

УДК 539.211

ДИНАМИЧЕСКОЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ КОЛЕБЛЮЩИХСЯ ХЕМОСОРБИРОВАННЫХ АТОМОВ НА ПОВЕРХНОСТИ ПОЛУПРОВОДНИКОВ

Браун О. М., Пашицкий Э. А.

При хемосорбции атомов на поверхности твердых тел (металлов, полупроводников, диэлектриков) происходит гибридизация электронных состояний (квантовых орбиталей), приводящая к перетеканию электронов с адатома в подложку или наоборот [1]. Степень такого перераспределения электронов и величина приобретаемого адатомом электрического заряда (дипольного момента) определяются положением виртуального электронного уровня адатома относительно уровня Ферми подложки и величиной интеграла перекрытия электронных волновых функций, который экспоненциально зависит от расстояния между адатомом и поверхностными атомами подложки.

В связи с этим при колебаниях адатома [2], как равновесных (тепловых), так и неравновесных, возбуждаемых внешними воздействиями, его заряд периодически меняется во времени, создавая переменный потенциал электрического поля и запаздывающие силы изображения. Переменные электрические поля возникают также при колебаниях относительно положения равновесия адатомов (ионов) с постоянным зарядом.

Очевидно, что эффекты запаздывания в формировании отклика электронной подсистемы подложки на переменный (колеблющийся) заряд будут наиболее существенными в том случае, когда частота колебаний ω_0 близка к одной из собственных частот коллективных возбуждений подложки, в частности к частоте поверхностных плазмонов $\omega_s = \omega_p / \sqrt{2}$, где $\omega_p = (4\pi e^2 n_0 / m^*)^{1/2}$ — частота объемных плазменных колебаний, а n_0 и m^* — концентрация и эффективная масса свободных носителей заряда в металле.

Однако на поверхности металла условие $\omega_0 \approx \omega_s$ для локальных колебаний адатомов практически никогда не выполняется, поскольку характерные частоты этих колебаний лежат в диапазоне $\omega_0 \approx (10^{13} - 10^{14}) \text{ с}^{-1}$, а частоты плазменных колебаний в металлах $\omega_p \approx 10^{15} - 10^{16} \text{ с}^{-1}$.

Гораздо легче реализовать условие резонанса ($\omega_0 = \omega_s$) на поверхности полупроводника¹, в котором с помощью легирования или оптической накачки нетрудно создать такую концентрацию свободных носителей (электронов проводимости, дырок), при которой $\omega_s = \omega_0$.

В настоящей работе показано, что эффективная потенциальная энергия динамического (запаздывающего) взаимодействия U_{dyn} между колеблющимися параллельно друг другу заряженными адатомами, усредненная по периоду колебаний, в случае адатомов с постоянным зарядом Q_0 убывает с расстоянием R вдоль поверхности по закону R^{-3} как для поперечных (перпендикулярных поверхности), так и для продольных (параллельных поверхности) колебаний. Причем в последнем случае U_{dyn} анизотропна в плоскости поверхности и меняет знак в зависимости от направления, как и в случае взаимодействия статических диполей.

¹ Для полупроводника с диэлектрической проницаемостью ϵ_0 частота поверхностных плазмонов равна $\omega_s = (4\pi e^2 n_0 / (\epsilon_0 + 1) m^*)^{1/2}$.

Для адатомов с переменным (осциллирующим) зарядом $Q(t) = Q_0 + Q_1 \sin(\omega_0 t)$ энергия взаимодействия U_{dyn} убывает с расстоянием как R^{-1} и в резонансе ($\omega_0 = \omega_*$) при достаточно слабом затухании поверхностных плазмонов может значительно превышать энергию статического диполь-дипольного отталкивания $U_{\text{stat}} \approx 2Q_0^2 x^2 R^{-3}$ (x — расстояние от адатома до поверхности). В зависимости от разности фаз колебаний взаимодействующих адатомов U_{dyn} может носить характер как отталкивания, так и притяжения, что должно существенно сказываться на структуре и степени упорядочения субмонослойных пленок на поверхности полупроводников. В частности, под действием оптической (лазерной) накачки при условии $\omega_* \approx \omega_0$ в пленках, адсорбированных на полупроводниковой подложке, могут наблюдаться фотостимулированные структурные фазовые переходы.

Запаздывающие силы изображения. Взаимодействие колеблющегося хемосорбированного атома с поверхностью твердого тела, строго говоря, должно рассматриваться квантовомеханически, на основе обобщенного гамильтониана Андерсона — Ньюнса [3] с зависящими от времени параметрами. Однако, поскольку в дальнейшем нас будет интересовать вопрос о взаимодействии между адатомами на больших расстояниях ($R \gg x$), для простоты мы ограничимся классическим рассмотрением запаздывающих сил изображения осциллирующих (колеблющихся) точечных зарядов вблизи поверхности полубесконечного кристалла в приближениях линейного отклика и зеркального отражения электронов кристалла от его поверхности [4].

Переменный во времени заряд $Q(t)$, движущийся с нерелятивистской скоростью $v_0(t) \ll c$ (c — скорость света) по классической траектории $\mathbf{r}_0(t) = \{x_0(t), \mathbf{R}_0(t)\}$, с плотностью

$$\rho_0(\mathbf{r}, t) = Q(t) \delta(x - x_0(t)) \delta(\mathbf{R} - \mathbf{R}_0(t)), \quad (1)$$

создает вблизи поверхности твердого тела, лежащей в плоскости $x=0$, потенциал электрического поля

$$\varphi(\mathbf{r}, t) = \int d\mathbf{r}' \int_0^{\infty} dt' D(\mathbf{r}, \mathbf{r}', t') \rho_0(\mathbf{r}', t-t'), \quad (2)$$

где D — запаздывающая функция Грина продольного кулоновского поля, фурье-компонента которой по времени t и продольной (параллельной поверхности) координате $\mathbf{R} = \{y, z\}$ удовлетворяет уравнению [5]

$$\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} - \mathbf{q}^2 \right) D(x, x'; \mathbf{q}, \omega) - 4\pi \int dx'' \Pi(x, x''; \mathbf{q}, \omega) D(x'', x'; \mathbf{q}, \omega) = -4\pi \delta(x - x'). \quad (3)$$

Здесь Π — фурье-компонента поляризационного оператора неоднородной (полуограниченной) системы, которая в рамках модели «желе» с резкой границей раздела сред в приближении зеркального отражения электронов от поверхности может быть представлена в следующем виде [4–6]:

$$\Pi_0(x, x'; \mathbf{q}, \omega) = \theta(x \cdot x') \{ \Pi_{\infty}(|x + x'|; \mathbf{q}, \omega) + \Pi_{\infty}(|x - x'|; \mathbf{q}, \omega) \}, \quad (4)$$

где Π_{∞} — поляризационный оператор бесконечной среды с продольной диэлектрической проницаемостью $\epsilon_l(\mathbf{k}, \omega)$:

$$\Pi_{\infty}(x; \mathbf{q}, \omega) = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dk_z}{2\pi} e^{ik_z x} \frac{(\mathbf{q}^2 + k_z^2)}{4\pi} [\epsilon_l(\mathbf{k}, \omega) - 1]. \quad (5)$$

Решение уравнения (3) в рамках «зеркального» приближения (4), которое с хорошей точностью описывает как спектр поверхностных плазмонов [5], так и проникновение электромагнитного поля в среду [7], в области $x, x' \geq 0$ (вакуум) с учетом условий непрерывности функции D и

ее первой производной по x в точке $x=0$ и за вычетом собственной кулоновской энергии точечного заряда имеет вид [5, 6, 8]

$$D(x, x'; \mathbf{q}, \omega) = -\frac{2\pi}{q} g_s(\mathbf{q}, \omega) \exp[-q(x+x')], \quad (6)$$

где

$$g_s(\mathbf{q}, \omega) = \frac{\epsilon_s(\mathbf{q}, \omega) - 1}{\epsilon_s(\mathbf{q}, \omega) + 1}; \quad \epsilon_s^{-1}(\mathbf{q}, \omega) = \frac{q}{\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dk_x}{(k_x^2 + \mathbf{q}^2) \epsilon_l(\mathbf{k}, \omega)}. \quad (7)$$

Функция отклика $g_s(\mathbf{q}, \omega)$ полуграниченной среды полностью описывает ее поверхностные свойства на границе с вакуумом ($\epsilon_l=1$), а ее полюса определяют спектр коллективных поверхностных возбуждений. В случае металла с конечной концентрацией свободных носителей n_0 в высокочастотном пределе, когда можно пренебречь эффектами пространственной дисперсии, поверхностная «диэлектрическая проницаемость» $\epsilon_s(\omega)$ совпадает с объемной $\epsilon_l(\omega) = 1 - \omega_p^2/\omega^2$, так что

$$g_s(\omega) = \omega_s^2 / [\omega_s^2 - (\omega + i\delta_s)^2]; \quad (\delta_s \rightarrow +0). \quad (8)$$

Для учета пространственной дисперсии и конечного затухания поверхностных плазмонов в работе [9] предложено так называемое «одномодовое» приближение:

$$g_s(q, \omega) = \frac{\omega_p^2/2}{\omega_s^2(q) - [\omega + i\delta_s(q)]^2}, \quad (9)$$

где

$$\omega_s^2(q) = \omega_p^2/2 + \alpha q + \beta q^2 + \gamma q^4, \quad (10)$$

а декремент затухания δ_s в приближении Друде связан с проводимостью σ соотношением $\delta_s = \omega_p^2/(4\pi\sigma)$. Функция (9) имеет простые полюса в точках $\omega = \pm \omega_s(q) - i\delta_s(q)$, вычеты в которых равны $\mp \omega_p^2/[4\omega_s(q)]$.

Подставляя формулы (1) и (6) в соотношение (2), получаем выражение для потенциала собственного и индуцированного полей движущегося (осциллирующего) заряда вблизи поверхности кристалла:

$$\varphi(\mathbf{r}, t) = \frac{Q(t)}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}_0(t)|} - \int \frac{d^2q}{2\pi q} e^{i\mathbf{q}\mathbf{R}} \Psi(\mathbf{q}, t) \exp[-q(x+x_m)], \quad (11)$$

где

$$\Psi(\mathbf{q}, t) = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\omega}{2\pi} e^{-i\omega t} g_s(\mathbf{q}, \omega) T(\mathbf{q}, \omega); \quad (12)$$

$$T(\mathbf{q}, \omega) = \int_{-\infty}^{+\infty} dt Q(t) \exp\{i\omega t - i\mathbf{q}\mathbf{R}_0(t) - q[x_0(t) - x_m] - \delta|t|\}; \quad (13)$$

$x_m = \min x_0(t)$ — минимальное (или среднее) расстояние от заряда до поверхности, $\delta \rightarrow +0$. Величина Ψ имеет регулярную и осциллирующую составляющие, первая из которых представляет собой главное значение интеграла (12) и определяет запаздывающие силы изображения, обусловленные взаимодействием заряда с виртуальными поверхностными плазмонами, а вторая определяется полюсами функции отклика $g_s(\mathbf{q}, \omega)$ и связана с возбуждением реальных плазмонов.

Энергия, теряемая движущимся (переменным) зарядом в единицу времени на возбуждение поверхностных плазмонов, согласно выражению (2), равна

$$w(t) = \left\langle \frac{\partial H_{\text{int}}}{\partial t} \right\rangle = \int d\mathbf{r} \dot{\rho}_0(\mathbf{r}, t) \varphi(\mathbf{r}, t) =$$

$$= \int d\mathbf{r} \int d\mathbf{r}' \int_0^{\infty} dt' \dot{\rho}_0(\mathbf{r}, t) D(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; t') \rho_0(\mathbf{r}', t-t'). \quad (14)$$

С учетом выражений (1), (6) и (12) получаем

$$w(t) = \int \frac{d^2 q}{2\pi q} w(\mathbf{q}, t) \exp(-2q x_m), \quad (15)$$

где

$$w(\mathbf{q}, t) = \operatorname{Re} \left\{ i \Psi(\mathbf{q}, t) \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\omega}{2\pi} e^{-i\omega t} \omega T(\mathbf{q}, \omega) \right\}. \quad (16)$$

С помощью описанного формализма рассмотрим запаздывающее взаимодействие колеблющихся (осциллирующих) зарядов вблизи поверхности твердого тела.

Энергия динамического взаимодействия колеблющихся адатомов на поверхности полупроводника. Рассмотрим поперечные колебания адатома (иона) с постоянным зарядом Q_0 , движущегося по траектории

$$x_0(t) = x_m + a \sin(\omega_0 t); \quad R_0(t) = 0. \quad (17)$$

С помощью известного разложения

$$\exp(-qa \sin \omega_0 t) = \sum_{n=-\infty}^{+\infty} (-i)^n I_n(qa) \exp(-in\omega_0 t), \quad (18)$$

где I_n — функция Бесселя первого рода от мнимого аргумента, интеграл (13) приводится к виду

$$T(\mathbf{q}, \omega) = 2\pi \sum_{n=-\infty}^{+\infty} (-i)^n I_n(qa) \delta(\omega - n\omega_0), \quad (19)$$

а функция $\Psi(\mathbf{q}, t)$, согласно формуле (12), равна

$$\Psi(\mathbf{q}, t) = I_0(qa) + 2 \sum_{n=1}^{\infty} I_n(qa) N_n(n\omega_0) \cos \left[n\omega_0 t + n \frac{\pi}{2} - \theta_n(n\omega_0) \right], \quad (20)$$

где

$$N_n(\omega) = \omega_s^2 [(\omega^2 - \omega_s^2)^2 + (2\delta_s \omega)^2]^{-1/2}; \quad \theta_n(\omega) = \arctg[2\delta_s \omega / (\omega^2 - \omega_s^2)]. \quad (21)$$

Из формул (20) и (11) следует, что потенциал, создаваемый колеблющимся зарядом Q_0 в произвольной точке $\mathbf{r} = \{x, R\}$, может быть представлен в виде

$$\varphi(x, R, t) = \varphi_0(x, R) + \phi(x, R, t), \quad (22)$$

где

$$\varphi_0(x, R) = Q_0 [R^2 + (x - x_m)^2]^{-1/2} - Q_0 \int_0^{\infty} dq J_0(qR) I_0(qa) \exp[-q(x + x_m)];$$

$$\phi(x, R, t) = Q_0 [R^2 + (x - x_m - a \sin \omega_0 t)^2]^{-1/2} - Q_0 [R^2 + (x - x_m)^2]^{-1/2} - \quad (23)$$

$$- 2Q_0 \sum_{n=1}^{\infty} N_n(n\omega_0) \cos \left[n\omega_0 t + n \frac{\pi}{2} - \theta_n(n\omega_0) \right] \times$$

$$\times \int_0^{\infty} dq J_0(qR) I_n(qa) \exp[-q(x + x_m)], \quad (24)$$

J_0 — функция Бесселя первого рода от вещественного аргумента, $R = (y^2 + z^2)^{1/2}$.

При условии $a \ll (x + x_m) \ll R$ для статической ϕ_0 и осциллирующей ϕ частей потенциала ϕ , согласно формулам (23) и (24), получаем следующие асимптотические выражения:

$$\phi_0(x, R) \approx 2xx_m Q_0 / R^3; \quad (25)$$

$$\phi(x, R, t) \approx \frac{aQ_0}{R^3} \{ (x - x_m) \sin(\omega_0 t) + (x + x_m) N_s(\omega_0) \sin[\omega_0 t - \theta_s(\omega_0)] \}. \quad (26)$$

Если на расстоянии R от данного заряда находится другой заряд Q_0 , совершающий поперечные колебания с той же частотой ω_0 по траектории

$$x_1(t) = x_m + b \sin(\omega_0 t + \alpha), \quad (27)$$

где α — относительная разность фаз колебаний, то эффективная потенциальная энергия динамического (запаздывающего) взаимодействия двух зарядов, усредненная по периоду колебаний $T_0 = 2\pi/\omega_0$, с учетом формулы (26) будет равна

$$U_{\text{dyn}}^{(\perp)} = \frac{Q_0}{T_0} \int_0^{T_0} dt \phi(x_1(t), R, t) \approx \frac{ab}{2R^3} Q_0^2 \{ \cos \alpha + N_s(\omega_0) \cos[\theta_s(\omega_0) + \alpha] \}. \quad (28)$$

В условиях резонанса $\omega_0 = \omega_s$, когда $N_s = \omega_s / 2\delta_s \gg 1$, энергия $U_{\text{dyn}}^{(\perp)}$ может по абсолютной величине значительно превышать энергию статического диполь-дипольного отталкивания

$$U_{\text{stat}} \approx 2Q_0^2 x_m^2 / R^3, \quad (29)$$

если $\delta_s / \omega_s \ll ab / 8x_m^2$, причем в зависимости от сдвига фаз колебаний α динамическое взаимодействие может носить характер как отталкивания ($U_{\text{dyn}} > 0$), так и притяжения ($U_{\text{dyn}} < 0$), что должно проявляться в структурной неустойчивости адсорбированных пленок.

Рассмотрим продольные колебания адатомов в направлении ² оси OY , когда его траектория определяется соотношениями

$$x_0(t) = x_m; \quad y_0(t) = a \sin(\omega_0 t); \quad z_0(t) = 0. \quad (30)$$

Этот случай сводится к предыдущему, если в формулах (18) — (20) заменить q на iq , и $I_n(qa)$ на $i^n J_n(q, a)$. При этом переменный потенциал, создаваемый колеблющимся зарядом, равен (ср. с (24))

$$\begin{aligned} \phi(x, y, z, t) = & -Q_0 [(x - x_m)^2 + y^2 + z^2]^{-1/2} + Q_0 [(x - x_m)^2 + (y - a \sin \omega_0 t)^2 + z^2]^{-1/2} - \\ & - 2Q_0 \sum_{n=1}^{\infty} N_s(n\omega_0) \cos \left[n\omega_0 t + n \frac{\pi}{2} - \theta_s(n\omega_0) \right] \times \\ & \times \operatorname{Re} \left\{ \frac{i^n}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} dq_v J_n(q_v a) \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dq_z}{q} \exp[iq_v y + iq_z z - q(x + x_m)] \right\}, \end{aligned} \quad (31)$$

откуда при условии $a \ll (x + x_m) \ll R$ получаем

$$\tilde{\phi}(R, y, t) \approx Q_0 \frac{ay}{R^3} \{ \sin(\omega_0 t) - N_s(\omega_0) \sin[\omega_0 t - \theta_s(\omega_0)] \}. \quad (32)$$

Как видно, вдоль оси OY , параллельно которой происходят колебания

² Преимущественное направление колебаний адатомов может быть навязано анизотропным потенциальным рельефом подложки.

заряда ($R=y, z=0$), запаздывающий переменный потенциал убывает по закону R^{-2} , а во всех остальных направлениях (кроме оси OZ , на которой $y=0$ и $\phi=0$) — по закону R^{-3} .

С той же точностью вычислим усредненную по T_0 энергию запаздывающего взаимодействия данного заряда с колеблющимся вдоль оси OY по траектории

$$x_1(t)=x_m; y_1(t)=y+b \sin(\omega_0 t+\alpha); z_1(t)=z \quad (33)$$

зарядом Q_0 , находящимся на расстоянии $R=(y^2+z^2)^{1/2}$ от данного. Подставляя формулу (33) в соотношение (31) и полагая $q_v a, q_v b \ll 1$, что справедливо при $a, b \ll R$, в условиях резонанса $\omega_s = \omega_0$, когда $N_s(\omega_s) = \omega_s / 2\delta_s$, и $\theta_s(\omega_s) = \pi/2$, получим

$$U_{\text{dyn}}^{(II)} = \frac{Q_0}{T_0} \int_0^{T_0} dt \phi(x_m, y_1(t), z, t) \approx Q_0^2 \frac{ab\omega_s}{2\pi\delta_s} f(x_m, y, z) \sin \alpha, \quad (34)$$

где

$$f(x_m, y, z) = \int_0^\infty dq_v q_v^2 \cos(q_v y) \int_0^\infty \frac{dq_z}{(q_z^2 + q_v^2)^{1/2}} \cos(q_z z) \exp[-2x_m(q_z^2 + q_v^2)^{1/2}]. \quad (35)$$

На больших расстояниях ($R \gg 2x_m$) получаем

$$U_{\text{dyn}}^{(II)} \approx Q_0^2 \frac{ab\omega_s}{4\delta_s R^3} (1 - 3 \cos^2 \theta) \sin \alpha, \quad (36)$$

где θ — угол между направлением вектора R и осью OY . Таким образом, в плоскости поверхности между заряженными атомами (ионами), совершающими продольные колебания вдоль оси OY , возникает эффективное анизотропное диполь-дипольное взаимодействие, знак которого зависит от направления и разности фаз колебаний α . Это взаимодействие, убывающее как R^{-3} , также может превышать U_{stat} при $\omega_s \approx \omega_0$ и $\delta_s \ll \omega_s$, что должно приводить к ориентационным фазовым переходам или к переходу порядок — беспорядок в субмонослойных пленках адатомов.

Отметим, что энергия динамического взаимодействия зарядов, колеблющихся во взаимно перпендикулярных направлениях, в силу симметрии задачи равна нулю.

Вычислим энергию, теряемую в единицу времени колеблющимся единичным зарядом на возбуждение поверхностных плазмонов. Для поперечных колебаний, согласно формулам (20), (15) и (16), получаем ($a \ll x_m$)

$$w^{(\perp)} = Q_0^2 2\omega_0 \sum_{n=1}^\infty n f(n\omega_0) \int_0^\infty dq J_n^2(qa) \exp(-2qx_m) \approx Q_0^2 \frac{\omega_0 a^2}{8x_m^3} f(\omega_0), \quad (37)$$

где

$$f(\omega) = \text{Im } g_s(\omega) = \frac{2\delta_s \omega \omega_s^2}{(\omega^2 - \omega_s^2)^2 + (2\delta_s \omega)^2}. \quad (38)$$

В случае продольных колебаний получаем соответственно

$$w^{(II)} = Q_0^2 \frac{4\omega_0}{\pi} \sum_{n=1}^\infty n f(n\omega_0) \int_0^\infty dq_v J_n^2(q_v a) K_0(2q_v x_m) \approx \frac{1}{2} w^{(\perp)}, \quad (39)$$

где K_0 — функция Макдональда. Из формул (37) и (39) можно определить время жизни τ_{pl} колебательных возбуждений адатома, обусловленных их распадом на поверхностные плазмоны подложки:

$$\tau_{pl}^{-1} = \eta = w/E_0; E_0 = M\omega_0^2 a^2, \quad (40)$$

где η — коэффициент «плазмонного» трения; M — масса адатома. С учетом соотношения $\delta_s \approx \omega_s^2 / (2\pi\sigma)$ при условии $\omega_0 = \omega_s$ находим

$$\eta^{(\perp)} \approx 2\eta^{(\parallel)} \approx Q_0^2 \pi \sigma / (8M\omega_s^2 x_m^3). \quad (41)$$

Вдали от резонанса ($\omega_0 \ll \omega_s$), приравнявая E_0 кванту энергии локальных колебаний $\hbar\omega_0$, из выражений (37)–(40), получаем результат, полученный ранее в работе [10].

В заключение рассмотрим находящийся на расстоянии $x = x_m$ от поверхности неподвижный адатом с периодически меняющейся во времени по синусоидальному закону величиной заряда

$$Q(t) = Q_0 + Q_1 \sin(\omega_0 t). \quad (42)$$

Как уже отмечалось, по такому закону может изменяться эффективный заряд хемосорбированного атома, колеблющегося перпендикулярно поверхности, благодаря изменению степени перекрытия волновых функций адатома и атомов подложки. В этом случае, согласно формулам (12) и (13), имеем

$$\begin{aligned} T(\omega) &= 2\pi Q_0 \delta(\omega) + i\pi Q_1 [\delta(\omega - \omega_0) - \delta(\omega + \omega_0)]; \\ \Psi(q, t) &= Q_0 + \frac{i}{2} Q_1 [e^{-i\omega_0 t} g_+(q, \omega_0) - e^{i\omega_0 t} g_-(q, \omega_0)]. \end{aligned} \quad (43)$$

Пренебрегая дисперсией поверхностных плазмонов, находим отсюда с учетом формулы (11) переменную часть потенциала ϕ в произвольной точке $r = \{x, R\}$ вне кристалла:

$$\phi(x, R, t) = Q_1 \left\{ \frac{\sin(\omega_0 t)}{(R^2 + (x - x_m)^2)^{1/2}} - N_s(\omega_0) \frac{\sin[\omega_0 t - \theta_s(\omega_0)]}{(R^2 + (x + x_m)^2)^{1/2}} \right\}. \quad (44)$$

В резонансе $\omega_0 = \omega_s$ на больших расстояниях $R \gg (x + x_m)$ из формулы (42) получаем

$$\phi(R, t) \approx Q_1 \frac{\omega_s \cos(\omega_s t)}{2\delta_s R}. \quad (45)$$

Усредненная по периоду осцилляций энергия запаздывающего взаимодействия двух переменных зарядов в этом случае равна

$$U_{\text{dyn}} = \frac{1}{T_0} \int_0^{T_0} dt Q(t) \phi(R, t) \approx Q_1^2 \frac{\omega_s}{2\delta_s} \frac{\sin \alpha}{2R}. \quad (46)$$

Как видно, в отличие от статического взаимодействия зарядов (формула (29)) вблизи поверхности металла или полупроводника, которое убывает с расстоянием как R^{-3} , а также от рассмотренного выше динамического взаимодействия колеблющихся постоянных зарядов Q_0 , спадающего по тому же закону R^{-3} , в случае осциллирующих зарядов (формула (42)) эффекты запаздывания в формировании отклика подложки приводят к неполной экранировке кулоновского взаимодействия, в результате чего эффективное взаимодействие U_{dyn} убывает как R^{-1} . В зависимости от разности фаз α оно может носить характер либо отталкивания, либо притяжения и при слабом затухании плазмонов ($\delta_s \ll \omega_s$) на достаточно больших расстояниях R может значительно превышать диполь-дипольное отталкивание (формула (29)) даже при $Q_1 \ll Q_0$.

Энергия, теряемая осциллирующим зарядом (формула (42)) на возбуждение реальных поверхностных плазмонов за период колебаний, равна

$$\bar{w} = \frac{1}{T_0} \int_0^{T_0} dt w(t) = \frac{Q_1^2}{2x_m} \frac{\delta_s \omega_0^2 \omega_s^2}{(\omega_s^2 - \omega_0^2)^2 + (2\delta_s \omega_0)^2} \quad (47)$$

и достигает максимума в точке резонанса ($\omega_0 = \omega_s$):

$$\bar{w}_{\max} = \frac{Q_1^2}{4x_m} \frac{\omega_s^2}{2\delta_s}. \quad (48)$$

Выводы. В условиях резонанса между частотой ω_0 поперечных или продольных колебаний адатомов на поверхности твердого тела и частотой поверхностных плазменных колебаний ω_s возникает сильное взаимодействие между заряженными адатомами через плазменную подсистему подложки, которое в результате эффектов запаздывания (динамической «переэкранировки») может менять знак и в зависимости от разности фаз колебаний (осцилляций) взаимодействующих зарядов носит характер либо отталкивания, либо притяжения. Такое эффективное динамическое взаимодействие, убывающее с увеличением расстояния R между адатомами по степенному закону (как R^{-3} для колеблющихся зарядов и как R^{-1} для осциллирующих по величине зарядов), должно оказывать существенное влияние на структуру и степень упорядочения субмонослойных пленок на поверхности полупроводников, для которых условие $\omega_s \approx \omega_0$ может быть легко достигнуто как легированием, так и оптической накачкой неравновесных свободных носителей. В последнем случае, изменяя интенсивность лазерной накачки и плотность электронно-дырочной плазмы, а вместе с ней и частоту плазменных колебаний ω_p , можно добиться точного резонанса $\omega_s = \omega_0$, который должен сопровождаться либо перестройкой структуры, либо полным разупорядочением (двумерным плавлением) адсорбированной пленки. (Для полупроводника с диэлектрической проницаемостью $\epsilon_0 \approx 10$ и с $m^* \approx 0,2m_e$ при $\omega_0 \sim 10^{13} \text{ с}^{-1}$ условие $\omega_s = \omega_0$ выполняется при концентрации свободных носителей $n_0 \sim 10^{17} \text{ см}^{-3}$.) Иными словами, в субмонослойных пленках электроположительных или электроотрицательных элементов, адсорбированных на поверхность полупроводниковых кристаллов, в условиях лазерной накачки могут наблюдаться фотостимулированные фазовые переходы.

Если при этом фазы колебаний адатомов являются случайными (хаотическими), как это имеет место при тепловом возбуждении колебаний, то в случае резонанса поверхностных плазмонов с поперечными колебаниями адатомов при динамическом взаимодействии (формулы (28) или (46)) пленка должна становиться полностью неупорядоченной (аморфной), тогда как при резонансе с продольными колебаниями благодаря анизотропному взаимодействию (формула (36)) в пленке может образоваться двумерная структура типа «дипольного стекла».

При условии когерентности колебаний адатомов в некоторой макроскопической области (например, в результате облучения пленки когерентным ИК светом с длиной волны $\lambda \approx 1 \text{ мкм}$), когда $\alpha = 0$, динамическое взаимодействие между адатомами обращается в нуль, и структура пленки определяется статическим экранированным взаимодействием (формула (29)), а также непрямым взаимодействием через электронную подсистему подложки. Однако в случае локальной когерентности колебаний (например, при возбуждении их когерентным электронным пучком с длиной волны λ , соизмеримой с периодом структуры субмонослойной пленки), когда между колебаниями соседних адатомов устанавливается постоянный сдвиг фаз $\alpha \neq 0$, при оптической накачке полупроводниковой подложки в резонансе $\omega_s = \omega_0$ могут происходить структурные фазовые переходы.

ЛИТЕРАТУРА

1. *Большов Л. А., Напарович А. П., Наумовец А. Г., Федорус А. Г.* Успехи физ. наук, 1977, т. 122, № 1, с. 125.
2. *Браун О. М., Пашицкий Э. А.* Физика твердого тела, 1982, т. 24, № 7, с. 1973; Поверхность, 1984, № 6, с. 5; № 7, с. 49.

3. *Anderson P. W.* Phys. Rev., 1961, v. 124, № 1, p. 41; *Newns D. M.* Phys. Rev., 1969, v. 178, № 3, p. 1123.
4. *Wagner D. Z.* Naturforsch., 1966, v. 21a, № 5, p. 634.
5. *Романов Ю. А.* Физика твердого тела, 1963, т. 5, № 10, с. 2988; Журн. эксперим. и теорет. физики, 1964, т. 47, № 6, с. 2119.
6. *Сидякин А. В.* Журн. эксперим. и теорет. физики, 1970, т. 58, № 2, с. 573.
7. *Шафранов В. Д.* Журн. эксперим. и теорет. физики, 1958, т. 34, № 6, с. 1475; *Балкарей Ю. И., Сандомирский В. Б.* Журн. эксперим. и теорет. физики, 1968, т. 54, № 3, с. 808.
8. *Габович А. М., Ильченко Л. Г., Пашицкий Э. А., Романов Ю. А.* Журн. эксперим. и теорет. физики, 1978, т. 75, № 1, с. 249.
9. *Echenique P. M., Ritchie R. H., Barberan N., Inkson J.* Phys. Rev., 1981, v. B23, № 12, p. 6486.
10. *Rhee B. K., Schatch W. L.* J. Chem. Phys., 1982, v. 77, № 9, p. 4714.

Институт физики АН УССР, Киев

Принята в печать
29.VII.1985

DYNAMICAL INTERACTION OF OSCILLATING CHEMISORBED ATOMS ON THE SEMICONDUCTOR SURFACE

Braun O. M., Rashitsky E. A.

It is shown that the effective potential energy of the dynamical (retarded) interaction U_{dyn} of oscillating chemisorbed atoms with an electric charge (dipole moment) on the semiconductor surface with high concentration of non-equilibrium electron-hole plasma, produced by optical pumping, can considerably exceed, under the condition of resonance between the frequency of local oscillations of adatoms and that of the substrate surface plasmons, the energy of static dipole-dipole repulsion and, depending on the oscillation-phase difference, may have repulsive or attractive character. This may result in the occurrence of photostimulated phase transition in submonolayer films.