово розділені, тому швидко рекомбінують, не накопичуючись в об'ємі при 295 К, тобто у чистому кристалі CsI ($E_g = 6,1 \text{ еВ}$) дефекти УФ-опроміненням не утворюються. Саме такі швидкі процеси “заліковування” (рекомбінації утворених РД) є причиною радіаційної стійкості CsI. Для утворення РД у цьому кристалі використовують інтенсивне електронне опромінення (наприклад електрони з енергією $E = 3 \text{ кеВ}$) при потужності дози $5 \cdot 10^6 \text{ Гр/с}$ [3].

Глибина народження екзоелектронів визначається глибиною проникнення відповідного іонізуючого опромінення у відповідний кристал: для УФ-опроміненого CsBr це $\approx 1000 \text{ нм}$, для опроміненого інтенсивним електронними потоками (3 кеВ) CsBr/CsI це $\approx 110-120 \text{ нм}$, а глибина виходу – чинниками, що впливають на напрям зміни (збільшення чи зменшення) енергії екзоелектронів при транспорті до поверхні. Особливістю збудження екзоемісії (забарвлення) обох кристалів було також те, і УФ-, і електронне опромінення проходило з гасінням виходу фото- та вторинних електронів, а це означає, що у приповерхневому шарі формувалися заряджені структури, тобто могло виникнути електричне поле, що “тягнуло” електрони до поверхні (структура “+ – +”).

1.3. Особливості моделювання транспорту

екзоелектронів методом Монте-Карло

Перейдемо до розгляду другого етапу акту екзоемісії: транспорту народженого екзоелектрона до поверхні. Екзоелектрони, які тут розглядаються – це електрони, збуджені у зону провідності діелектрика за рахунок енергії, що виділилася при екзореакції. Тобто, насправді, це всі народжені екзоелектрони, а не лише ті з них, що емітувалися твердим тілом. Зрозуміло, що екзоелектрони народжуються у приповерхневому шарі рівному за товщиною глибині проникнення іонізуючого опромінення, де накопичилася енергія опромінення (утворився екзоемісійно-активний шар), тобто де є РД, що рекомбінують з виділенням енергії та центри, здатні емітувати електрон – електронні F-центри.

Нагадаємо, що у чистому кристалі CsI при УФ-опроміненні РД не утворюються і екзоелектронна емісія відсутня. Для утворення РД у цьому кристалі і спостереження ЕЕ використовують електронне опромінення (наприклад електрони з енергією $E = 3$ кеВ і густиною струму $j \leq 0,01-2$ А/м²), при якому можливе утворення на основі поверхневих J_{as}^+ (деструкція поверхні CsI по галогену) поверхневих електронних центрів $F_s(J_{as}^+ e^-)$, які виступають у ролі екзоемісійно-активних центрів при термоіонізації.

Коли використовувати високоінтенсивне електронне опромінення з $j \geq 10$ А/м² (потужності дози $\geq 5 \cdot 10^6$ Гр/с), то окрім поверхневих електронних центрів $F_s(J_{as}^+ e^-)$, утворюються комплементарні пари РД (V_k, H, F) по всій глибині проникнення електронного пучка і можливе народження екзоелектронів як в термоіонізаційних (“поверхневі екзоелектрони”) так і в Оже-подібних рекомбінаціях комплементарних пар РД [3]. Тому зрозуміло, що при високоінтенсивному електронному опроміненні CsI і наступній релаксації опромінених поверхонь екзоелектрони народжуються по всій глибині проникнення електронного пучка, який одночасно створює заряджені структури “+ - +”), і виникає електричне поле, що “тягнуло” народжені екзоелектрони до поверхні.

Народжені екзоелектрони при транспорті до поверхні зазнають розсіяння на фонах, втрачаючи енергію, однак їх енергія може також і зростати завдяки “тягнучим” прискорюючим полям у приповерхневому шарі. Тому ймовірність виходу (емісії) буде вищою для тих електронів, що народилися на більшій глибині, і набули більшої енергії при “розгоні” прискорюючим полем. Таким чином, ми з’ясували, що енергія народжених у йодиді цезію екзоелектронів при транспорті до поверхні може зростати. Далі спробуємо моделювати такі процеси руху.

Транспорт народжених екзоелектронів – це дифузійно-дрейфовий рух у полі градієнта їх концентрації з розсіянням на фонах і дефектах та прискоренням у електричному полі (на довжині їх вільного пробігу між актами розсіяння) при русі до

поверхні. Екзоелектрони, прискорені полем, рухаються у напрямі до поверхні і встигають набути енергії, достатньої для подолання поверхневого енергетичного бар’єра та емісії. Моделювання такого руху електронів до емітуючої поверхні з урахуванням всіх процесів є досить складним, тому для спрощення обмежимося моделюванням подібного процесу у квазікласичному наближенні.

Моделювання методом Монте-Карло розсіяння електронів у діелектриках при наявності електричних полів ґрунтується на розгляді електрон-фононної взаємодії та розгону розсіяних електронів в електричному полі на довжині їх вільного пробігу.

Конфігурація зон просторового заряду, створеного у приповерхневій області опроміненого зразка, визначається струмом пучка прискорених електронів, їх енергією та умовами відбору вторинних електронів: при електронному опроміненні з відбором вторинних електронів поверхня зразка заряджається додатньо, у приповерхневій області створюється структура типу “плюс-мінус”, тобто на поверхні спостерігається позитивний заряд [2].

Розсіяння на LO-фонах визначає рух низькоенергетичних електронів до поверхні, аж до критичного значення напруженості поля (рис. 1): при вищих напруженостях рух електронів до поверхні може радикально змінитись, оскільки електричні поля можуть стати визначальними як для значення глибини виходу $d(hw, F_0)$, так і для вигляду енергетичних спектрів електронів, що досягли поверхні. У [17] було показано, що довжини вільного пробігу для пружного розсіяння завжди менші за довжини вільного пробігу для непружного розсіяння. Тому при моделюванні приймемо, що електрони при русі в емісійно-активному шарі зазнають непружних розсіянь на LO-фонах. Результатом стає або зникнення фону (енергія електрона зростає), або утворення фону (енергія електрона зменшиться). Швидкості цих процесів (f_{LO}^- та f_{LO}^+ відповідно) визначаються наступним чином:

$$f_{LO}^- = k_q n_q \ln \frac{\sqrt{1 + hw/E} + 1}{\sqrt{1 + hw/E} - 1},$$

$$f_{LO}^+ = k_q (n_q + 1) \ln \frac{1 + \sqrt{1 + hw/E}}{1 - \sqrt{1 - hw/E}},$$

$$k_q = \frac{m w e^2}{\hbar \sqrt{2mE}} \left(\frac{1}{e_\infty} - \frac{1}{e_0} \right), \quad (3)$$

де m – маса електрона, E – його енергія, n_q – константа, яка залежить від матеріалу і температури, близька за значенням до числа фонів за статистикою Бозе-Ейнштейна, w – частота фону, e_∞ – високочастотна, а e_0 – статична діелектрична проникливість матеріалу.

Довжина вільного пробігу електрона λ між двома послідовними електрон-фононними взаємодіями визначається так:

$$\frac{1}{I} = \frac{1}{I_1} + \frac{1}{I_2} = \left(\frac{m}{2E} \right)^{1/2} (f_{LO}^+ + f_{LO}^-). \quad (4)$$

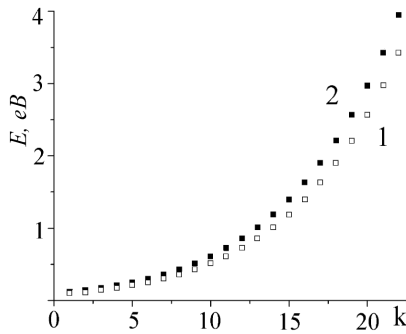


Рис. 3. Залежність енергії електрона від порядкового номера зіткнення k . Крива 1 містить дискретний набір текучих “початкових” значень енергій (перед k -тим зіткненням), а крива 2 - точки, що є набором текучих “кінцевих” значень енергій (після k -го зіткнення). Зміщення точки нижньої кривої у відповідну її точку верхньої розраховувалося за формулою (5). Початкова енергія електрона 0,1 еВ. Прискорення відбувається у полі напруженістю 10^6 В/см.

Енергія електрона після j -того акту розсіяння (E_j) складається з його енергії після $(j-1)$ -го акту розсіяння, яка зростає на певну величину за рухунок тягнучого поля (причому шлях “розгону” визначається довжиною вільного пробігу після $(j-1)$ -го акту розсіяння), та зменшується на певну величину внаслідок малокутового розсіяння на LO -фононах:

$$E_j = E_{j-1} + eF(x)I_{j-1}\cos q_{j-1} - \hbar\omega_{LO}. \quad (5)$$

Тут I_{j-1} – довжина вільного пробігу електрона з енергією E_{j-1} ; q_{j-1} – кут розсіяння при $j-1$ -му зіткненні; E_{j-1} – енергія електрона після $j-1$ -го зіткнення; $eF(x)I_{j-1}\cos q_{j-1}$ – енергія, набута електроном при переміщенні $I_{j-1}\cos q_{j-1}$ у полі напруженості $F(x)$ (пройшовши шлях I_{j-1} під кутом q_{j-1} до нормалі до поверхні, електрон перемістився у напрямі до поверхні саме на $I_{j-1}\cos q_{j-1}$); $\hbar\omega_{LO}$ – енергія фонона.

Електрон, що досяг поверхні, для виходу у вакуум повинен подолати енергією більшою за електронне споріднення. Долаючи цей енергетичний бар’єр на межі кристал/вакуум, він втрачає енергію, рівну C :

$$E = E_j - c, \quad (6)$$

де E_j – енергія, з якою електрон дійшов до поверхні,

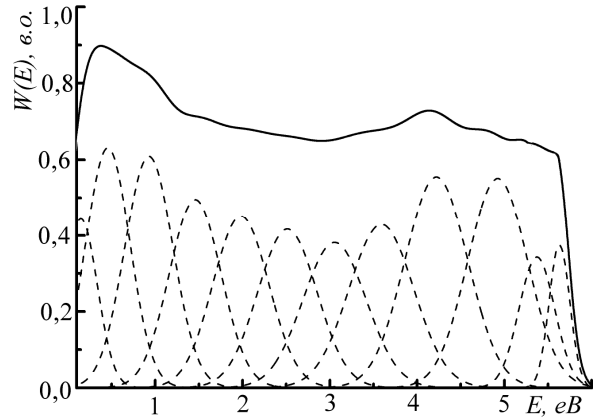


Рис. 4. Модельні енергетичні спектри екзоелектронів, що досягли поверхні (один з можливих розкладів на елементарні спектри окремих груп електронів, виконаний пакетом Origin6).

а E – енергія, з якою він вийшов за межі твердого тіла.

У наших модельних експериментах для величина напруженості однорідного електричного поля становила 10^6 В/см і була більша за критичну ($F_0 = 3,3 \cdot 10^5$ В/см). Інші параметри моделювання наведені у табл. 2. Довжину вільного пробігу екзоелектронів як функцію енергії розраховували за (4). На рис. 3 зображена залежність початкової та кінцевої енергії електрона від числа зіткнень, розрахована за (5). За початкову енергію електрона брали 0,1 еВ. З рис. 4 видно, що народжені низькоенергетичні електрони при такій величині та конфігурації електричного поля набувають додаткової енергії. Це у значній мірі компенсує енергетичні втрати при малокутовому розсіянні на LO -фононах, збільшує їх довжину вільного пробігу і забезпечує їх дрейфовий рух до поверхні. Бачимо, що зі зростанням кількості актів розсіяння за рахунок прискорення полем, енергія електрона приповерхневого шару CsI зростає до величини, що перевищує поверхневий енергетичний бар’єр. Наголосимо, що ситуація розгону може мати місце лише за умови, що енергетичні втрати на розсіяння не перевищують набутої у полі енергії, відповідно існує мінімальне значення напруженості тягнучого поля. Зроблені нами оцінки показують, що для йодиду цезію ця величина становить $3,3 \cdot 10^5$ В/см (рис. 1).

Оскільки екзоелектрони народжуються з певним спектром енергій, відповідно, і їх енергії при

Таблиця 2

Характеристики кристалу йодиду цезію: e_{χ} - високочастотна, e_0 – статична діелектричні проникності; c - електронне споріднення; E_g – ширина забороненої зони; ω_{LO} – гранична частота поздовжніх оптичних фононів; E_0 – енергія народжених екзоелектронів; I_0 – довжина вільного пробігу, що відповідає енергії 0,1 еВ; q_j – максимальний кут розсіяння на фононах.

	e_{χ}	e_0	c , еВ	E_g , еВ	ω_{LO} , c^{-1}	E_0 , еВ	I_0 , нм	q_j
CsI	2,62	6,59	0,7	6,1	$1,87 \cdot 10^{13}$	0,1	0,37	5°

досягненні поверхні будуть мати вигляд спектру, причому ширина спектру і максимальні енергії електронів залежать від енергії (5) та місця народження у поверхневому шарі. Результат модельних розрахунків енергетичного спектру екзоелектронів методом Монте-Карло подано на рис. 4 інтегральною кривою (зауважимо, що залежності, наведені на рис. 3 та 4, коректні тільки для енергій екзоелектронів, набутих ними при розгоні до $E < 2E_g$, оскільки при вищих енергіях слід враховувати можливий механізм ударної іонізації).

Таким чином, застосовуючи комп'ютерне моделювання процесів розсіяння низькоенергетичних екзоелектронів на *LO*-фононах з врахуванням їх прискорення у однорідному електричному полі, було отримано енергетичні спектри екзоелектронів, що досягли поверхні. З рис. 4 бачимо, що серед електронів, котрі дійшли до поверхні є значне число таких, енергія яких є достатньою для емісії ($E_j \geq c$): моделювання підтверджує, що з енергетичної точки зору не існує перешкод для процесу екзоемісії електрона з кристалу CsI після електронного опромінення.

Висновки

Застосовуючи для кристалу CsI комп'ютерне моделювання процесів розсіяння на *LO*-фононах та прискорення в однорідному електричному полі, одержані енергетичні спектри екзоелектронів, що були народжені в Оже-подібних рекомбінаціях РД та досягли поверхні. Одержані спектри демонструють "розгін" народжених низькоенергетичних екзоелектронів в електричному полі приповерхневого шару кристалу CsI, яке утворюється при електронному опроміненні кристалу. Досягнутих електронами енергій при їх дрейфовому русі у приповерхневому шарі цілком достатньо для подолання поверхневого енергетичного бар'єра та емісії.

Галій П.В. – доктор фізико-математичних, доцент кафедри фізики напівпровідників;
Тузяк О.Я. – кандидат фізико-математичних наук, асистент кафедри фізики твердого тіла;
Поплавський О.П. – кандидат фізико-математичних наук, доцент кафедри теоретичної і експериментальної фізики;
Цветкова О.В. – науковий співробітник кафедри електроніки.

- [1] М.Е. Глобус, Б.В. Гринев. *Неорганические сцинтилляторы. Новые и традиционные материалы.* – Акта, Харьков. 408 с. (2001).
- [2] П.В. Галій, И.З. Гудь, Н.А. Цаль. Вторично-эмиссионная эффективность диэлектрических эмиттеров в диапазоне средних энергий возбуждающих электронов // *Украинский физический журнал*, **29**(2), сс. 265-271(1984).
- [3] P.V. Galiy. The radiation defect accumulation in scintillative crystals of caesium halides under intense electron beam irradiation // *Radiation Measurements*, **30**(1), pp. 41-50(1999).
- [4] A. Ausmees, M. Elango, A. Kikas, E. Nommiste, and A. Saar. Probing of electron-phonon scattering in ionic solids by XUV-induced electron emission spectroscopy // *Surface Science*, **269-270**, pp. 583-589(1992).
- [5] B.K. Singh, E. Shefer, A. Breskin, R. Chechik and N. Avraham. CsBr and CsI UV photocathodes: new results on quantum efficiency and aging // *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment*, **454**(2-3), pp. 364-378(2000).
- [6] J.R. Maldonado, Z. Liu, Y. Sun, P.A. Pianetta, F.W. Pease. Photoelectron emission studies in CsBr at 257 nm // *J. Vac. Sci. & Tech. B.*, **24**(6), pp. 2886-2891(2006).
- [7] T. Boutboul, A. Akkerman, A. Gibrekhterman, A. Breskin, R. Chechik. An improved model for ultraviolet- and X-ray induced electron emission from CsI // *J. Appl. Phys.*, **86**, pp. 5841-5949 (1999).
- [8] P. Galiy, O. Mel'nyk. Electronic relaxations of radiative defects of the anion sublattice in caesium bromide crystals and exoemission of electrons // *Radiation Effects & Defects in Solids*, **157**(6-12), pp. 683-689 (2002).
- [9] P.V. Galiy, O.Ya. Mel'nyk and O.V. Tsvetkova. Excitonic ionizations of the electron centres in caesium iodide crystal and exoemission of electrons // *Journal of Luminescence*, **112**(1-4), pp.105-108 (2005).
- [10] П.В. Галій, О.Я. Мельник. Електронні релаксації радіаційних дефектів аніонної підґратки кристалів броміду цезію та екзоемісія електронів // *Український фізичний журнал*, **47**(4), сс. 376-384 (2002).
- [11] A. Akkerman, T. Boutboul, A. Breskin, R. Chechik, A. Gibrekhterman. Low-energy electron transport in alkali halides // *J. Appl. Phys.*, **76**, pp. 4656-4662 (1994).
- [12] H.-J. Fitting, J.-U. Friemann. Monte-Carlo Studies of the Electron Mobility in SiO₂ // *Phys. Status Solidi A*, **69**(1), pp. 349-358 (1982).
- [13] J. Llacer, E.L. Garwin. Electron-phonon interaction in alkali halides. I. The transport of secondary electrons with energies between 0.25 and 7.5 eV // *J. Appl. Phys.*, **40**(7), pp. 2766-2775 (1969).
- [14] П.В. Галій, О.Я. Мельник. Енергетичний спектр та ймовірність виходу екзоелектронів у рекомбінаційній моделі екзоемісії // *Журнал фізичних досліджень*, **7**(1), сс. 84-92 (2003).
- [15] О.Я. Мельник, П.В. Галій. Транспорт до поверхні та вихід у вакуум низькоенергетичних екзоелектронів у CsBr // *Фізика і хімія твердого тіла*, **10**(1), сс.74-80 (2009).

- [16] S. Schweizer, U. Rogulisa, S. Assmanna, J.-M. Spaetha. RbBr and CsBr doped with Eu^{2+} as new competitive X-ray storage phosphors // *Radiation Measurements*, **33**(5), pp. 483-486 (2001).
- [17] H.-J. Fitting, J.-Ch. Kuhr, E. Schreiber, A. von Czarnowski. Attenuation and escape depths of low energy electron emission // *Proc. of the 13th Intern. Symp. on Exoemission and Rel. Relaxation Phenomena. Latvian Journal of Physics and Technical Sciences. Supplement*, **6**, pp. 30-34 (2000).

P.V. Galiy¹, O.Ya. Tuziak¹, O.P. Poplavskyy², O.V. Tsvetkova¹

Affect of the Space-Charged Zones on Relaxational Emission of Electrons from Irradiated Dielectric Surfaces

¹*Ivan Franko Lviv National University, 50 Drahomanov Str., Lviv, 79005*

²*Vasyl Stefanyk PreCarpathian National University, physicotchnical faculty, 57 Shevchenko Str., Ivano-Frankivs'k, 76000*
E-mail: galiy@electronics.wups.lviv.ua

On the basis of theoretically attained characteristics of the born exoelectrons energy spectra, for the wide-band-gap crystals were carried out the Monte-Carlo investigations of the space-charged zones and electron-phonon interactions affect on the transport processes and escape of the lowenergy exoelectrons. Computer modeling of the exoelectrons scatterings on *LO*-phonons at the presence of accelerating electric field was executed and energy spectrum for the transported electrons was attained. The spectrum characteristics confirm, that transported in the sub-surface layer exoelectrons are able to overcome surface energy barrier and to escape from the solid as exoelectrons.