

(续前)

$$\lim_{T \rightarrow \infty} f_i(E_i, q, T) = f(E_i, q),$$

$$\lim_{T \rightarrow \infty} \frac{df(E, q, T)}{dE} = \frac{df(E, q)}{dE}.$$

仅由原子分子体系本身的物理量决定。1935年, Bethe

证明广义振子强度与光学振子强度之间有如下关系:

$$f(E_i, q) = f^0(E_i) + Aq^2 + Bq^4 + \dots,$$

$$df(E, q)/dE = df^0(E)/dE + 2Aq + 4Bq^3 + \dots$$

当 $q \rightarrow 0$ 即高入射电子能量 ($T \gg E$) 和 0° 散射角情况下, 不管玻恩近似是否成立, 都有:

$$\lim_{T \rightarrow \infty} f(E_i, q) = f^0(E_i) = E_i q^2 \frac{p_0}{p_a} \frac{d\sigma}{d\Omega},$$

$$\lim_{T \rightarrow \infty} \frac{df(E, q)}{dE} = \frac{df^0(E)}{dE} = \frac{E q^2 p_0}{2 p_a} \frac{d^2\sigma}{dE d\Omega}.$$

方程右边各物理量实验上都能测量。于是用快电子碰撞测量 0° 散射微分截面, 即通过能量损失谱测量可得光学振子强度。

有两种方法可以得到绝对光学振子强度。在第一种间接方法中, 0° 散射电子在实验上不能与入射电子分开, 因而测不到, 通过测量小角范围内相对强度的角分布而得到相对广义振子强度, 再外推到 $q^2 = 0$, 从而得到相对光学振子强度, 然后再利用散射谱中已知的弹性散射峰或其它已知原子能级的截面值, 比较两个能谱, 可得到所要求能级的散射截面, 并计算出光学振子强度。快电子碰撞方法也提供了另一种不需要测量或知道电子束强度和靶密度就能确定绝对光学振子强度的直接方法。在这种方法中, 使用好的电子分析器和电子光学系统, 可以测量到平均散射角为 0° 的散射电子。在高碰撞能量下, $q^2 \rightarrow 0$ 条件在很高精度下满足。因此从测量的能量损失谱可以得到相对微分截面谱, 再转变为相对光学振子强度, 这时只要对造成

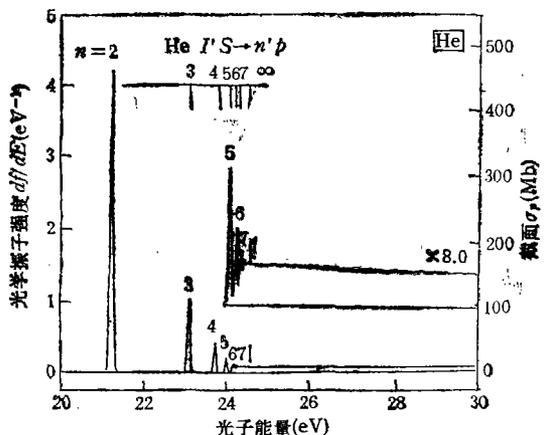


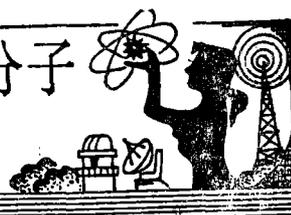
图4 He 的绝对光学振子强度

◆ 学部委员钱临照教授主持

物理前沿

快电子与原子分子碰撞实验

徐克尊



q^2 展宽而不为 0 的电子分析器的有限立体角作修正就行。由于快电子通过原子时, 相当于有一个时间很短的电磁场脉冲作用到原子上。由傅立叶分析, 时间上的快脉冲对应于一个平坦的频率分布电讯号, 因而快电子与原子分子作用相当于一个有各种能量的虚光子场作用到原子分子上, 这个虚光子场的能谱是连续的平坦分布。由此可见, 这种方法得到的相对光学振子强度谱本身就具有正确的相对强度分布而无需知道入射电子束通量, 但在光学方法中必须对不同波长的入射光束通量进行测量并校正, 这种测量既要能在很宽的波长范围内进行, 又要有高的精度是很困难的。

有两种方法可以将所得的相对光学振子强度变成绝对的。一种方法是用理论或实验上已知的光吸收截面值来相对的确, 另一种方法利用振子强度求和规则。最常用的是 TRK 求和规则: 一个原子或分子所有分裂跃迁的二极振子强度之和加上所有连续态的积分应等于电子数 N 。

$$\sum_i f(q, E_i) + \int dE \frac{df(q, E)}{dE} = N.$$

因此只要将得到的相对微分截面谱外推到 $E \rightarrow \infty$, 然后让谱的总面积归一等于电子总数 N , 就可得到精确的绝对光学振子强度。这一方法无需测量束通量和靶密度。实验上用高分率或中分率能量损失谱仪测量都可以。这是因为光吸收过程存在很窄的共振线, 由于测量使线宽增加和其它一些原因在 Lambert-Beer 定律的应用中带来了直线饱和效应, 使测到的截面共振峰的峰值和面积均减小, 从而在分裂光学振子强度谱测量中造成很大的误差。而电子碰撞激发是非共振的, 不存在这种误差, 低分辨率把谱变模糊, 但不影响面积和结果。

那些有快电子能量损失谱仪的实验室都在测量光学振子强度。其中加拿大和日本各有一台能直接在 0° 散射角测光学振子强度, 其它的能量损失谱仪不能测到 0° 散射角, 而是靠外推方法得到光学振子强度。图4为最近 Brion 用能量损失谱仪和振子强度求和规则第一次直接得到的 He 的 20—30eV 范围的绝对光学振子强度。我们这台能量损失谱仪也能在 0° 散射角测光学振子强度, 由于我们的谱仪能量最高, 它在 0° 能使 $q^2 \rightarrow 0$ 的条件满足得更好, 而且能测量原子内壳层和原子序数更大的原子。

三、(e, 2e) 反应

电子与原子作用可使原子激发或电离，处于激发态的原子可通过放出光子回到基态或低激发态，也可通过自电离过程放出电子，原子被电离后形成电子和正离子，内壳层缺少电子的离子还可能放出俄歇电子和 X 射线。如果在测量散射电子的同时也测量放出的自电离电子或电离电子或俄歇电子，这就是 (e, 2e) 实验。这儿着重讨论的是电子碰撞电离过程，它类似光电离过程： $h\nu + A \rightarrow e + A^+$ 。在电子碰撞电离中， $e + A \rightarrow e_a + e_b + A^+$ 。如果测量的是两个出射电子的符合，这就是 (e, 2e) 反应，它可模拟研究光电离过程，起到可调能量光电子谱仪的作用。

(e, 2e) 反应运动学如图 5, p_0 , p_a 和 p_b 是入射电子、散射电子和排出电子的动量 (设 $p_a \geq p_b$)， E_0 , E_a 和 E_b 分别是它们的能量。给快散射电子 e_a 的动量转移 K 和电离离子的反冲动量分别为： $K = p_0 - p_a$, $P = p_0 - p_a - p_b$ 。由原子初态到离子末态 f 分离能或排出电子的束缚能 E_f 为： $E_f = E_0 - E_a - E_b$ 。这儿假设靶粒子最初是静止的，忽略了碰撞前原子很小的热运动能量和动量，并且也忽略了很小的离子反冲动能。

根据实验条件不同，(e, 2e) 实验可以得到三种信息。仅测量三个电子能量则可以得到电离能谱，从而获得分离能信息。如果除测量能量之外，还测量符合计数率随 θ 角变化，则可得到相对的电离微分截面。实际上，改变 θ 角 (或 φ 角) 也就是改变反冲离子的动量，在正确条件下还能得到靶中粒子轨道的动量分布以及它随电离能的变化，即得到电子动量谱的信息。

1. 电离能谱和微分截面

在一定的 θ 角和 φ 角下，测量入射电子和两个出射电子的能量，当改变其中一个电子的能量，而固定其它两个，测量两个出射电子的符合计数率随此能量的变化关系即可得到电离能谱。常常改变入射电子能量 E_0 ，固定两个出射电子的能量 E_a 和 E_b ，来得到电离能谱。

从电离能谱不仅可以得到原子的束缚能信息，而且可以进行自电离效应和俄歇效应的细致研究，当使用较高分辨率的电子能谱仪时，还可以得到由于原子中电子的强关联而产生的在电离阈值附近的精细伴线结构，这类似于光吸收中的 EXAFS 实验。

在一般情况下，测量符合计数率随两个出射电子

θ 角的变化关系即得到微分电离截面：

$$\frac{d\sigma}{dp_a dp_b dE} = (2\pi)^2 \frac{p_a p_b}{p_0} \sum_{M_i, M_f} |T_f(p_a, p_b, p_0)|^2$$

其中 \sum_{M_i, M_f} 表示对末态电子简并求和，对初态电子简并求平均。 $T_f(p_a, p_b, p_0)$ 是靶从电子基态导至离子终态 f 的 (e, 2e) 反应振幅。在平面波冲量近似下，微分电离截面可以用自旋平均的半壳外莫特散射截面组成的电子-电子碰撞因子 f_{ee} 和结构因子 $G_f(\mathbf{p})$ 表示：

$$\frac{d\sigma}{dp_a dp_b dE} = (2\pi)^2 \frac{p_a p_b}{p_0} f_{ee} G_f(\mathbf{p})$$

因此通过微分电离截面测量可以研究碰撞动力学和提供任何涉及电离截面的理论的检验。

除此之外，如果选择合适的 θ 角，也可模拟光电离实验而得到光电离截面。为了得到这个条件，首先要弄清楚光电子发射角分布。在线偏振光入射情况下，向 θ 角方向发射的光电子微分截面为：

$$\begin{aligned} \frac{d\sigma_i}{d\Omega} &= \frac{\sigma_i}{4\pi} (1 + \beta p_i (\cos \theta)) \\ &= \frac{\sigma_i}{4\pi} \left[1 + \frac{3}{4} \beta \left(2\cos^2 \theta - \frac{2}{3} \right) \right] \end{aligned}$$

其中 σ_i 为全截面， β 为非对称参量，与光子能量和电离通道有关，在 -1 到 2 之间。

在光电子发射方向与入射方向之间存在这样一个角

$$\theta_m = 54.7^\circ,$$

使 $\cos^2 \theta_m = 1/3$ ，称为魔角。在线偏振光的 $\theta = \theta_m$ 或一般垂直极化的偏振光的 $\theta_a = \theta_m$ 情况下，只要使电子探测器放在与光子入射方向成 54.7° 方向探测，均可使测得的 $d\sigma_i/d\Omega = \sigma_i/4\pi$ ，与 β 无关，也就是与入射光子能量、电离通道情况以及极化偏振情况无关，从而很容易得到光电离总截面。

在 (e, 2e) 实验中，快电子入射产生的虚光子场是极化的，如在 0° 角方向放置一个电子探测器，在 $\theta = 54.7^\circ$ 角方向放置另

一个探测器 (即放在魔角)，它们的符合测量可给出相对光电离总截面，经刻度可得绝对光电离截面，也可得到各种光电离过程的相对部分偶极振子强度。

2. 电子动量谱

(e, 2e) 实验也可以给出原子分子的电子动量谱信息。在一般的运动学条件下，(e, 2e) 反应涉及三个电子的能量和动量，还有靶原子和离子，可以得到的只是

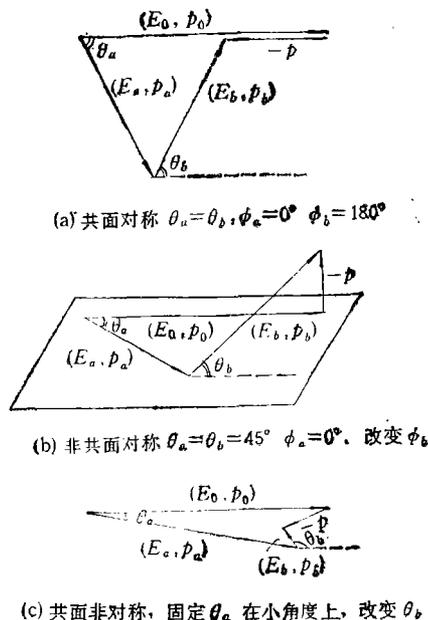


图 5 (e, 2e) 实验的三种几何安排

离子反冲动量,很难清楚地得到原子中单个电子的动量。但是在特殊的运动学条件下,可以得到电子的动量分布。这里关键是需要快电子入射,且动量转移 K 也较大。这时涉及的三个电子能量均很高,电子被核库仑势的束缚较弱,碰撞可看作是二自由电子间的强碰撞,束缚电子突然从靶中被击出,离子所获得反冲动量 p 与电子在原子中动量大小相等,方向相反。因此,原子中电子在碰撞前的动量 q 为: $q = -p$ 。这种近似条件就是冲量近似。因此通过对反冲离子动量的测量也就实现了原子中电子动量的测量。

在测量动量的同时,也确定了电子分离能。如果在一组动量测量中保持分离能不变,作符合计数率与反冲动量的变化关系曲线称为对应这一分离能的动量分布,相应于有这分离能的靶粒子(由初态原子分子到终态离子)的动量分布,也即动量空间轨道的绝对值平方。因此由相对电离微分截面就可以直接得到能壳分辨的靶粒子的电子波函数信息。

($e, 2e$)实验主要有三种几何安排:共面对称、不共面对称和共面不对称。目前绝大多数用的运动学条件是对称几何条件。这时 $E_a = E_b$, $\theta_a = \theta_b = \theta$, 因而反冲动量 $p = [(2p_0 \cos \theta - p_0)^2 + (2p_0 \sin \theta \sin(\varphi/2))^2]^{1/2}$ 。由于电子在原子中动量远小于入射电子动量 p_0 , 当 $\theta = 45^\circ$, $\varphi = 0^\circ$ 时, $p = 0$, 通常在这条件附近改变 θ (共面)或 φ 角(不共面)以便进行动量测量。不共面对称条件是 $E_a = E_b$, $\theta_a = \theta_b = 45^\circ$, $\varphi_a = 0^\circ$, $\varphi_b = \pi - \varphi$ 。改变 φ 角, 测量微分截面, 得到的是原子中电子垂直于入射电子方向的动量分布, $p_b = K$ 的地方是 $\theta = 0^\circ$ 处, 如图5(a)所示。由于 p 中第一项小, 在 $\varphi = 0^\circ - 30^\circ$ 内 $p \propto \varphi$ 。共面对称条件是: $E_a = E_b$, $p_a = p_b$, $\varphi = 0^\circ$, $\theta_a = \theta_b = \theta$, 改变 θ 角, 这时测量到的是原子中电子平行于入射电子方向的动量分布, $p_b = K$ 的地方是 $\theta = 45^\circ$, 如图5(b)所示。

由于($e, 2e$)电离微分截面正比于动量空间初末态重叠的绝对值平方, 但又非常灵敏于 K , 与 K^{-4} 成正比, 而 K 不依赖 φ 角, 非常灵敏于 θ 角。因此不共面对称测量的一个优点是 K 保持常数, 而共面对称测量的 K 也即截面随 θ 变化很快, 必须小心地在实验上保证电子探测器所看到的作用区的体积 V 不随 θ 角变化。不共面对称测量的另一个实验上的优点是对于非极化电子和靶实验, 截面必须是围绕共面位置($\varphi = 0$)对称的, 且 V 不依赖 φ 。这允许我们简单地核定测量装置上任何不希望各向异性。这些说明为什么不共面对称实验条件用得多。

第三是共面不对称几何条件: $\varphi_a = 0$, $\varphi_b = \pi$, $E_a \gg E_b$, $\theta_a \ll \theta_b$ 。通常 $\theta_a < 20^\circ$, 固定在 Bethe 脊上, θ_b 改变以测量不同的 p , 如图5(c)所示。这个条件是最新发展的。由于电离截面正比于 K , 且电离事件中

属于对称的只占一小部分。对一固定入射能量, 对称条件使 K 最大, 因此不对称能量分配和小动量传递过程构成电离碰撞的主体。在不对称测量中, 通过选择打出电子能量 E_b 和散射电子角度 θ_a , 满足

$$\cos \theta_a = (p_a^2 + \epsilon_f) / p_0 p_a$$

的 Bethe 脊条件, 则有最大电离截面。Avaldi *et al* (1987年)实验上证明对 He 和 N_2 价轨道电子动量谱测量, 平面波冲量条件在 $E_0 = 1.5 \text{ keV}$ 和 $E_a = 100 \text{ eV}$ 时仍成立。当选择 Bethe 脊条件, 实验测量所需累积时间可以比对称测量小40倍。

第一个测量动量分布的实验是在1969年用共面对称方法做的, 1972年用9keV电子测到碳膜1s轨道的动量分布。第一个电子动量谱实验是在1973年由 Weigold 等用400eV不共面对称方法作了。现在用($e, 2e$)反应方法测量电子动量谱已得到很大发展, 经历了四代。第一代是共面对称和不共面对称装置, 探测器用通道电子倍增器, 实际大多用的是不共面对称。这一代测量一个样品时间往往要多个月。第二代是共面不对称装置, 也用通道电子倍增器。经20年研究, 1989年终于能够实际应用, 可缩短测量时间一个多数量级。第三代是一维位置灵敏装置, 使用微通道板探测器代替通道电子倍增器作一维位置读出, 同时测量不同能量的电子。目前已在共面对称($e, 2e$)上实现, 可缩短测量时间一个数量级。进一步正在研究用到共面不对称装置上。第四代是不共面不对称二维位置灵敏装置, 它能综合以上各个优点, 并用微通道板作二维读出, 可同时测量不同能量和角度的电子, 并且能够得到二维动量密度图, 正在研究中。

已经测量了许多种原子和分子动量谱。在化学中习惯于用位置空间, 量子力学描述中动量分布由动量空间波函数绝对值平方即动量密度给出, 通过 Fourier 变换, 可以得到位置空间波函数。现在已经发展了一套电子动量谱波函数绘图技术。

($e, 2e$)电子动量谱学的另外进展是原子态高分辨电子动量谱和原子激发态和定向原子的电子动量谱实验。1988年第一次直接测量到 Ar 原子态 $3s, 3p$ 组合初态 d 波关联造成的 $^2P^0, ^2D^1$ 动量谱。1990年测量到用 σ^+ 激光抽运 Na 原子从 $3^2S_{1/2}(F=2)$ 到 $3^2P_{3/2}(F=3)$ 跃迁的($e, 2e$)电子动量谱, 激发原子在 $m'_F = 3$ 态和 $m_i = +1$ 态。另外固体薄膜的($e, 2e$)实验经过若干时间摸索, 也已经认真开始进行。当然这需要更高的人射能量。

国际上近20年已有不少家进行($e, 2e$)工作。电子动量谱学主要在澳大利亚的 E. Weigold 和 I. E. McCarthy 以及加拿大的 C. E. Brion 实验室做, 采用第一代不共面对称($e, 2e$)装置, 前者已实现第三代一维测量; 德国、法国和意大利也建有不少共面对称和共面不对称($e, 2e$)装置, 测电离能谱、微分截面和电



非晶半导体基本理论 及目前发展概况

陈光华



一、非晶半导体基本理论

非晶态半导体是一门发展极为迅速的新兴学科,是凝聚态物理学中最为活跃的领域之一,已成为材料学科的一个组成部分.大量的事实说明,研究非晶态半导体的意义不仅在技术上能够产生新材料和新器件,而且对于认识固体理论中的许多基本问题也会产生深远的影响.

晶态半导体的基本特征是:组成它的原子或分子作周期性排列,叫作长程有序性.基于这样的特征,利用能带理论,使得晶态半导体中的许多物理问题和半导体器件的基本原理得到了比较满意的解决.而非晶态半导体,结构上是一种共价网络,没有周期性排列的约束,所以它在结构上、光学电学性质上很不同于晶态半导体.因此,在应用上也显示了自己的特征,已呈现了巨大的应用前景.

同晶态半导体相比,非晶态半导体有以下几个重要的特点:

1.在结构上,非晶态半导体的组成原子没有长程有序性.但由于原子间的键合力十分类似于晶体,通常仍保持着几个晶格常数范围内的短程序.简单地说,非晶态半导体结构上是长程无序、短程有序.

2.对于大多数非晶态半导体,其组成原子都是由共价键结合在一起的,形成一种连续的共价键无规网

络,所有的价电子都束缚在键内而满足最大成键数目的 $(8 - N)$ 规则,称此为键的饱和性, N 是原子的价电子数.

3.非晶态半导体可以部分实现连续的物性控制.当连续改变组成非晶态半导体的化学组分时,其比重、相变温度、电导率、禁带宽度等随之连续变化.这样为探索新材料提供了广阔的天地.

4.非晶态半导体在热力学上处于亚稳状态,在一定条件下可以转变为晶态.这是因为非晶态半导体比其相应的晶态材料有更高的晶格位能,因此处于亚稳状态.

5.非晶态半导体的结构、电学、光学性质灵敏的依赖于制备条件和制备方法,因此它们的性能重复性较差.

6.非晶态半导体的物理性质是各向同性的,这是因为它的结构是一种共价键无规网络结构.

7.非晶态半导体材料的制备方法比较简单,大多数材料可以制成薄膜,因此用非晶材料制备的器件成本低廉,容易实现大面积和高容量.

随着非晶态半导体理论的飞速发展,它已在技术领域中得到广泛应用,将形成新的产业.例如:用高效、大面积非晶硅($a\text{-Si:H}$)太阳能电池作的发电站已并网发电;用 $a\text{-Si:H}$ 薄膜场效应管作成大屏幕液晶显示器和平面显像电视机已在日本成为商品出售;非晶复印机鼓、 $a\text{-Si:H}$ 传感器和摄像管、非晶电致发光

* 作者系兰州大学物理系教授

子动量谱,最近意大利已实现第二代共面不对称测量.我们实验室也正在研制第三代一维($e, 2e$)装置.

四、结论

近20年来,由于发展了分辨率很好的电子能谱仪,使能级能量的测量精度提高了几个数量级,能够分辨能量差很小的能级结构,理论方法的发展和计算机的出现也使我们能够计算出这些精细能级结构和波函数.因此电子与原子分子和离子的碰撞实验获得了飞快的发展.世界范围有专门的电子和原子碰撞物理国际会议(ICPEAC),每两年举行一次,自1959年起已举行了17届,参加会议的人数已发展到600多人.我国这方面工作在1988年以前几乎是空白,现在由于国家自然科学基金委员会和中国科学院的支持,组织了重大项目.在复旦大学和北京物理所正在建立

电子与离子相互作用研究装置,在中国科学技术大学正在建立电子与原子碰撞装置,后者已在前面讨论过.这些装置建立起来后将会使我国这方面的研究工作很快进入世界先进行列.

快电子碰撞实验的开展对于原子分子的激发态结构和动力学研究具有重要意义.不仅可以得到中能电子与原子分子作用的总截面、微分散射和电离截面,以及光学振子强度数据,也可以研究原子分子价壳层和内壳层电子高激发态能级精细结构,而且还可以得到原子分子中不同轨道的电子动量谱和动量空间与位置空间的波函数详情.这些研究对于原子分子物理学及其它相关学科的发展起了并且正在起着重要作用.

(续完)