

УСПЕХИ ФИЗИЧЕСКИХ НАУК**ФОТОЭФФЕКТ В МЕТАЛЛАХ****С. В. Вонсовский, А. В. Соколов, А. З. Векслер****§ 1. ВВЕДЕНИЕ**

Изучение явлений взаимодействия электромагнитного поля с веществом представляет очень большой научный интерес, поскольку раскрытие деталей механизма этого взаимодействия позволяет проникнуть в тонкости строения различных веществ и получить более полные и глубокие представления о природе их свойств. Это представляет также и огромный практический интерес в связи с техническим использованием этих явлений в современной электротехнике, радиотехнике и электронике.

Среди многочисленных конкретных типов взаимодействия электромагнитного излучения с веществом нас в данном обзоре будет интересовать случай так называемого внешнего фотоэлектрического эффекта в металлических телах. С феноменологической точки зрения под этим эффектом понимается явление испускания электронов с поверхности металла при его освещении, т. е. воздействию электромагнитным излучением в области инфракрасных, видимых и ультрафиолетовых частот. Явление вырывания электронов с помощью рентгеновского и гамма-излучения, строго говоря, также следует назвать фотсэффектом. Естественно, что фотоэлектрический эффект наблюдается не только в металлах, но и в других твёрдых телах (полупроводниках, диэлектриках, молекулярных кристаллах и др.), а также и в жидкостях. Однако здесь мы, в основном, ограничимся рассмотрением фотоэффекта только для случая твёрдых металлических тел. Из других типов взаимодействия электромагнитного поля с веществом, родственных в какой-то мере внешнему фотоэффекту, следует ещё упомянуть: 1) явление фотоионизации, т. е. испускание электронов при освещении газов и паров, 2) явление фотопроводимости или внутреннего фотоэффекта, т. е. возникновение электронов проводимости в телах, не проводящих электрический ток (полупроводниках или диэлектриках), при их освещении, 3) фотогальванический эффект, т. е. возникновение э. д. с.

в замкнутом контуре под влиянием освещения, но без внешнего источника тока. Строгого различия между этими явлениями и внешним фотоэффектом нельзя провести в силу их общего физического содержания, но мы ограничимся здесь рассмотрением только внешнего фотоэффекта.

Открытие внешнего фотоэлектрического эффекта принадлежит Г. Герцу¹ (1887 г.). Примечательно, что открытие этого явления, сыгравшего выдающуюся роль в развитии квантовой теории, было сделано Герцем попутно, в его знаменитых опытах по экспериментальному обоснованию электромагнитной теории света. Герц обнаружил, что длина электрической искры в разряднике вспомогательного колебательного контура зависела от того, падал ли на неё свет от другой искры, получающейся в разряднике основного контура, или нет. Было найдено, что если разрядник вспомогательного контура защищён от света, то длина искры в нём меньше, чем при его освещении. Оказалось также, что этот эффект наблюдается и в ультрафиолетовой части спектра падающего излучения, и что он наблюдается лучше всего, если освещается отрицательный электрод разрядника. Эти результаты опытов Г. Герца послужили началом интенсивного изучения фотоэлектрического эффекта. Среди последующих экспериментальных исследований в первую очередь следует упомянуть работы А. Г. Столетова², в которых были впервые вскрыты основные законы фотоэффекта, а также работы Гальвакса³ и других исследователей. Ленард⁴ и Томсон⁵ доказали, что при освещении металлов вылетают электроны, открытые ранее в опытах с катодными лучами в разрядных трубках.

При исследовании явления испускания электронов веществом, подвергнутому освещению, необходимо было прежде всего установить связь между характеристиками падающего излучения и характеристиками потока вылетающих фотоэлектронов. Основными характеристиками излучения следует выбрать интенсивность, спектральный состав (частоту) и поляризацию света, а для электронов — их число, распределение по скорости и направлению их испускания. Задачей теории является объяснение закономерных связей между этими величинами и сравнение их с экспериментом.

В результате упомянутых выше опытных исследований, а также и многих других, были установлены три основных экспериментальных закона внешнего фотоэффекта:

1) Сила фотоэлектрического тока j прямо пропорциональна интенсивности I светового потока, вызывающего фотоэффект, при условии неизменности спектрального состава этого потока (закон Столетова).

2) Существует длинноволновая граница (λ_0 или ν_0) в спектре излучения, начиная с которой (для $\lambda < \lambda_0$, или $\nu > \nu_0$) в данном веществе может иметь место фотоэффект (закон «красной» границы).

3) Энергия фотоэлектронов не зависит от интенсивности света, а максимальная величина этой энергии $\frac{1}{2}(mv^2)$ линейно связана с частотой падающего света, т. е.

$$\frac{1}{2}(mv^2)_{\text{макс}} = a + b\nu, \quad (1.1)$$

где a и b — постоянные, m — масса и v — скорость фотоэлектрона.

Известно, что законы фотоэффекта (2) и (3) не могли быть объяснены на основе классической волновой теории света и привели к очередной «катастрофе» классической физики, не способной объяснить квантовый характер световых явлений. Эйнштейну⁶ первому удалось дать теоретическое объяснение этих законов, применив для этой цели планковские представления о квантах света. Работа Эйнштейна по фотоэффекту положила начало современной теории взаимодействия света с веществом. Приняв, что свет частоты ν может поглощаться и излучаться квантами энергии $h\nu$ (h — постоянная Планка), Эйнштейн предположил, что энергия светового кванта, попадающего на металл, целиком поглощается электроном, частично расходуясь при этом на работу вырывания электрона из металла, а в остальном превращаясь в кинетическую энергию выбитого из металла электрона. Таким образом, закон сохранения энергии в данном случае имеет вид:

$$h\nu = \chi + \frac{1}{2}mv_{\text{макс}}^2, \quad (1.2)$$

где χ — минимальная энергия, требующаяся для удаления электрона из металла во внешнее свободное пространство, т. е. так называемая работа выхода, а $v_{\text{макс}}$ — максимальная скорость вылетающих электронов. Из уравнения (1.2) сразу вытекают второй и третий законы фотоэффекта. А именно, для «красной» границы получаем

$$h\nu_0 = \chi, \quad \nu_0 = \frac{\chi}{h}. \quad (1.3)$$

Таким образом, минимальная частота ν_0 определяется работой выхода χ ; из уравнения (1.2) непосредственно следует, что максимальная энергия фотоэлектронов является линейной функцией частоты света, т. е. получается опытный закон (3). Первый закон Столетова также хорошо объясняется теорией Эйнштейна, ибо число фотоэлектронов растёт прямо пропорционально числу фотонов. Уравнения Эйнштейна были проверены в ряде опытов. Среди них в первую очередь следует упомянуть фундаментальные работы А. Ф. Иоффе⁷ по элементарному фотоэлектрическому эффекту, в которых впервые наблюдался элементарный акт квантового поглощения света, предсказанного Эйнштейном в формуле (1.1). Важную роль

в экспериментальном изучении фотоэффекта сыграли весьма тонкие по экспериментальному искусству работы П. И. Лукирского и С. С. Прилежаева⁸, которые разработали очень точную методику измерений фотоэффекта при помощи сферического конденсатора и произвели тщательное исследование скоростей фотоэлектронов на целом ряде металлов, а также дали прецизионный метод количественного определения постоянной Планка.

Из формулы (1.3) явствует, что фотоэлектрическая граница определяется работой выхода, последняя же определяется условиями на поверхности металла. Таким образом, можно ожидать, что граничная частота ν_0 в сильной мере зависит от состояния поверхности металла; это полностью подтверждается опытом. Обработка поверх-

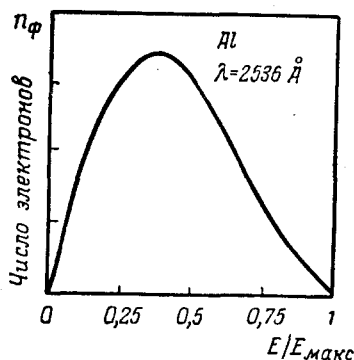


Рис. 1. Кривая распределения фотоэлектронов по энергиям для алюминия⁸.

красную границу в область меньших частот, и эта граница перестаёт быть резкой с ростом температуры. Аналогично температуре действует на фототок ускоряющее электрическое поле у поверхности фотокатода. Влияние этого поля незначительно для частот ν , далёких от красной границы ($\nu \gg \nu_0$), и очень существенно для ν , близких к ν_0 .

Помимо фотоэлектрической границы для характеристики фотоэффекта имеют существенное значение энергия фотоэлектронов и спектральное распределение фотоэффекта, т. е. зависимость фототока от частоты света. При этом существенно определить функцию распределения электронов по скоростям v или энергиям ε , в которую в качестве параметра входит частота света ν : $f(\varepsilon, \nu)$. На рис. 1 в качестве примера приведена кривая распределения энергии фотоэлектронов для алюминия⁸, освещаемого светом длины волны $\lambda = 2536 \text{ Å}$. По оси ординат отложено число фотоэлектронов n_ϕ (в произвольных единицах), а по оси абсцисс — отношения энергии электрона к его максимальной энергии $E/E_{\text{макс}}$. Эти кривые мало

ности, наличие адсорбированных газов и т. п. могут сильно менять величину работы выхода, а вместе с ней и величину красной границы, и тем самым делают задачу определения красной границы чистых металлов весьма трудной. На величину ν_0 может оказывать существенное влияние и температура металла. Опыты с чистыми поверхностями в вакууме показали, что фототок j незначительно меняется с температурой для частот, далёких от красной границы ($\nu - \nu_0 \gg \nu_0$), и резко возрастает при частотах, близких к ней, особенно для наименьших частот ($\nu \sim \nu_0$), т. е. температура эффективно смещает

различаются для различных металлов, но могут сильно деформироваться при переходе к тонким плёнкам (для толщин $d < 10^{-6}$ см)⁸.

Кривые зависимости фототока от частоты света имеют вид, изображённый на рис. 2. Здесь по оси ординат отложено отношение фототока j к интенсивности I света, вызывающего его (j/I — чувствительность фотокатода), а по оси абсцисс — частота света ν . Кривая типа *A* на рис. 2 соответствует «нормальному» фотоэффекту

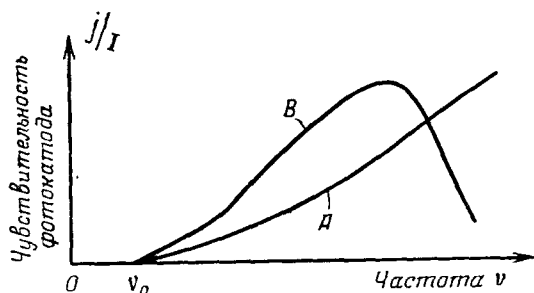


Рис. 2. Схематические кривые спектрального распределения фототока. *A* — «нормальный» фотоэффект, *B* — фотоэффект со спектральной селективностью.

(нормальная характеристика) и имеет монотонно возрастающий характер с ростом частоты. Кривая *B* рис. 2 имеет максимум в той или иной области частот и соответствует «селективному» фотоэффекту⁹. При этом селективность может быть просто спектральной, когда в некоторой области частот имеется максимум на кривой рис. 2 независимо от поляризации света, а может быть и поляризационной, когда этот максимум получается лишь при определённой поляризации падающего на фотокатод света.

Чувствительность фотокатода j/I можно записать и в несколько иной форме, если взять частное от деления фототока на заряд электрона $j/e = n_{\text{ф}}$, т. е. число фотоэлектронов, а вместо интенсивности света — её отношение к энергии кванта, $I/h\nu = n_{\text{кв}}$, т. е. число фотонов данной частоты. Тогда получим чувствительность, выраженную в количестве фотоэлектронов, приходящихся на один поглощённый световой квант (квантовый выход фотоэффекта $n_{\text{ф}}/n_{\text{кв}}$). Эта величина оказывается очень маленькой. В случае очень чистых металлов квантовый выход составляет величину порядка 10^{-5} — 10^{-3} . Эта величина является функцией «расстояния» от красной границы, т. е. разности $\nu - \nu_0$. По экспериментальным данным Лукьянова¹⁰ квантовый выход для максимума спектральной характеристики

сложных катодов может достигать величины 0,3 электрона на один поглощённый световой квант.

Мы здесь не останавливаемся на обзоре обширного экспериментального материала и отсылаем читателя к монографиям и обзорам по фотоэффекту¹¹. Ниже будут изложены лишь основные результаты некоторых работ по квантовомеханической теории фотоэлектрического эффекта в металлах.

§ 2. ОСНОВНЫЕ ПРЕДПОСЫЛКИ ДЛЯ ПОСТРОЕНИЯ КВАНТОВОЙ ТЕОРИИ ФОТОЭФФЕКТА И ПОЛУФЕНОМЕНОЛОГИЧЕСКАЯ ТЕОРИЯ (ПО ФАУЛЕРУ)

Теория фотоэффекта должна объяснить спектральные характеристики фотокатодов, закон распределения фотоэлектронов по энергиям, температурную зависимость фототока и его зависимость от ускоряющего поля, а также влияние на фототок состояния поверхности и природы металла, формы и размеров фотокатода. Все эти задачи не могла решить элементарная теория Эйнштейна⁶. Это оказалось под силу только современной квантовомеханической теории кристаллических тел. В наиболее общей форме задача ставится так: система электронов проводимости в кристалле взаимодействует с его ионной решёткой и друг с другом; из вакуума на металл падает электромагнитное излучение определённой интенсивности, поляризации и направления. Требуется вычислить электронный ток в вакууме, вызванный взаимодействием системы электронов с электромагнитным полем света. Для этой цели необходимо решить волновое уравнение такой системы, определить волновую функцию (которая может быть и не стационарной) и найти по общим формулам квантовой механики электронный ток. Для учёта температурных эффектов следует решать уже не квантовомеханическую, а квантостатистическую задачу, для чего нужно найти не волновую функцию, а матрицу плотности (статистический оператор) и с её помощью определить фототок как функцию температуры фотокатода. Однако решение как первой, так, тем более, и второй из этих общих задач практически в настоящее время невозможно. Поэтому приходится идти путём приближённых решений, используя методы теории возмущения и другие аппроксимации.

Уже в рамках квантовой модели свободных электронов можно получить некоторые ценные указания для понимания природы изучаемого эффекта и его основных особенностей в металлах. С точки зрения простейшей модели металла последний представляет собой потенциальный «ящик» (рис. 3) с высотой потенциального барьера $W_a = h\nu_a$. При 0° К электроны внутри «ящика» в силу принципа Паули заполняют все нижние энергетические уровни вплоть до некоторого максимального уровня энергии $\epsilon_f = h\nu_f$ (предельная энергия Ферми или химический потенциал электронного газа при 0° К). Из

рис. 3 видно, что разность между высотой потенциального барьера на границе металла и предельной энергией Ферми равна работе выхода, $W_a - \epsilon_f = \chi$, т. е. минимальной энергии, которую нужно затратить, чтобы электрон с верхнего энергетического уровня из металла перевести в вакуум. Эта величина определяет красную границу фотоэффекта: $\chi = h\nu_0$ (см. § 1). Очевидно, что такая граница, строго говоря, существует только при 0° K , когда имеется определённая величина предельной энергии ϵ_f , выше которой нет ни одного занятого электронного энергетического уровня. С повышением температуры в распределении Ферми для электронов появляется так называемый «максвелловский хвост» термически возбуждённых электронов. Поэтому при $T > 0^\circ \text{ K}$ появляется вероятность не только испускания фотоэлектронов, но и самопроизвольной термоэмиссии электронов из металла. Однако вследствие сильного вырождения электронного газа в типичных металлах «размывание» резкого спада Ферми в распределении электронов по энергиям весьма незначительно вплоть до комнатных температур и даже выше ($100\text{—}1000^\circ \text{ K}$), поэтому можно ожидать достаточной чёткости красной границы и в области комнатных температур. Её прецизионное определение требует проведения опытов при достаточно низких температурах и применения метода экстраполяции кривых спектрального распределения. Это предсказание теории вполне оправдывается на опыте¹¹.

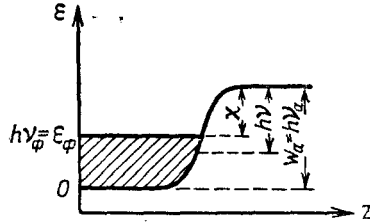


Рис. 3. Потенциальный барьер на границе металла, работа выхода и граничная энергия Ферми.

Следует ожидать, что с ростом частоты света ν число фотоэлектронов сначала будет возрастать за счёт электронов, занимающих уровни в интервале энергий между $W_a - h\nu$ и предельной энергией ϵ_f (рис. 3). Если частота света ν становится такой, что энергия кванта больше высоты барьера, $h\nu > W_a$, то число фотоэлектронов больше уже не имеет причин возрастать (если пренебречь ионизацией электронов, не входящих в число электронов проводимости, падающей световой волной). Более того, так как с ростом частоты уменьшается вероятность элементарного акта поглощения света электронами, то при переходе через критическую частоту $h\nu_a = W_a$ можно ожидать максимума на спектральной кривой фототока (селективный эффект). Это также наблюдается на опыте, в частности особенно ярко для щелочных металлов, что, повидимому, объясняется относительно небольшой величиной потенциала W_a для этих веществ.

Большая величина свободного пробега электронов в металле заставляет предполагать, что процессы столкновения электронов

с колебаниями решётки (фононами) не должны сколько-нибудь заметно влиять на величину фототока. Широкий интервал энергий (скоростей) фотоэлектронов определяется не процессами столкновений электронов внутри кристалла, а тем, что в силу особых свойств фермиевской функции распределения электроны проводимости в металле уже при 0°K распределены в широком интервале энергий (от 0 до ε_ϕ , что составляет величины $\sim 10^{-12} \text{ эрг} \sim 0,1 \text{ эВ}$).

В рамках модели свободных электронов можно произвести и более детальный количественный расчёт, который позволяет, в частности, дать достаточно удовлетворительное объяснение ряда количественных закономерностей фотоэффекта (Фаулер¹²). Пусть поверхность металла совпадает с плоскостью $xу$, а нормаль к ней — с осью z . Тогда ток электронов через поверхность определится формулой

$$j = \int_0^\infty N(\varepsilon_\perp) D(\varepsilon_\perp) d\varepsilon_\perp, \quad (2.1)$$

где $N(\varepsilon_\perp)$ — число электронов, у которых нормальная составляющая энергии $\varepsilon_\perp = \frac{mv_\perp^2}{2}$ лежит в интервале $d\varepsilon_\perp$ и которые за 1 секунду падают на поверхность металла, а $D(\varepsilon_\perp)$ — вероятность прохождения электронов с нормальной энергией ε_\perp через потенциальный барьер. Как показал Нордгейм¹³, величина $N(\varepsilon_\perp)$ равна *):

$$N(\varepsilon_\perp) = \frac{4\pi m}{h^3} kT \ln \left(1 + e^{-\frac{(\varepsilon_\perp - \varepsilon_\phi)}{kT}} \right). \quad (2.2)$$

*) Действительно¹³, из выражения для функции распределения Ферми следует, что число электронов, слагающая импульса p_z которых лежит в интервале dp_z , равно

$$n(p_z) dp_z = dp_z \frac{2}{h^3} \int_{-\infty}^{+\infty} \int \frac{dp_x dp_y}{\exp \left(\frac{\frac{p_x^2 + p_y^2 + p_z^2}{2m} - \varepsilon_\phi}{kT} \right) + 1}.$$

Введём новые координаты $p_x = \rho \cos \varphi$, $p_y = \rho \sin \varphi$ и проинтегрируем по углу φ от 0 до 2π , что даёт

$$n(p_z) = \frac{4\pi}{h^3} \int_0^\infty \frac{\rho d\rho}{\exp \left(\frac{\frac{\rho^2 + p_z^2}{2m} - \varepsilon_\phi}{kT} \right) + 1}.$$

Введём новую переменную интегрирования $\xi = \rho^2/2mkT$ и обозна-

В частности, при абсолютном нуле получаем:

$$\left. \begin{aligned} N(\varepsilon_{\perp}) &= \frac{4\pi m}{h^3} (\varepsilon_{\Phi} - \varepsilon_{\perp}) & \text{при } \varepsilon_{\perp} < \varepsilon_{\Phi}, \\ N(\varepsilon_{\perp}) &= 0 & \text{при } \varepsilon_{\perp} > \varepsilon_{\Phi}. \end{aligned} \right\} \quad (2.3)$$

Функция (2.3) имеет, очевидно, вид прямой.

Для определения вероятности $D(\varepsilon_{\perp})$ необходимо знать форму потенциального барьера, удерживающего электроны проводимости в металле. При заданном типе потенциального барьера вероятность может быть определена обычными квантовомеханическими методами.

При попытке использовать формулу (2.1) для вычисления фототока мы встречаемся с рядом трудностей, которые вытекают из необходимости определения влияния падающего электромагнитного поля на распределение электронов проводимости по энергиям и необходимости пользоваться изменённой этим влиянием функцией распределения для определения величины фототока. Для решения этой задачи требуется: 1) знать исходное распределение электронов проводимости по энергиям в отсутствие падающего света; 2) определить вероятность элементарного акта поглощения фотона частоты ν электроном энергии ε , в результате которого электрон получит определённую нормальную составляющую энергии ε'_{\perp} (эта вероятность, кроме ν и ε , будет зависеть от интенсивности и поляризации света и от характера потенциального поля в металле); 3) найти функцию распределения электронов, возбуждённых светом, по значениям нормальной энергии к поверхности металла $N'(\varepsilon'_{\perp})$; 4) определить вероятность $D'(\varepsilon'_{\perp})$ прохождения таких электронов через потенциальный барьер. Умножив функцию распределения возбуждённых электронов на $D'(\varepsilon'_{\perp})$, мы получим выражение для числа электронов с определённой величиной нормальной энергии вне металла, созданных

чим $\beta = \frac{\varepsilon_{\perp} - \varepsilon_{\Phi}}{kT}$, где $v_z/2m = \varepsilon_{\perp}$, тогда получим

$$n(p_z) dp_z = n(\varepsilon_{\perp}) d\varepsilon_{\perp} = \frac{4\pi m^{3/2} kT}{h^3 \sqrt{2\varepsilon_{\perp}}} \int_0^{\infty} \frac{d\xi}{\exp(\xi + \beta) + 1} d\varepsilon_{\perp},$$

где

$$\int_0^{\infty} \frac{d\xi}{\exp(\xi + \beta) + 1} = \int_{e^{\beta}}^{\infty} \frac{dz}{z(z+1)} = \left\{ \ln z - \ln(z+1) \right\} \Big|_{e^{\beta}}^{\infty} = \ln(1 + e^{-\beta}),$$

откуда и следует формула (2.2), если умножить выражение $n(\varepsilon_{\perp})$ на скорость $v_z = \sqrt{\frac{2\varepsilon_{\perp}}{m}}$, что даёт поток электронов за 1 сек.

данной частотой света, т. е. кривую распределения фотоэлектронов по скоростям $N'(\epsilon'_\perp)D'(\epsilon'_\perp)$. Наконец, интегрируя это выражение по всем возможным значениям «нормальных» энергий, мы получим полный фототок как функцию частоты и температуры $j = f(\nu, T)$, т. е. спектральные характеристики эффекта при различных температурах.

Ввиду большой сложности точного проведения этой схемы расчёта Фаулер¹²⁶ предложил полуфеноменологическое решение для частного случая этой задачи. А именно, он ограничился рассмотрением сравнительно узкого интервала частот вблизи «красной границы» (примерно от ν_0 до $1,5 \nu_0$). Решение этой задачи, несомненно, имеет и практический интерес, поскольку экспериментаторов и практиков больше всего интересует вопрос не столько об определении полной кривой спектрального распределения, сколько вопрос о точном ходе этой кривой в узкой области частот вблизи красной границы (см., например, обзор¹¹⁷, стр. 82). Если ограничиться рассмотрением этой узкой области частот, то отсюда сразу следует, что фотоэлектроны имеют начальные энергии также в узком интервале вблизи предельной энергии Ферми ϵ_F . Так как на распределение этих «термически возбуждённых» электронов температура оказывает сильное влияние, то следует ожидать, что и состояние фотоэлектронов в этом диапазоне частот будет сильно зависеть от T . Поэтому в этом случае уже нельзя считать, что поверхность фотокатода находится при 0°K . Пользуясь узостью интервала начальных энергий, можно считать все величины, не очень резко зависящие от энергии электронов, практически постоянными. Можно также считать постоянными величины, зависящие от частоты ν в небольшой степени, по сравнению с величинами, которые зависят от разности частот $(\nu - \nu_0)$.

Если учесть все эти упрощения, то программа расчёта значительно облегчается. А именно, теперь нет необходимости определять вероятность элементарного акта поглощения фотона электроном, поскольку эту вероятность можно принять в данном случае постоянной. Хотя вероятность $D(\epsilon_\perp)$, повидимому, и зависит от разности $(\nu - \nu_0)$, но Фаулер принимает, что $D(\epsilon_\perp) = 0$ для электронов с энергией $\epsilon_\perp < W_a$ и равна единице для $\epsilon_\perp > W_a$. Таким образом, можно воспользоваться формулой (2.2) для числа электронов, падающих на 1 см^2 границы металла за 1 сек. в интервале нормальных энергий от ϵ_F до $\epsilon_F + h\nu$. Для определения числа электронов, которые могут выйти за границу металла, очевидно, необходимо проинтегрировать величину (2.2) в пределах от $W_a - h\nu$ до ∞ . Выбор нижнего предела связан с тем, что свет частоты ν как бы смещает граничную энергию на величину $h\nu$ и делает её равной $\epsilon_F + h\nu$, и потому появляются электроны с энергией, большей, чем высота потенциального барьера W_a (см. рис. 3). Вместо вероятности элементарного акта поглощения фотона электроном введём, по Фауле-

ру, постоянный коэффициент α , который показывает, во сколько раз значение функции распределения электронов, возбуждённых светом, меньше этой функции для нормального газа электронов проводимости. Таким образом, для фототока получим:

$$j = \alpha \frac{4\pi me k T}{h^3} \int_{W_a - h\nu}^{\infty} \ln \left(1 + e^{\frac{\epsilon_{\Phi} - \epsilon_{\perp}}{kT}} \right) d\epsilon_{\perp}; \quad (2.4)$$

вводя новые переменные

$$\frac{\epsilon_{\Phi} - \epsilon_{\perp}}{kT} = x', \quad \frac{\epsilon_{\Phi} - (W_a - h\nu)}{kT} = x = \frac{h(\nu - \nu_0)}{kT}$$

и совершая подстановку $d\epsilon_{\perp} = -kT dx'$, получим:

$$j = \alpha \frac{4\pi me k^2 T}{h^3} \int_{-\infty}^x \ln(1 + e^{x'}) dx'. \quad (2.5)$$

Функция $f_i(x) = \int_{-\infty}^x \ln(1 + e^{x'}) dx'$ может быть найдена в таблицах или же представлена в виде рядов:

$$f_1(x) = e^x - \frac{e^{2x}}{2^2} + \frac{e^{3x}}{3^2} - \dots \quad \text{при } i=1 \quad x \leq 0, \quad (2.6)$$

$$f_2(x) = \frac{x^2}{2} + \frac{\pi^2}{6} - e^{-x} + \frac{e^{-2x}}{2^2} - \frac{e^{-3x}}{3^2} + \dots$$

при $i=2 \quad x \geq 0$, (2.7)

$$f(0) = 1 - \frac{1}{2^2} + \frac{1}{3^2} - \frac{1}{4^2} + \dots = \frac{\pi^2}{12} \quad \text{при } x=0.$$

Уравнение спектрального распределения окончательно можно записать в такой форме:

$$j = \alpha A_0 T^2 f_i(x) = \alpha A_0 T^2 f_i \left[\frac{h}{kT} (\nu - \nu_0) \right]. \quad (2.8)$$

Универсальная постоянная $A_0 = \frac{4\pi me k^2}{h^3} = 120 \text{ а/см}^2 \text{град}^2$. Легко проверить, что при $\nu = 0$ и $\alpha = 1$ (при этом $x = -\frac{h\nu_0}{kT} \ll 0$) из формулы (2.8) сразу получаем уравнение Ричардсона для термоэлектронной эмиссии:

$$j = A_0 T^2 e^{-\frac{h\nu_0}{kT}}.$$

Далее, для случая $T = 0^\circ \text{K}$, когда $x = \pm \infty$ при $\nu > \nu_0$ или $\nu < \nu_0$, получаем соответственно:

$$\left. \begin{aligned} j &= 0 & (\nu < \nu_0), \\ j &= \frac{1}{2} \frac{\alpha A_0 h^2}{k^2} (\nu - \nu_0)^2 & (\nu > \nu_0). \end{aligned} \right\} \quad (2.9)$$

Первое из уравнений (2.9) даёт красную границу, а второе показывает, что для близких к ней частот спектральная характеристика имеет квадратичный характер. При температурах, отличных от 0°K , уже нельзя говорить о красной границе, ибо при $T > 0$ и для $\nu \leq \nu_0$, $x \leq 0$ функция $f_i(x)$ отлична от нуля, к которому она стремится лишь асимптотически при $x \rightarrow -\infty$. Поэтому при $T > 0$ фототок существует не только при $\nu > \nu_0$, но и при $\nu \leq \nu_0$. Однако можно сохранить представление об эффективной красной границе и при $T > 0$, определив её как частоту при $x = 0$ из уравнений Фаулера. Фаулер, а также Дю-Бридж¹⁴ разработали очень удобный графический метод, позволяющий проводить сравнения теории с опытом. На нём мы кратко остановимся в § 5. Желающих познакомиться с этим вопросом более детально отсылаем к соответствующим литературным источникам (см., например, ^{11a-11г} и др.). Остановимся ещё на вопросе о температурной зависимости фототока. Из формулы (2.8) вытекает, что эта зависимость в сильной степени определяется величиной частоты света. Для трёх частных случаев мы получаем:

а) Если $\nu = \nu_0$ (т. е. $x = 0$) и $f(0) = 1$, то

$$j = \alpha A_0 T^2.$$

б) Если $\nu \gg \nu_0$, то $x \gg 0$ и в силу (2.7) имеем:

$$j = \alpha A_0 T^2 \left(\frac{x^2}{2} + \frac{\pi^2}{6} \right) = \frac{\alpha A_0}{2} \left[\frac{h^2 (\nu - \nu_0)^2}{k^2} + \frac{\pi^2}{3} T^2 \right].$$

Следует заметить, что даже для интервала частот $(\nu - \nu_0)$, соответствующего интервалу длин волн $\sim 100 \text{ \AA}$, первое слагаемое в правой части гораздо больше второго и поэтому фототок весьма слабо зависит от T .

в) Если $\nu \ll \nu_0$, то в этом случае $x \ll 0$ и в силу (2.6) приближённо имеем:

$$j = \alpha A_0 T^2 e^{\frac{h(\nu - \nu_0)}{kT}}.$$

т. е. получаем весьма резкую зависимость от температуры. Если подобрать постоянные α и ν_0 в формулах Фаулера путём наложения экспериментальных и теоретических кривых, то получается достаточно удовлетворительное согласие. Это убеждает нас в том, что изложенная полуфеноменологическая теория, по крайней мере качественно, хорошо отражает реальную природу фотоэффекта в ме-

талле. Можно также применить эту теорию к расчёту распределения энергий фотоэлектронов, определяемых из вольтамперных кривых для задерживающего потенциала (см., например, обзор^{11г}, стр. 96—112). О дальнейшем развитии теории будет сказано ниже, в §§ 3 и 4).

§ 3. ОСНОВЫ КВАНТОВОМЕХАНИЧЕСКОЙ ТЕОРИИ ФОТОЭФФЕКТА В МЕТАЛЛАХ

Несмотря на большие успехи полуфеноменологической теории фотоэффекта в металлах, она не может объяснить величины ряда важнейших параметров (например, ν_0 , α и др.), её нельзя распространить на весь интервал частот и объяснить с её помощью зависимость фототока от интенсивности и поляризации света, предсказать характер зависимости фототока от природы вещества фотокатода, от его структурного состояния и т. п. Современная нерелятивистская квантовая механика, в принципе, даёт возможность объяснить все закономерности фотоэффекта. Однако трудности, возникающие при конкретном решении этой задачи, как уже отмечалось выше, требуют применения существенных упрощающих предположений и аппроксимаций.

При попытке построения последовательной теории фотоэффекта мы сразу должны учесть одно существенное обстоятельство, а именно, что свободный электрон не может целиком поглотить световой квант, ибо при этом невозможно одновременно удовлетворить законам сохранения энергии и импульса. Это легко проиллюстрировать на простейшем примере. Допустим, что покоящийся свободный электрон целиком поглотил фотон с энергией $h\nu$ и импульсом $h\nu/c$. При этом процессе должны одновременно удовлетворяться закон сохранения энергии

$$m_0 c^2 \left[\frac{1}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}} - 1 \right] = h\nu$$

и закон сохранения импульса

$$\frac{m_0 v}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}} = \frac{h\nu}{c}.$$

Здесь c — скорость света, m_0 — масса покоя электрона, v — его скорость. Легко видеть, что эти равенства не могут быть совместимы ни при одной скорости v , меньшей скорости света c . Таким образом, для возможности фотоэлектрического поглощения света необходимо присутствие «третьего» тела, которое даёт возможность удовлетворить одновременно оба закона сохранения. Иными словами, фотоэлектрическое поглощение может иметь место только для

«связанного» электрона, т. е. либо электрона в атоме, либо в какой-нибудь другой системе, например, в кристалле. Этот вывод можно получить также, если рассмотреть выражение для вероятности элементарного акта поглощения фотона свободным электроном. По законам квантовой механики эта вероятность определяется по формулам теории возмущения квадратом матричного элемента оператора энергии взаимодействия света с электроном

$$H_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} = \int \psi_{\mathbf{k}'}^* (\mathbf{A} \nabla \psi_{\mathbf{k}}) d\mathbf{r}, \quad (3.1)$$

где \mathbf{A} — вектор-потенциал электромагнитного поля, а $\psi_{\mathbf{k}'}^*$ и $\psi_{\mathbf{k}}$ — соответственно волновые функции для начального и конечного состояний электрона, энергия которых отличается точно на величину энергии светового кванта $h\nu$. В случае свободного электрона волновые функции $\psi_{\mathbf{k}'}^*$ и $\psi_{\mathbf{k}}$ даются плоской волной $\exp[-2\pi i(\mathbf{k}' \cdot \mathbf{r})]$ и $\exp[2\pi i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r})]$, поэтому матричный элемент в (3.1) с точностью до постоянных множителей равен интегралу

$$H_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \sim \int \exp 2\pi i \mathbf{r} (\mathbf{k} - \mathbf{k}') d\mathbf{r}, \quad (3.2)$$

который точно равен нулю при $\mathbf{k} \neq \mathbf{k}'$ в силу периодического характера подинтегрального выражения. Таким образом, вероятность полного поглощения света свободным электроном действительно равна нулю. Если же вместо волновых функций свободного электрона в (3.1) и (3.2) подставить функции связанного электрона, то получится результат, отличный от нуля, т. е. конечная вероятность фотоэлектрического поглощения.

Вентцель¹⁵ пытался преодолеть затруднение с нарушением законов сохранения не путём отказа от модели свободных электронов, а путём учёта затухания световой волны вследствие её поглощения в металле. В этом случае вектор-потенциал электромагнитного поля световой волны будет иметь экспоненциальный множитель e^{-xz} , описывающий затухание волны в направлении нормали z к плоскости поверхности металла xu . Поэтому вместо формулы (3.2) будем иметь другую формулу:

$$H_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \sim \int \exp [2\pi i (k_z - k'_z) z - xz] dz,$$

которая не содержит чисто периодической функции под интегралом, и поэтому матричный элемент и при $\mathbf{k} \neq \mathbf{k}'$ в общем случае отличен от нуля. Однако, как указали И. Е. Тамм и С. П. Шубин¹⁶, теория Вентцеля не свободна от существенных возражений, ибо в ней, как в микроскопической теории, вычисляется вероятность элементарного акта фотопроцесса с помощью макроскопически введённого коэффициента поглощения, который сам существенно определяется элементарными актами фотопоглощения. Кроме того, эта

теория предсказывает, что для тонких слоёв металла (прозрачных для света) фотоэффект должен резко уменьшаться, что явно противоречит опытам с тонкими плёнками металлов⁸. Эта теория даёт также неправильные предсказания о независимости величины фототока от поляризации света.

Фрейлих¹⁷, отмечая трудности с трактовкой электромагнитного поля внутри металла, предложил рассмотреть настолько тонкий слой металла, чтобы можно было полностью пренебречь поглощением света в нём. При этом Фрейлих предполагает, что скачок потенциала у границы металла связывает электроны, и учёт этого скачка потенциала должен ликвидировать трудность с законами сохранения импульса.

Несмотря на важность работ Вентцеля и Фрейлиха, началом последовательной квантовомеханической теории внешнего фотоэффекта в металлах и в кристаллах следует признать известную работу И. Е. Тамма и С. П. Шубина¹⁶. Эти авторы прежде всего ставят перед собой вопрос, какая причина делает вообще возможным поглощение световых квантов электронами проводимости металла, и, в частности, фотоэффект. Если ограничиться рассмотрением случая видимого и ультрафиолетового света, то Тамм и Шубин указали на две причины такого поглощения света: 1) на наличие скачка потенциала на границе металл — вакуум, в силу чего электронные волновые функции экспоненциально затухают вне металла (что совершенно не учитывал Вентцель); 2) на связь электронов проводимости с периодическим полем ионной решётки металла. Первый эффект Тамм и Шубин называли поверхностным, а второй — объёмным. Оба эффекта обуславливают как поглощение света, так и испускание фотоэлектронов, однако для поглощения решающую роль играет объёмный эффект, а для испускания электронов — поверхностный. Действительно, в поверхностном слое металла ($\sim 10^{-7}$ см) поглощается примерно лишь одна тысячная доля всей энергии света; при этом на каждые 10 квантов вылетает 1 фотоэлектрон; таким образом, фотоэлектрический выход составляет величину $\sim 10^{-4}$. Поэтому, хотя поверхностное поглощение света металлом сравнительно очень невелико по сравнению с его полным поглощением в объёме металла и не существенно при рассмотрении оптических свойств металла, но оно очень важно для фотоэлектрического эффекта. Остальные фотоны поглощаются внутри металла; они могут выбить электроны из металла в вакуум лишь при больших частотах, превышающих «вторую красную границу» ν_0' , гораздо большую, чем первая граница ν_0 , существенная для поверхностного эффекта. Как показали Тамм и Шубин, это вытекает из правил отбора для «оптических» переходов в кристалле.

При расчёте поверхностной части внешнего фотоэффекта по Тамму и Шубину можно, в первом приближении, не учитывать

периодического потенциала решётки металла и пользоваться моделью свободных электронов. Трудность с удовлетворением законов сохранения снимается при этом тем, что скачок потенциала на границе кристалла и экспоненциальный спад волновой функции электрона в вакууме делают электроны металла у границы «связанными». Основываясь на этих представлениях, Тамм и Шубин воспользовались простейшей моделью для расчёта фототока поверхностной части эффекта. Трудность, возникающая при этом расчёте, связана с тем, что нам не известна точная форма потенциального барьера, а также влияние сил изображения вне металла. Форма барьера должна существенным образом влиять на число фотоэлектронов, рождающихся под действием света в тонком поверхностном слое. Однако в первом приближении можно, повидимому, считать, что форма барьера не очень существенно скажется на общем характере фотоэффекта. Существенное влияние форма барьера может иметь для области частот, близких к красной границе. Расчёт поверхностного эффекта Тамма и Шубина, подробно изложенный в работе Д. И. Блохинцева¹⁸, был затем уточнён Митчеллом¹⁹. Ниже дано изложение работы последнего.

Действие электромагнитного поля будем считать малым возмущением по сравнению с высотой потенциального барьера и применим метод теории возмущений. В работе Митчелла показано, что последний можно применять как в стационарной, так и в нестационарной форме. Ниже будет изложен вариант расчёта по стационарному методу. Метод же вариации постоянных был впервые использован при описании фотоэффекта Таммом и Шубиным¹⁶ (в этом обзоре он будет использован в § 6).

Волновое уравнение электрона, движущегося в потенциальном поле V и в поле световой волны, описываемом вектором-потенциалом A , имеет вид

$$\frac{\hbar^2}{2m} \Delta u + \frac{\hbar}{i} \frac{\partial u}{\partial t} - Vu = -\frac{ie\hbar}{mc} (A \nabla u). \quad (3.3)$$

Совмещая плоскую поверхность металла, заполняющего всё бесконечное полупространство для $x \leq 0$, с плоскостью $x = 0$, примем для зависимости потенциальной энергии от x форму с резким скачком на границе:

$$\left. \begin{aligned} V &= -\hbar\omega_a & (x < 0), \\ V &= 0 & (x > 0). \end{aligned} \right\} \quad (3.4)$$

Невозмущённая стационарная волновая функция электрона в отсутствии света ($A = 0$) даётся известным выражением

$$u_0 = u_k = \psi_k e^{\frac{iE_k t}{\hbar}}, \quad (3.5)$$

и уравнение (3.3) принимает вид:

$$\Delta\psi_k + \frac{2m}{\hbar^2}(E_k - V)\psi_k = 0. \quad (3.6)$$

Поскольку оператор потенциальной энергии V зависит только от координаты x , то переменные в (3.6) разделяются. Уравнение (3.6) следует решать для связанных состояний с отрицательной энергией, т. е. для таких, у которых

$$E_k < 0 \leq E_k + \hbar\omega_a. \quad (3.7)$$

Кроме того, должно выполняться обычное условие конечности функции ψ_k во всём пространстве, а также условие непрерывности этой функции и её производной $\frac{\partial\psi_k}{\partial x}$ на плоскости $x=0$. Введём, далее, три величины k_x , k_y , k_z , удовлетворяющие равенству

$$\frac{2m}{\hbar^2}(E_k + \hbar\omega_a) = k_x^2 + k_y^2 + k_z^2, \quad (3.8)$$

а также введём обозначения

$$p = (\mu\omega_a - k_x^2)^{1/2}, \quad \mu = \frac{2m}{\hbar}, \quad (3.9)$$

где p обозначает арифметическое (положительное) значение корня. При условии (3.7) решения уравнения (3.6) будут иметь вид:

$$\left. \begin{aligned} \psi_k &= \alpha_k (e^{-ik_x x} + a_k e^{ik_x x}) e^{i(k_y y + k_z z)} & (x < 0), \\ \psi_k &= \alpha_k b_k e^{-px} e^{i(k_y y + k_z z)} & (x > 0), \end{aligned} \right\} \quad (3.10)$$

где α_k — произвольная постоянная, определяемая из условий «сшивания» решений (3.10) на плоскости $x=0$:

$$b_k = 1 + a_k; \quad pb_k = ik_x(1 - a_k). \quad (3.11)$$

Из (3.10) следует, что значения k_x , k_y и k_z вещественны, а k_x , кроме того, только положительны.

Допуская, далее, что амплитуда световой волны мала, т. е. имеет место условие $\left| \frac{ie\hbar}{mc}(\mathbf{A} \nabla) u \right| \ll Vu$, можно применить для решения полного уравнения (3.3) теорию возмущений и искать его решение в виде суммы нулевого решения, определяемого по (3.5) и (3.10), и малой добавки v , т. е.

$$u = u_k + v. \quad (3.12)$$

Пренебрегая членами второго порядка малости и учитывая уравнение (3.6), находим уравнения для первого приближения теории возмущений:

$$\frac{\hbar^2}{2m} \Delta v + \frac{\hbar}{i} \frac{\partial v}{\partial t} - Vv = -\frac{ie\hbar}{mc} (\mathbf{A} \nabla u_k). \quad (3.13)$$

Принимаем, что вектор-потенциал имеет вид:

$$\mathbf{A} = 2\mathbf{a} \cos \omega \left\{ t + \frac{x \cos \theta + y \sin \theta}{c} \right\}, \quad (3.14)$$

где θ — угол падения и \mathbf{a} — постоянный вектор. Заменяя косинус через показательные функции, легко видеть, что правая часть (3.13) и, следовательно, функция v распадается на два слагаемых, имеющих временные множители вида $\exp \left[i \frac{(E_k \pm \hbar \omega) t}{\hbar} \right]$. Опуская член излучения с $-\hbar \omega$, находим:

$$v = \Phi(x, y, z) \exp \frac{i(E_k + \hbar \omega) t}{\hbar}, \quad (3.15)$$

где функция $\Phi(x, y, z)$ удовлетворяет уравнению

$$\begin{aligned} \Delta \Phi + \frac{2m}{\hbar^2} (E_k + \hbar \omega - V) \Phi = \\ = - \frac{ie}{c\hbar} (\mathbf{a}, \nabla \psi_k) \exp \left[i \omega \frac{x \cos \theta + y \sin \theta}{c} \right]. \end{aligned} \quad (3.16)$$

Правая часть выражения (3.16) распадается на сумму трёх слагаемых, содержащих соответственно a_x , a_y , a_z , которые можно считать независимыми, поскольку угол падения θ и плоскость поляризации световой волны могут изменяться независимо. Поэтому функцию Φ можно также искать в виде суперпозиции трёх слагаемых:

$$\Phi = \lambda_x \Phi_x + \lambda_y \Phi_y + \lambda_z \Phi_z, \quad (3.17)$$

где λ_i — постоянные, а Φ_i соответствуют a_i ($i = x, y, z$).

Займёмся, прежде всего, нахождением Φ_x . Введём сокращённые обозначения:

$$\begin{aligned} \lambda_x = - \frac{2ie}{\hbar c} a_x \alpha_k, \quad q = (k_x^2 + \mu \omega)^{1/2}; \\ r = \{k_x^2 + \mu(\omega - \omega_a)\}^{1/2}. \end{aligned} \quad (3.18)$$

Здесь под корнями понимаются их арифметические значения и r поэтому полагается вещественным. Таким образом, из (3.16) и (3.17) получаем уравнения для Φ_x :

$$\begin{aligned} \Delta \Phi_x + (q^2 + k_y^2 + k_z^2) \Phi_x = -ik_x [e^{-ik_x x} - a_k e^{ik_x x}] e^{i(k_y y + k_z z)} \times \\ \times \exp \left(i \omega \frac{x \cos \theta + y \sin \theta}{c} \right) \quad (x < 0), \end{aligned} \quad (3.19)$$

$$\begin{aligned} \Delta \Phi_x + (r^2 + k_y^2 + k_z^2) \Phi_x = -pb_k e^{-px} e^{i(k_y y + k_z z)} \times \\ \times \exp \left(i \omega \frac{x \cos \theta + y \sin \theta}{c} \right) \quad (x > 0). \end{aligned} \quad (3.20)$$

В этих выражениях можно пренебречь членами, содержащими ω/c , по сравнению с k_x и k_y , поскольку порядок величины ω/c для видимого света равен 10^3 см^{-1} , а величина k_x для электронов, которые лежат у спада Ферми и имеют в настоящем рассмотрении наибольшее значение, равна 10^8 см^{-1} . Частные интегралы уравнений (3.19) и (3.20) зависят от y и z через множители $\exp[i(k_y y + k_z z)]$. Для того чтобы эти интегралы удовлетворяли условию «сшивания» при $x=0$, необходимо их представить как суперпозицию падающей и отражённой волн, распространяющихся вдоль оси x . А именно:

$$\Phi_x = \left\{ c_x e^{iqx} - \frac{ik_x}{\mu\omega} (e^{-ik_x x} - a_k e^{ik_x x}) \right\} e^{i(k_y y + k_z z)} \quad (x < 0), \quad (3.21)$$

$$\Phi_x = \left\{ b_x e^{-irx} - \frac{pb_k}{\mu\omega} e^{-px} \right\} e^{i(k_y y + k_z z)} \quad (x > 0), \quad (3.22)$$

где b_x и c_x — постоянные, определяемые из условий непрерывности при $x=0$:

$$\left. \begin{aligned} c_x - \frac{ik_x}{\mu\omega} (1 - a_k) &= b_x - \frac{pb_k}{\mu\omega}, \\ iq c_x - \frac{k_x^2}{\mu\omega} (1 + a_k) &= -ir b_x + \frac{p^2 b_k}{\mu\omega}. \end{aligned} \right\} \quad (3.23)$$

Исключая c_x и используя (3.11), получим:

$$b_x = \frac{\omega a b_k}{i\omega(q+r)} = \frac{2k_x(p - ik_x)}{\mu\omega(q+r)}. \quad (3.24)$$

Функции Φ_y и Φ_z определяются аналогичным образом. Однако, если опять пренебречь величиной ω/c , то в этих случаях уравнения, аналогичные (3.19) и (3.20), будут иметь в правых частях выражения $\frac{\partial \psi_k}{\partial y}$ и $\frac{\partial \psi_k}{\partial z}$ в обоих интервалах $x < 0$ и $x > 0$. Частными интегралами тогда будут выражения $\frac{1}{\mu\omega} \frac{\partial \psi_k}{\partial y}$ или $\frac{1}{\mu\omega} \frac{\partial \psi_k}{\partial z}$; они и их первые производные по x будут непрерывными при $x=0$. Легко проверить, что эти решения не дают ничего для тока. Учёт членов с ω/c даёт небольшие, по сравнению с током, поправки, обусловленные функцией Φ_x .

Вне металла ($x > 0$) полная волновая функция в силу (3.12), (3.10), (3.17) и (3.22) имеет вид:

$$u = \left[\alpha_k b_k e^{-px} e^{\frac{iE_k t}{\hbar}} + \lambda_x \left(b_x e^{-irx} - \frac{pb_k}{\mu\omega} e^{-px} \right) e^{\frac{i(E_k + \hbar\omega)t}{\hbar}} \right] \times \\ \times e^{i(k_y y + k_z z)}, \quad (3.25)$$

если опустить члены с Φ_y и Φ_z , которые содержат множитель e^{-px} .

Подставляя (3.25) в обычное квантовомеханическое выражение для плотности тока $\mathbf{j}_x = \frac{e\hbar}{2mi} \left(u \frac{\partial u^*}{\partial x} - u^* \frac{\partial u}{\partial x} \right)$ и замечая, что ненулевой результат получается только от членов с e^{-irx} , находим:

$$\mathbf{j}_x = \frac{e\hbar r}{m} |\lambda_x b_k|^2, \text{ если } k_x^2 + \mu\omega > \mu\omega_a, \quad (3.26)$$

$$\mathbf{j}_x = 0, \quad \text{если } k_x^2 + \mu\omega \leq \mu\omega_a. \quad (3.27)$$

Полный фототок согласно (2.1) находим суммированием выражения (3.26) по всем электронам проводимости. Для этого умножим (3.26) на величину $\frac{1}{8\pi^3} f(E) dk_x dk_y dk_z$, где $f(E)$ — функция распределения Ферми, и проинтегрируем по всевозможным состояниям, для которых r — вещественная величина, т. е. $k_x^2 + \mu\omega > \mu\omega_a$. Это даёт

$$J_x = \frac{e^3 a_x \omega_a}{\pi^3 m^2 c^2 \omega^2} \iiint \frac{r k_x^2}{(q+r)^2} \frac{dk_x dk_y dk_z}{\frac{\hbar^2 (k^2 - \mu\bar{\omega})}{2mkT}}, \quad (3.28)$$

1 + e

где $\mu\bar{\omega} = (3\pi^2 n)^{2/3}$, а n — плотность электронов проводимости. Для частот, лежащих не слишком близко к красной границе, можно считать, что при обычных температурах электронный газ является полностью вырожденным и электроны заполняют в \mathbf{k} -пространстве сферу радиуса $k_0 = (\mu\bar{\omega})^{1/2}$. Показательная функция в знаменателе будет равна нулю или бесконечности в зависимости от того, будет ли выражение $k_x^2 + k_y^2 + k_z^2 - \mu\bar{\omega}$ положительным или отрицательным. Переменные k_x и k_y не входят здесь в подинтегральную функцию и поэтому интегрирование по этим координатам легко произвести, вводя полярные координаты $dk_y dk_z = r dr d\varphi$ и интегрируя в пределах от 0 до 2π по φ и от 0 до $(\mu\bar{\omega} - k_x^2)^{1/2}$ по r . Используя второе и третье из уравнений (3.18), находим для тока (3.28):

$$J_x = \frac{e^3 a_x \omega_a}{\pi^3 m^2 c^2 \omega^2} \times \int_{0, [\mu(\omega_a - \omega)]^{1/2}}^{(\mu\bar{\omega})^{1/2}} \frac{k_x^2 (\mu\bar{\omega} - k_x^2) \{k_x^2 + \mu(\omega - \omega_a)\}^{1/2}}{\{ (k_x^2 + \mu\omega)^{1/2} + [k_x^2 + \mu(\omega - \omega_a)]^{1/2} \}^2} dk_x, \quad (3.29)$$

где нижний предел равен 0 при $\omega > \omega_a$ и $[\mu(\omega_a - \omega)]^{1/2}$ при $\omega < \omega_a$.

Если свет поляризован так, что вектор напряжённости электрического поля расположен в плоскости падения, то

$$\mathbf{a} = |\mathbf{a}| (-\sin \theta, \cos \theta, 0), \quad (3.30)$$

и, следовательно, поток световой энергии, падающий на поверхность металла, будет равен

$$\frac{\omega^2}{2\pi c} \cos \theta |a|^2 = \frac{\omega^2 \cos \theta a_x^2}{2\pi c \sin^2 \theta}. \quad (3.31)$$

Поделив выражение (3.28) на (3.31), получим чувствительность фотокатода, выраженную в электронах на 1 см²:

$$P = \frac{2\pi e^3 \omega_a \sin^2 \theta}{m^2 c \cos \theta} \times \\ \times \iiint \frac{2}{8\pi^3} \frac{k_x^2}{\omega^4 (k_x^2 + \mu\omega)^{1/2}} \frac{4(k_x^2 + \mu\omega)^{1/2} [k_x^2 + \mu(\omega - \omega_a)]^{1/2}}{\{(k_x^2 + \mu\omega)^{1/2} + [k_x^2 + \mu(\omega - \omega_a)]^{1/2}\}} f_0(E) dk. \quad (3.32)$$

Первый множитель в подынтегральном выражении пропорционален вероятности элементарного фотовозбуждения электрона проводимости, а второй является коэффициентом прозрачности потенциального барьера. Следует напомнить, что этот вывод получен здесь в предположении прямоугольного барьера. Макинсон²⁰ доказал справедливость такого разбиения сомножителей в выражении (3.32) и для барьера произвольной формы. В работе Хилла²¹ и других были также учтены при расчёте силы электрического изображения.

Формула (3.32), так же как и формулы (24.23) у Бете и Зоммерфельда²², не является вполне точной и, в частности, при касательном падении света ($\theta = \pi/2$) приводит к расходящемуся результату. Этот недостаток теории можно легко устранить, если ввести поправку на отражение света, предполагая, что интенсивности проходящей и отражённой волн света можно вычислить по макроскопической электродинамике, пользуясь оптическими постоянными, и что отражение происходит строго на поверхности металла.

Пользуясь изложенным выше методом расчёта и вводя символы a_i , a_r , a_t для обозначения векторных потенциалов соответственно для падающего, отражённого и проходящего света (если учесть, конечно, показательный множитель), вместо (3.23) получим:

$$\left. \begin{aligned} c_x - \frac{ik_x}{\mu\omega} (1 - a_k) &= b_x - \frac{pb_k}{\mu\omega} \frac{a_{ix} + a_{rx}}{a_{tx}}, \\ iq c_x - \frac{k_v^2}{\mu\omega} (1 + a_k) &= -ir b_x + \frac{p^2 b_k}{\mu\omega} \frac{a_{ix} + a_{rx}}{a_{tx}}. \end{aligned} \right\} \quad (3.33)$$

Исключая из (3.33) c_x , находим:

$$b_x = \frac{(k_v^2 - ipq) + p(p + iq)(a_{ix} + a_{rx})a_{tx}}{i\mu\omega(q + r)} b_k, \quad (3.34)$$

где принято во внимание, что

$$\lambda_x = -\frac{2ie}{\hbar c} a_{tx} \alpha_k. \quad (3.35)$$

Используя выражение (3.34), получаем для фототока вместо (3.29):

$$J_x = \frac{e^3 \omega_a}{\pi^3 m^2 c^2 \omega^2} \int_{0, [\mu(\omega_a - \omega)]^{1/2}}^{(\mu\omega)^{1/2}} \frac{k_x^2 (\mu\omega - k_x^2) r}{(q+r)^2} \times \\ \times \frac{|(k_x^2 - ipq) + p(p+iq)(a_{ix} + a_{rx})|^2}{\mu^2 \omega_a^2} dk_x. \quad (3.36)$$

Это выражение при $a_{ix} = a_{tx} = a_x$, $a_{rx} = 0$ переходит в (3.29). Если принять во внимание условия непрерывности на границе металла ($x=0$)

$$\left. \begin{aligned} a_{iy} + a_{ry} &= a_{ty}, \\ a_{iz} + a_{rz} &= a_{tz}, \end{aligned} \right\} \quad (3.37)$$

то можно легко показать, что y - и z -составляющие вектора-потенциала не дают вклада в ток. Рассматривая случай, при котором вектор электрического поля расположен в плоскости падения, и используя условия непрерывности тангенциальных слагающих напряженности электрического и магнитного полей на поверхности металла, находим для векторов-потенциалов выражения

$$\left. \begin{aligned} \mathbf{A}_i &= (a_{ix}, -a_{ix} \operatorname{ctg} \theta, 0) \exp i\omega(x \cos \theta + y \sin \theta + ct)/c, \\ \mathbf{A}_r &= (a_{rx}, a_{rx} \operatorname{ctg} \theta, 0) \exp i\omega(-x \cos \theta + y \sin \theta + ct)/c, \\ \mathbf{A}_t &= \left(a_{tx}, -a_{tx} \frac{n-ix}{\sin \theta}, 0 \right) \exp i\omega((n-ix)x + y \sin \theta + ct)/c, \end{aligned} \right\} \quad (3.38)$$

где

$$\left. \begin{aligned} \frac{a_{rx}}{a_{ix}} &= \frac{\sin^2 \theta + (n-ix)^2 - \frac{n-ix}{\cos \theta}}{\sin^2 \theta + (n-ix)^2 + \frac{n-ix}{\cos \theta}}, \\ \frac{a_{tx}}{a_{ix}} &= \frac{2}{\sin^2 \theta + (n-ix)^2 + \frac{n-ix}{\cos \theta}}, \end{aligned} \right\} \quad (3.39)$$

n — показатель преломления и x — показатель поглощения. Из уравнений (3.39) находим, что поток световой энергии, падающий на поверхность, равен

$$\frac{\omega^2 |a_{tx}|^2}{8\pi c \cos \theta \sin^2 \theta} \{ (n^2 + x^2 + \sin^2 \theta) \cos^2 \theta + \\ + 2n \cos \theta (n^2 + x^2 + \sin^2 \theta) + n^2 + x^2 \cos 2\theta \}, \quad (3.40)$$

а поток поглощённой энергии

$$\frac{\omega^2 |a_{tx}|^2}{8\pi c \cos \theta \sin^2 \theta} 4n(n^2 + x^2 + \sin^2 \theta) \cos \theta. \quad (3.41)$$

Таким образом, находим:

$$\frac{a_{ix} + a_{rx}}{a_{tx}} = \sin^2 \theta + (n - ix)^2. \quad (3.42)$$

Разделив (3.36) на (3.40) и (3.41), получим выражение для фотоэмиссии, отнесенной соответственно к единице падающей или поглощённой энергии. Полученные выражения будут конечными при любых углах падения. Окончательную формулу удобно записать, если ввести сокращённые обозначения

$$\omega_g = \omega_a - \bar{\omega}, \quad k_x^2 = \mu \omega_g X^2, \quad \bar{\omega} = \varepsilon \omega_g, \quad \omega = \eta \omega_g; \quad (3.43)$$

тогда окончательно на испускания на единицу падающей энергии в кулонах на калорию (переводной множитель $1,395 \cdot 10^{-2}$) имеем следующее выражение:

$$P = C \left[\frac{\sin^2 \theta \cos \theta \{ (n^2 + x^2)^2 - 2(n^2 - x^2) \cos^2 \theta + \cos^4 \theta \} \zeta_1(\eta) +}{\omega_g \{ (n^2 + x^2 + \sin^2 \theta)^2 \cos^2 \theta + 2n \cos \theta \times \right.} \rightarrow$$

$$\left. + \{ 2(n^2 - x^2 - \cos^2 \theta) + 1 \} \zeta_2(\eta) + n x \zeta_3(\eta) + \zeta_4(\eta) \} \right] \times \frac{1}{(n^2 + x^2 + \sin^2 \theta) + n^2 + x^2 \cos^2 2\theta}, \quad (3.44)$$

где

$$C = \frac{32 e^3}{\pi \hbar^2 c} \cdot 1,395 \cdot 10^{-2} = 4,628 \cdot 10^{13} \quad (3.45)$$

и

$$\zeta_1(\eta) = \frac{1 + \varepsilon + \eta}{(1 + \varepsilon) \eta^4} \times$$

$$\times \int_{0, (1 + \varepsilon - \eta)^{1/2}}^{\varepsilon^{1/2}} \frac{X^2 (\varepsilon - X^2) (1 + \varepsilon - X^2) (X^2 + \eta - 1 - \varepsilon)^{1/2}}{\{ (X^2 + \eta)^{1/2} + (X^2 + \eta - 1 - \varepsilon)^{1/2} \}^2} dX, \quad (3.46)$$

$$\zeta_2(\eta) = \frac{1 + \varepsilon}{1 + \varepsilon + \eta} \zeta_1(\eta), \quad (3.47)$$

$$\zeta_3(\eta) = \frac{4}{\eta^4} \int_{0, (1 + \varepsilon - \eta)^{1/2}}^{\varepsilon^{1/2}} \times$$

$$\times \frac{X^4 (\varepsilon - X^2) (X^2 + \eta - 1 - \varepsilon)^{1/2} (X^2 + \eta)^{1/2} (1 + \varepsilon - X^2)^{1/2}}{\{ (X^2 + \eta)^{1/2} + (X^2 + \eta - 1 - \varepsilon)^{1/2} \}^2} dX, \quad (3.48)$$

$$\zeta_4(\eta) = \frac{1}{\eta^4} \int_{0, (1 + \varepsilon - \eta)^{1/2}}^{\varepsilon^{1/2}} \frac{X^4 (\varepsilon - X^2) (X^2 + \eta - 1 - \varepsilon)^{1/2}}{\{ (X^2 + \eta)^{1/2} + (X^2 + \eta - 1 - \varepsilon)^{1/2} \}^2} dX. \quad (3.49)$$

Формула (3.44) даёт зависимость фотоэмиссии от оптических постоянных металла, угла падения света, граничной частоты и безразмерных интегралов (3.46) — (3.49).

§ 4. СРАВНЕНИЕ С ОПЫТОМ И ДАЛЬНЕЙШЕЕ РАЗВИТИЕ ТЕОРИИ

Приступая к сравнению изложенной выше теории фотоэффекта с опытом, необходимо принять во внимание те существенные упрощения, которые были сделаны при проведении расчётов, и прежде всего упрощение, связанное с выбором потенциального барьера. Можно ожидать, что условия на поверхности металла весьма чувствительны к её структурному состоянию (шероховатость, наличие адсорбированных атомов и т. п.). До сих пор нет ещё исчерпывающих опытных данных, полученных для чистой поверхности металлического кристалла с минимальными структурными нарушениями. Кроме того, нет достаточного количества данных по изучению зависимости фототока от состояния поляризации падающего света.

Митчелл²³ в дальнейшем уточнил приведённые выше формулы, учтя действие периодического поля решётки (путём введения эффективной массы электрона m^* в формулу (3.28)) и заменив величины $\bar{\omega}$ на ω_0 по формуле $\omega_0/\bar{\omega} = m/m^*$. Ширина полосы энергии электронов проводимости стала равной $\hbar\omega_0$ (вместо $\hbar\omega$), и потому плотность этих электронов при неизменном числе их, приходящаяся на единичный интервал в пространстве квазимпульсов, изменяется на величину $\left(\frac{\bar{\omega}}{\omega_0}\right)^{3/2}$. Таким образом, выражение для фототока нужно также умножить на эту величину.

Кроме того, Митчелл учёл шероховатость поверхности кристалла, предположив, что микроскопическая нормаль в каждой точке поверхности наклонена к средней нормали и направляющие косинусы этой «истинной» нормали по отношению к осям x , y , z равны l , m , n . Если через A_x , A_y и A_z обозначить слагающие вектора-потенциала, то его слагающая вдоль микроскопической нормали будет равна $lA_x + mA_y + nA_z$. Таким образом, выражение для фототока, испускаемого с элемента поверхности металла dS , будет отличаться, например, от (3.36) тем, что величина

$$|a_{tx}(k^2 - ipq) + (a_{ix} + a_{rx})p(p + iq)|^2$$

должна быть заменена величиной

$$|(la_{tx} + ma_{ty} + na_{tz})(k^2 - ipq) + p(p + iq) \times \\ \times \{l(a_{ix} + a_{rx}) + m(a_{iy} + a_{ry}) + n(a_{iz} + a_{rz})\}|^2. \quad (4.1)$$

$\tilde{\omega}$ заменяется величиной ω_0 и добавляется множитель $\left(\frac{\tilde{\omega}}{\omega_0}\right)^{3/2}$. После усреднения по направлениям (l, m, n) члены с произведениями lm, mn, nl выпадут из (4.1) в силу симметрии; также выпадут тангенциальные слагающие тока, и вместо (3.36) получим:

$$J_x = \frac{e^3 \omega_a}{\pi m^2 c^2 \omega^2} \left(\frac{\tilde{\omega}}{\omega_0}\right)^{3/2} \times \\ \times \int\limits_{0, [\mu(\omega_a - \omega)]^{1/2}}^{(\mu\omega_0)^{1/2}} dk_x \frac{k_x^2 (\mu\omega_0 - k_x^2) \{k_x^2 + \mu(\omega - \omega_a)\}^{1/2}}{[(k_x^2 + \mu\omega)^{1/2} + \{k_x^2 + \mu(\omega - \omega_a)\}^{1/2}]^2} \times \\ \times \left[\frac{\cos^2 \tilde{\omega} |(k_x^2 - ipq) a_{tx} + p(p + iq)(a_{ix} + a_{rx})|^2}{\mu^2 \omega_a^2} + \right. \\ \left. + \frac{1}{2} \sin^2 \tilde{\omega} \{|a_{ty}|^2 + |a_{tz}|^2\} \right], \quad (4.2)$$

где $\tilde{\omega}$ — параметр, характеризующий шероховатость поверхности.

Получим теперь фотоэмиссию P на единицу падающей энергии для поляризованного света с электрическим вектором, параллельным (E_{\parallel}) или перпендикулярным (E_{\perp}) плоскости падения. Обозначим её соответственно через P_{\parallel} и P_{\perp} . Поток энергии, падающий на поверхность металла, дается формулой (3.31). Используя, кроме того, формулу (3.38), находим:

$$P_{\parallel} = \frac{2e^3 \omega_a \sin^2 \theta}{m^2 c \omega^4 \cos \theta} \left(\frac{\tilde{\omega}}{\omega_0}\right)^{3/2} \times \\ \times \int\limits_{0, [\mu(\omega_a - \omega)]^{1/2}}^{(\mu\omega_0)^{1/2}} dk_x \frac{k_x^2 (\mu\omega_0 - k_x^2) \{k_x^2 + \mu(\omega - \omega_a)\}^{1/2}}{[(k_x^2 + \mu\omega)^{1/2} + \{k_x^2 + \mu(\omega - \omega_a)\}^{1/2}]^2} \times \\ \times \left[\frac{\cos^2 \tilde{\omega}}{\mu^2 \omega_a^2} \left| (k_x^2 - ipq) \frac{a_{tx}}{a_{ix}} + p(p + iq) \frac{a_{ix} + a_{rx}}{a_{ix}} \right|^2 + \right. \\ \left. + \frac{1}{2} \sin^2 \tilde{\omega} \frac{n^2 + \chi^2}{\sin^2 \theta} \left| \frac{a_{tx}}{a_{ix}} \right|^2 \right], \quad (4.3)$$

$$\omega_g = \omega_a - \omega_0, \quad k_x^2 = \mu \omega_g X^2, \quad \omega_0 = \varepsilon \omega_g, \quad \omega = \eta \omega_g.$$

Используя выражения (3.39), (3.42) и несколько видоизменённую фор-

мулу (3.43) с заменой $\bar{\omega}$ на ω_0 , получаем обобщение формулы (3.44):

$$\begin{aligned}
 P_{\parallel} = & \\
 = C & \frac{\varepsilon^{-3/2} \omega_g^{-1} \left(\frac{\bar{\omega}}{\omega_g} \right)^{3/2}}{(n^2 + x^2 + \sin^2 \theta)^2 \cos^2 \theta + 2n(n^2 + x^2 + \sin^2 \theta) \cos \theta + n^2 + x^2 \cos^2 2\theta} \times \\
 \times & \{ \cos^2 \bar{\omega} \sin^2 \theta \cos \theta [(n^2 + x^2)^2 - 2(n^2 - x^2) \cos^2 \theta + \cos^4 \theta] \zeta_1(\eta, \varepsilon) + \\
 & + \{ 2(n^2 - x^2 - \cos^2 \theta) + 1 \} \zeta_2(\eta, \varepsilon) + nx \zeta_3(\eta, \varepsilon) + \zeta_4(\eta, \varepsilon) \} + \\
 & + \frac{1}{2} \sin^2 \bar{\omega} \cos \theta (n^2 + x^2) [\zeta_2(\eta, \varepsilon) + \zeta_4(\eta, \varepsilon)] \}, \quad (4.4)
 \end{aligned}$$

где использованы обозначения (3.45) — (3.49).

В случае E_{\perp} сохраняются лишь z -составляющие вектора-потенциала. Граничные условия при этом записываются в виде

$$\left. \begin{aligned} \frac{a_{rz}}{a_{iz}} &= - \frac{(n - ix) - \cos \theta}{(n - ix) + \cos \theta}, \\ \frac{a_{tz}}{a_{iz}} &= \frac{2 \cos \theta}{(n - ix) + \cos \theta}, \end{aligned} \right\} \quad (4.5)$$

и для фотоземиссии P_{\perp} получаем:

$$\begin{aligned}
 P_{\perp} = C \frac{1}{\omega_g} \left(\frac{\bar{\omega}}{\omega_g} \right) \varepsilon^{-3/2} \{ \zeta_2(\eta, \varepsilon) + \zeta_4(\eta, \varepsilon) \} \times \\
 \times \frac{1/2 \sin^2 \bar{\omega} \cos \theta}{n^2 + x^2 + 2n \cos \theta + \cos^2 \theta}. \quad (4.6)
 \end{aligned}$$

Выясним прежде всего зависимость P_{\parallel} и P_{\perp} от угла падения θ при постоянной частоте света. При нормальном падении света ($\theta = 0$) $P_{\perp} = P_{\parallel}$. С ростом угла P_{\perp} уменьшается монотонно до нуля. Эмиссия P_{\parallel} , наоборот, возрастает сначала медленно, затем проходит через максимум при $\theta = 70^\circ$, а затем падает до нуля при $\theta = \pi/2$. Эти выводы теории находятся в хорошем качественном согласии с опытом (см., например,^{11а}, стр. 131—132). Количественное согласие в значительной мере зависит от шероховатости поверхности (т. е. от величины $\bar{\omega}$), которая введена в теорию чисто феноменологически. Для того чтобы получить количественно приемлемые результаты, необходимо предположить очень большую шероховатость ($\bar{\omega} \sim 45^\circ$).

Митчелл²³, так же как и Тамм и Шубин¹⁶, провёл сравнение теоретической кривой $P(\nu)$ с экспериментальными данными. Теоретические кривые (3.44) или (4.4) (но не 4.6!) имеют максимум. Однако его можно наблюдать в доступной части видимого спектра лишь для щелочных металлов, у которых относительно мала работа выхода. До сих пор нет исчерпывающих данных по точным и одновременным измерениям оптических постоянных и граничных частот этих металлов, тщательно очищенных от газов и искажений решётки на поверхности. Поэтому можно рассчитывать лишь на качественное согласие теории и опыта. Принимая для калия работу выхода 2,05 эв и оптические константы равными $n = 0,068$, $x = 1,5$, получаем теоретические кривые для $\theta = 60^\circ$, $\omega_g = \bar{\omega} = 5,10^{14}$

и $\bar{\omega} = 45^\circ$, $\epsilon = 0,4$ и $\epsilon = 0,6$. Эти кривые приведены на рис. 4, где также указан интервал кривых, полученных Клауером²⁴ для чистой поверхности натрия. Хотя теоретические и опытные кривые качественно подобны и порядок величины эффекта предсказывается теорией правильно (при $\epsilon = 0,6 \cdot 10^{-4}$ кулон/кал), но положение максимума на кривой $P(\nu)$ даётся теорией неправильно. Следует заметить, что форма кривой может быть изменена путём вариации оптических постоянных. Следовательно, форму кривой нельзя считать окончательно определённой до тех пор, пока не будут известны точные спектральные зависимости оптических постоянных. В связи с этим обращаем внимание на работы Шифф и Томаса²³ и Макинсона²⁶, в которых делается попытка решить совместно квантовомеханическую задачу оптических свойств и фотоэффекта металлов. Эти авторы подчёркивают, что предположение о резком изменении величины оптических постоянных на поверхности металла является плохим приближением даже в рамках простейшей модели с прямоугольным потенциальным барьером, ибо электронная плотность падает у границы не сразу до нуля, а уменьшается на расстояниях порядка $3 \cdot 10^{-8}$ см от своего максимального значения внутри металла до исчезающе малой величины вне его. Шифф и Томас²⁵ дали квантовомеханический расчёт металлического отражения. Однако их вычисления оказались столь сложными, что невозможно было провести количественные оценки и сравнение с опытом. Поэтому Макинсон²⁶ предложил полуклассическую теорию металлического отражения, которая очень близка по своим результатам к квантовой теории, но вместе с тем и гораздо проще последней. Макинсон вычисляет зависимость электронной плотности вблизи прямоугольного барьера от расстояния вдоль нормали к поверхности металла. Затем он определяет поле световой волны в области спада электронной плотности и оптические постоянные. При расчёте фототока Макинсон обращает внимание на одну неточность в вычислениях Митчелла^{19, 23}, связанную с тем, что последний пренебрёг в правой

части своего уравнения теории возмущения (3.13) членами с $\text{div } \mathbf{A}$ и скалярным потенциалом Φ . Если принять, что $\Phi = 0$ (как это делают Митчелл и Шифф и Томас), то $\text{div } \mathbf{A} \neq 0$ (ибо $\text{div } \mathbf{A} + \frac{1}{c} \frac{\partial \Phi}{\partial t} = 0$).

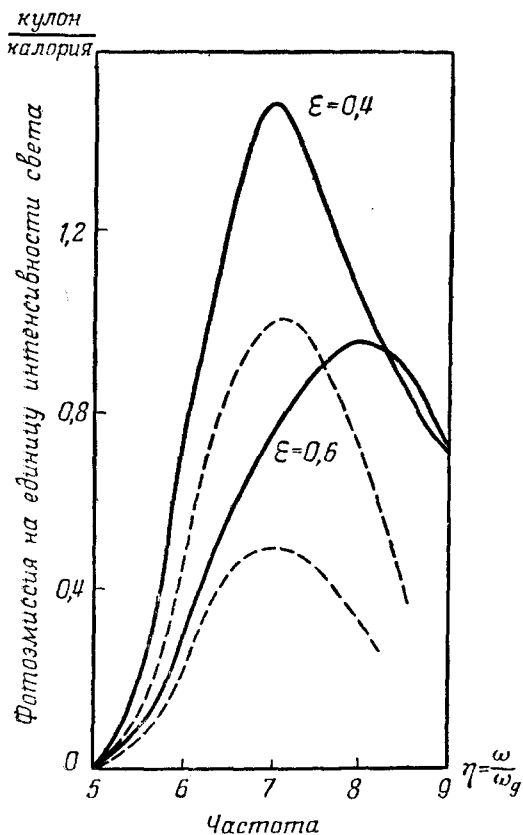


Рис. 4. Теоретические (сплошные) и опытные (пунктирные) кривые спектрального распределения фототока для натрия (неполяризованный свет).
(По данным работы ²³.)

Однако поправки Макинсона качественно не изменяют результатов Митчелла и не улучшают количественного совпадения теоретических и экспериментальных кривых спектрального распределения фототока. Макинсон указывает на необходимость отказа от упрощений, связанных с использованием потенциального барьера прямоугольной формы.

Попытки обобщения теоретических расчётов фотоэффекта, связанных с отказом от упрощённой, прямоугольной формы потенци-

ального барьера, а также с учётом сил электрического изображения, делались неоднократно²⁷. Упомянем здесь уже цитированные работы Майерса^{20а}, Хилла²¹ и Макинсона^{20б}. Однако в них, даже в наиболее детальной работе Макинсона, не было достигнуто большого прогресса по сравнению с более простыми расчётами, в которых использовалась простая модель прямоугольного барьера.

Наиболее детально вопрос о влиянии формы потенциального барьера на свойства поверхностного фотоэффекта в металлах был проанализирован в работе Букингейма²⁸. Последний учёл указанную Бардиным²⁹ зависимость эффективного потенциального барьера на границе металла от импульса падающего на границу электрона. Эта зависимость обусловлена обменным и корреляционным взаимодействием электронов внутри металла. Букингейм показал, что учёт этого обстоятельства существенно снижает (примерно в 3 раза) абсолютную величину предсказанного теорией значения фотоэмиссии для щелочных металлов. Однако форма теоретических кривых и при этом расчёте плохо отражает ход опытных кривых спектрального распределения, особенно вблизи красной границы. Интересным моментом в работе Букингейма являются указания автора на новые возможности экспериментального изучения зависимости коэффициента прозрачности потенциального барьера для электронов, участвующих в фото- или термоэмиссии, от их энергии, что может дать ценные сведения и о форме потенциального барьера (см.²⁸ § 5).

Митчелл²³ провёл также расчёт распределения выбитых из металла фотоэлектронов по энергиям $g(E)$. Для этой цели в формуле (3.28) следует перейти от переменных k_x, k_y, k_z к сферическим координатам:

$$\left. \begin{aligned} \left(\frac{2m}{\hbar} E\right)^{1/2} \cos \vartheta &= [k_x^2 + \mu(\omega - \omega_a)]^{1/2}, \\ \left(\frac{2m}{\hbar} E\right)^{1/2} \sin \vartheta \cos \varphi &= k_y, \quad \left(\frac{2m}{\hbar} E\right)^{1/2} \sin \vartheta \sin \varphi = k_z, \end{aligned} \right\} \quad (4.7)$$

где E — полная энергия, равная

$$E = \frac{\hbar^2}{2m} (k_x^2 + k_y^2 + k_z^2) + \hbar(\omega - \omega_a). \quad (4.8)$$

Производя интегрирование по углу φ от 0 до 2π и переходя от θ к новой переменной $y = \cos \theta$, находим:

$$\begin{aligned} g(E) &\approx \\ &\approx \frac{E^{3/2}}{1 + \exp \left[\frac{E - \hbar(\omega - \omega_g)}{kT} \right]} \int_0^1 \frac{y^2 [Ey^2 + \hbar(\omega_a - \omega)]^{1/2} dy}{\left[E^{1/2} y + (Ey^2 + \hbar\omega_a)^{1/2} \right]^2}, \end{aligned} \quad (4.9)$$

где нижний предел равен 0, если $\hbar\omega < \hbar\omega_a$, или $\left[\frac{\hbar(\omega - \omega_a)}{E} \right]^{1/2}$, если $\hbar\omega > \hbar\omega_a$. Функция (4.9) приведена на рис. 5а для случая натрия ($\omega_g = 2\pi \cdot 5 \cdot 10^{14}$, $\omega_a = 2\pi \cdot 10^{15}$, $T = 300^\circ \text{K}$). На рис. 5б приводятся данные опытов Брэди³⁰, произведённых с хорошо обезгаженным фотокатодом. Между теорией и опытом имеется и в данном случае хорошее качественное согласие. Наиболее вероятная энергия вылетевших электронов на этих кривых лежит очень близко к максимальной. Митчелл отметил, что можно вычислить распределение фотоэлектронов по энергии, получаемое в опытах,

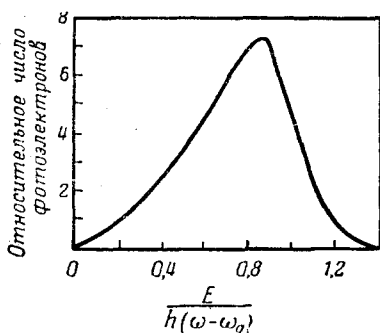


Рис. 5а. Теоретическая кривая распределения фотоэлектронов по полной энергии. (По расчёту Митчелла²³.)

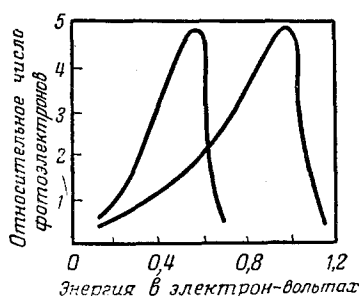


Рис. 5б. Экспериментальная кривая распределения фотоэлектронов по полной энергии для калия. (По данным работы³⁰.)

по магнитному отклонению фотоэлектронов, а также по значениям энергии, связанной с нормальной составляющей скорости к поверхности металла. В обоих случаях получается неплохое согласие с опытом (см. ²³, § 4,3 и 4,4).

Как уже упоминалось выше, квантовая теория фотоэффекта была обобщена и на случай температур, отличных от 0°K . Впервые такой расчёт провёл Д. И. Блохинцев¹⁸, обобщивший расчёт Тамма и Шубина¹⁶, а более общий расчёт был дан Митчеллом³¹. Митчелл добавочно учёл силы электрического изображения (сглаженная форма потенциального барьера), а также использовал метод вариации постоянных. Окончательное выражение для фототока вблизи граничной частоты ω_0 имеет вид:

$$J_x \approx \left(\frac{kT}{\hbar} \right)^2 \int_0^\infty dy \ln \left[1 + \exp \left\{ -y + \frac{\hbar(\omega - \omega_g)}{kT} \right\} \right]. \quad (4.10)$$

Этот результат можно считать теоретическим обоснованием феноменологической формулы (2.4), полученной Фаулером¹². Позже схема расчётов температурных эффектов была разработана Хаустоном³².

Обобщение теории Тамма и Шубина¹⁶ на случай фотоэффекта в металлах в присутствии внешнего постоянного электрического поля было дано Савельевым³³. Наличие «среза» потенциального барьера, обусловленное действием ускоряющего поля, приводит к тому, что даже при 0° К появляется принципиальная возможность возбуждения фотоэлектронов при сколь угодно малой частоте света (отсутствие красной границы). Для частот $\omega < \omega_a$ Савельев получил формулу, подобную формуле для эмиссии при холодном вырывании электронов полем (Фаулер и Нордгейм³⁴). Для частот $\omega > \omega_a$ формула для фототока очень мало изменяется по сравнению с формулой, рассчитанной без ускоряющего поля. Савельев учёл также влияние сил электрического изображения. Предсказанная им величина смещения эффективной красной границы $\delta\omega = \frac{e\sqrt{F}}{\hbar}$

в красную сторону спектра достаточно хорошо согласуется с опытными данными Лауренса и Линфорда³⁵. В работе Гутта и Муллина³⁶ был повторен вывод формулы Савельева (без ссылки на него) и проведено обобщение на случай температур выше 0° К.

Недавно Макинсон и Букингейм³⁷ вычислили вероятность двойного фотопоглощения и фототок второго порядка. Хотя интенсивность этого тока и очень мала, но этот эффект в некоторых случаях может иметь значение.

Совершенно особые методы расчёта применяются для вычисления фотоэлектрического эффекта с сенситизированных фотоэлектрически активных катодов. Здесь мы ограничимся лишь указанием на некоторые основные работы по теории этого эффекта³⁸⁻⁴².

Теоретическое исследование объёмного фотоэффекта в элементарной полуклассической трактовке было также дано Таммом и Шубиным¹⁶. Они произвели приближённую оценку этого эффекта и нашли, что в области частот, близких к обычной красной границе, и даже значительно выше нее, фототок, обусловленный поглощением света внутри металла, гораздо меньше фототока от поверхностного эффекта. Лишь при частотах выше «второй красной границы» $\omega_{об}$ объёмный эффект становится заметным. А так как в этой области частот поверхностный эффект, наоборот, падает, то объёмный эффект практически и определяет там всю величину фототока. Тамм и Шубин сравнили свой расчёт с данными опытов Шурмана и Тейссига⁴³ и получили удовлетворительное качественное согласие для щелочных металлов.

Более подробный расчёт объёмного фотоэффекта был проведён значительно позже Фаном⁴⁴. Фан воспользовался одноэлектронной квантовой теорией металла, учёл интерференционные условия для квазиимпульсов электронов и получил количественное выражение для спектрального распределения фотоэлектронов. Он учёл также эффект отражения света от поверхности фотокатода. Из спектральной кривой отражения удалось определить эффективную вторую

красную границу, которая в случае натрия и калия оказалась соответственно равной $\nu_{0\text{об}} = 5,91 \cdot 10^{14}$ и $\nu_{0\text{об}} = 5,69 \cdot 10^{14}$. Красная граница поверхностного эффекта для этих металлов соответственно равна $\nu_0 = 5,53 \cdot 10^{14} \text{ сек}^{-1}$ и $\nu_0 = 4,84 \cdot 10^{14} \text{ сек}^{-1}$. Оценка величины фотовыхода, обусловленного объёмным эффектом, для частот, больших второй красной границы, для этих металлов оказывается того же порядка величины, что и для поверхностного эффекта, и согласуется с данными опытов. Кашмен и Бассо⁴⁵ измеряли фотозффект в барии и наблюдали объёмный эффект. Однако в этом металле, имеющем большую величину работы выхода, чем щелочные металлы, максимумы на кривой спектрального распределения фотоэлектронов перекрываются (обе красные границы сравнительно близки). Поэтому для бария уже нельзя отдельно рассматривать поверхностный и объёмный фотозффекты; приходится также отказаться от модели свободных электронов (см. § 7).

§ 5. ПОВЕРХНОСТНЫЙ ФОТОЭФФЕКТ В УПОРЯДОЧИВАЮЩИХСЯ СПЛАВАХ

Известно, что все «аномалии» различных физических свойств упорядочивающихся металлических сплавов обусловлены зависимостью этих свойств от степени дальнего порядка атомов различных компонент сплава по различным узлам кристаллической решётки сплава⁴⁶. Поэтому есть основания ожидать, что должна наблюдаться и аномалия фотозлектрического тока, связанная с резкими изменениями степени дальнего порядка вблизи точки Кюри упорядочивания.

Для обобщения полуфеноменологической теории фотозффекта на случай упорядочивающихся сплавов Соколов⁴⁷ воспользовался предложенной А. А. Смирновым⁴⁸ теорией движения электрона в кристаллической решётке бинарного металлического сплава с произвольным составом и степенью дальнего порядка. В частности, для энергии электрона в объёмно-центрированной кубической решётке сплава Смирнов дал следующее выражение:

$$E(\eta) = w + \epsilon^* + \left(c - \frac{1}{2}\right) \Omega \pm \left[(q - c)^2 \Omega \gamma^2 + 64 \gamma^2 \cos^2 \frac{k_x}{2} \cos^2 \frac{k_y}{2} \cos^2 \frac{k_z}{2}\right]^{1/2}, \quad (5.1)$$

где k_x, k_y, k_z — составляющие квазиимпульса электрона, c — относительная концентрация одной из компонент сплава, η — степень дальнего порядка; $w, \epsilon^*, \Omega, \gamma$ — постоянные, не зависящие от c и η ; параметр $q = 2c$ для $c \leq 1/2$; $q = 1$ для $c \geq 1/2$.

Пользуясь общим выражением для эффективной массы $m_{\text{эфф}} = \frac{\hbar^2}{\partial^2 E / \partial k^2}$, можно определить её для верхней почти заполненной по-

лосы энергии электронов в кристалле:

$$m_{\text{эфф}} = \frac{\hbar^2}{16\gamma^2 a^2} [(q - c)^2 \Omega^2 \eta^2 + 64\gamma^2]^{1/2}, \quad (5.2)$$

где a — постоянная решётки. Число валентных электронов в единице объёма, обладающих составляющей квазиимпульса, перпендикулярной к поверхности образца сплава, определяется хорошо известной формулой типа (2.2), которая в данном случае, в соответствии с формулами (5.1) и (5.2), примет вид

$$n(k_x) dk_x = \frac{dk_x}{8\pi^2 a^3} \int_0^\infty \int_0^{2\pi} \frac{\rho d\rho d\vartheta}{\exp \left\{ \frac{(\gamma - \alpha \eta^2) (k_x^2 + \rho^2) - \epsilon_0}{kT} \right\} + 1}, \quad (5.3)$$

где $\alpha = \frac{(q - c)^2 \Omega^2}{128\gamma^3}$, $\rho^2 = k_y^2 + k_z^2$, ϑ — угол относительно оси, перпендикулярной к поверхности сплава.

Предполагая, что скачок потенциала сплава на границе с вакуумом зависит от степени дальнего порядка, и разлагая его в ряд по этому параметру, получим:

$$W(\eta) = W(0) + \left(\frac{\partial W}{\partial \eta} \right)_0 \eta + \frac{1}{2} \left(\frac{\partial^2 W}{\partial \eta^2} \right)_0 \eta^2 + \dots \quad (5.4)$$

Ниже мы будем интересоваться областью температур, близких к точке Кюри. В этой области температур степень дальнего порядка можно считать малой ($\eta \ll 1$) и во всех расчётах пренебрегать степенями η выше второй. Исходя из эквивалентности узлов кристаллической решётки, нетрудно показать, что линейные члены в выражении (2.2) должны отсутствовать. В самом деле, при замене η на $-\eta$ выражение (5.4) примет вид:

$$W(-\eta) = W(0) - \left(\frac{\partial W}{\partial \eta} \right)_0 \eta + \frac{1}{2} \left(\frac{\partial^2 W}{\partial \eta^2} \right)_0 \eta^2 + \dots \quad (5.5)$$

Далее имеем $W(\eta) = W(-\eta)$, ибо в силу эквивалентности узлов кристаллической решётки физические свойства сплава не должны изменяться при замене η на $-\eta$. Сравнивая (5.4) и (5.5), получаем $\left(\frac{\partial W}{\partial \eta} \right)_0 \eta = 0$, и так как $\eta \neq 0$, то $\left(\frac{\partial W}{\partial \eta} \right)_0 = 0$. Далее на основании общей теории фазовых переходов второго рода⁴⁹ можно заключить, что ниже точки Кюри $\left(\frac{\partial^2 W}{\partial \eta^2} \right)_0 < 0$. Следовательно, если ввести обозначение $\frac{1}{2} \left(\frac{\partial^2 W}{\partial \eta^2} \right)_0 = -W_0 f$, то величина скачка потенциала упорядочивающегося сплава принимает вид:

$$W(\eta) = W_0 (1 - f\eta^2). \quad (5.6)$$

Ясно, что эффективная работа выхода $\chi(\eta)$ также является квадратичной функцией степени дальнего порядка и выражается следующим образом:

$$\chi(\eta) = W(\eta) - \varepsilon(\eta) = \chi_0 - \delta\eta^2, \quad (5.7)$$

где $\delta = W_{\omega f} - \alpha\varepsilon_0$. Пользуясь этой формулой, легко определить «аномалию упорядочивания» эффективной работы выхода сплава:

$$\frac{\Delta\chi(\eta)}{\chi_0} = \frac{\chi_0 - \chi}{\chi_0} = \frac{\delta}{\chi_0} \eta^2. \quad (5.8)$$

Определим число электронов, вырывааемых с поверхности упорядочивающегося сплава при температуре T под действием света частоты ν , близкой к предельной частоте ν_0 . Будем считать, что оно пропорционально числу электронов в единице объёма металлического сплава, имеющих перпендикулярную к поверхности составляющую квазиимпульса, превышающую критическую величину, т. е.

$$(\gamma - \alpha\eta^2)k_x^2 + h\nu = W(\eta).$$

Это число фотоэлектронов, которое мы обозначим через $N_\Phi(\eta)$, определяется выражением

$$N_\Phi(\eta) = \int_0^\infty n(k_x) dk_x. \quad (5.9)$$

$$(\gamma - \alpha\eta^2)k_x^2 = W(\eta) - h\nu$$

Для вычисления $N_\Phi(\eta)$ подставим (5.3) в (5.9) и введём переменную z согласно следующему соотношению:

$$(\gamma - \alpha\eta^2)k_x^2 - W(\eta) + h\nu = kTz. \quad (5.10)$$

В результате получаем:

$$N_\Phi(\eta) = \frac{(kT)^{3/2}}{16\pi^2 a^3 (\gamma - \alpha\eta^2)^{3/2}} \int_0^\infty \frac{\ln \left[1 + \exp \left\{ -z + \frac{h\nu - \chi(\eta)}{kT} \right\} \right]}{\left(z + \frac{W(\eta) - h\nu}{kT} \right)^{1/2}} dz. \quad (5.11)$$

Так как мы рассматриваем значение $h\nu$ вблизи границы фотоэффекта $[h\nu \sim \chi(\eta)]$, то величина $h\nu - \chi(\eta)$ сравнима с kT , т. е. с шириной «максвелловского хвоста» у спада Ферми, в то время как величина $[W(\eta) - h\nu]$ всегда значительно больше kT , а именно порядка граничной энергии электронов сплава. Поэтому в достаточном приближении можно пренебречь величиной z в выражении

$$\left(z + \frac{W(\eta) - h\nu}{kT} \right)^{1/2}.$$

В самом деле, это можно сделать потому, что при больших z числитель подинтегрального выражения (5.11) стремится к нулю, как e^{-z} . Тогда будем иметь:

$$N_{\Phi}(\eta) = \frac{k^2 T^2}{16\pi^2 a^3 (\gamma - \alpha \gamma^2)^{3/2} (W(\eta) - h\nu)^{1/2}} \times \\ \times \int_0^\infty \ln \left[1 + \exp \left\{ -z + \frac{h\nu - \chi(\eta)}{kT} \right\} \right] dz. \quad (5.12)$$

В результате интегрирования (5.12) получаем:

$$N_{\Phi}(\eta) = \frac{k^2 T^2}{(\gamma - \alpha \gamma^2)^{1/2} (W - h\nu)} \Phi_i [x(\eta)], \quad (5.13)$$

где $i=1$ при $x(\eta) = \frac{h\nu - \chi(\eta)}{kT} \leq 0$ и $i=2$ при $x(\eta) \geq 0$; при этом

$$\Phi_1 [x(\eta)] = \frac{1}{16\pi^2 a^2} f_1 [x(\eta)],$$

и

$$\Phi_2 [x(\eta)] = \frac{1}{16\pi^2 a^2} f_2 [x(\eta)],$$

а f_1 и f_2 определены по формулам (2.6) и (2.7).

Подставляя (5.6) в (5.13) и выделяя член с η^2 , получим:

$$N_{\Phi}(\eta) = \frac{2k^2 T^2}{\gamma^{3/2} (W_0 - h\nu)^{1/2}} \Phi_i [x(\eta)] (1 - \Gamma \gamma^2), \quad (5.14)$$

где

$$\Gamma = \frac{W_0 f}{2(W_0 - h\nu)} - \frac{3}{2} \alpha. \quad (5.15)$$

Поскольку фотоэмиссионный ток пропорционален $N_{\Phi}(\eta)$, то можно написать:

$$\frac{j}{T^2 (1 - \Gamma \gamma^2)} = A (W_0 - h\nu)^{-1/2} \Phi_i [x(\eta)], \quad (5.16)$$

где A — постоянная, не зависящая от ν и T .

В формуле (5.16) нас интересует не абсолютное значение фотоэлектрического тока j , а его «аномалия», соответствующая переходу из неупорядоченного состояния в упорядоченное («аномалия упорядочивания»), т. е.

$$\frac{\Delta j}{j_0} = \frac{j_0 - j}{j_0} = D \gamma^2, \quad (5.17)$$

где j_0 есть значение j при $\eta = 0$ и

$$D = \left(\Gamma - \frac{\Phi'_i [x(0)] W_0 f}{\Phi_i [x(0)] kT} \right). \quad (5.18)$$

Коэффициент D является функцией частоты. Поэтому изменение частоты света, вызывающего фотосэфект, обуславливает изменение самого коэффициента D (что должно соответствовать на опыте различным кривым фототока).

Весьма желательно произвести опытную проверку теоретической формулы (5.17) в применении к упорядочивающимся сплавам. Здесь кривые зависимости фотосэлектрического тока от температуры должны иметь характерный излом в точке Кюри, ниже которой должно наблюдаться столь же характерное для упорядочивающихся сплавов понижение кривой (сравним, например, с зависимостью электросопротивления от температуры для Cu_3Au ⁴⁶).

В выражении (5.17) Δj означает разность между фотоэлектрическим током, получаемым при экстраполяции кривой фототока выше точки Кюри j_0 , и фактически наблюдаемым ниже точки Кюри фототоком.

Известно, что для частот, близких к граничной частоте ν_0 , величина $(W - h\nu)^{-1/2}$ практически постоянна и может быть объединена с коэффициентом A . Логарифмируя (5.16), получаем:

$$\begin{aligned} \ln \left[\frac{j}{T^2} (1 + \Gamma \eta^2) \right] &= B + \ln \Phi_i [x(\eta)] = \\ &= B + \ln \Phi_i \left[\frac{h(\nu - \nu_0)}{kT} \right], \end{aligned} \quad (5.19)$$

где B — новая постоянная, не зависящая от температуры и ν .

Формула (5.19) отличается от соответствующего выражения работы ¹² тем, что в левой части под знаком логарифма имеется множитель $(1 + \Gamma \eta^2)$, а в правой части ν_0 является функцией η . Для определения истинной фотоэлектрической границы упорядочивающегося сплава (которая является функцией степени дальнего порядка) следует вычертить теоретическую кривую (правую часть формулы (5.19)) как функцию x . Если теперь нанести опытные значения фототока j в виде функции $\ln \left[\frac{j}{T^2} (1 + \Gamma \eta^2) \right]$ от $h\nu/kT$ и сдвинуть

экспериментальную кривую по горизонтали на $\chi(\eta)/kT$ и по вертикали на величину B , то получим совпадение с теоретической кривой. Смещение по горизонтали даёт граничную частоту ν_0 или χ/h , так как $h\nu_0/kT$ есть точка на оси x на опытной кривой, соответствующая точке $x = 0$ на оси абсцисс на теоретической кривой.

Изложенные выше расчёты не претендуют на количественное описание фотосэфекта в упорядочивающихся сплавах, так как они были проведены в рамках грубой упрощённой модели металла. Тем не менее, повидимому, нет оснований сомневаться в том, что основные качественные выводы о характере влияния порядка на фотоэлектрический эффект соответствуют действительным металлическим сплавам.

§ 6. ФОТОЭЛЕКТРИЧЕСКИЙ ЭФФЕКТ В ФЕРРОМАГНИТНЫХ МЕТАЛЛАХ

А. Элементарная теория

Экспериментальные исследования фотоэлектрических и термоионных свойств ферромагнитного никеля, проведённые Кардвеллом⁵⁰, показали, что: 1) у никеля вблизи точки Кюри наблюдается аномальный ход фотоэлектрического тока с температурой (излом кривой фототок — температура); эта аномалия не может быть объяснена существующей теорией¹²; 2) работа фотоэлектрического выхода растёт с температурой.

Известно⁵¹, что все «аномалии» ферромагнитных металлов обусловлены существованием сампроизвольной намагниченности. Поэтому следует ожидать, что аномалия фототока в ферромагнетиках также связана с исчезновением сампроизвольной намагниченности при переходе через точку Кюри. В работе⁵² сделана попытка теоретического объяснения этой аномалии.

В случае ферромагнитных металлов можно воспользоваться моделью обменного взаимодействия внешних s - и внутренних d -электронов⁵³. Согласно этой модели считаем систему s -электронов в ферромагнетике смесью двух электронных «газов», в соответствии с двумя возможными ориентациями спина. Энергия s -электрона в приближении эффективной массы равна

$$E(k_x, k_y, k_z) = \alpha - \alpha' \mathbf{y} \boldsymbol{\sigma} + (\beta + \beta' \mathbf{y} \boldsymbol{\sigma})(k_x^2 + k_y^2 + k_z^2),$$

где α , α' , β и β' — параметры, зависящие от интегралов обмена s - и d -электронов и интегралов переноса s -электрона, \mathbf{y} — средний относительный атомный магнитный момент d -электрона, а $\boldsymbol{\sigma}$ — вектор спина s -электрона. Число s -электронов с правой ориентацией спина (s^+) в единице объёма, обладающих перпендикулярной к поверхности металла слагающей квазиимпульса, лежащей в интервале k_x^+ , $k_x^+ + dk_x^+$ (при произвольных значениях двух других слагающих k_y^+ и k_z^+), определяется выражением

$$\begin{aligned} n(k_x^+) dk_x^+ &= \frac{dk_x^+}{8\pi^3 a^3} \times \\ &\times \int_0^\infty \int_0^{2\pi} \exp[\alpha - \alpha' y + (\beta + \beta' y)(k_x^{+2} + \rho^2) - \epsilon_0^+] + 1]^{-1} \rho d\rho d\vartheta = \\ &= \frac{kT}{8\pi^3 a^3 (\beta + \beta' y)} \times \\ &\times \ln \left[1 + \exp \left(\frac{\epsilon_0^+ - [(\alpha - \alpha' y) + (\beta + \beta' y) k_x^+]}{kT} \right) \right] dk_x^+, \quad (6.1) \end{aligned}$$

где $\rho^2 = k_y^2 + k_z^2$, ϑ — азимут вокруг оси, перпендикулярной к поверхности металла, и ϵ_0^+ — химический потенциал s^+ -электронов.

Обозначим скачок потенциала для s^+ -электронов через W^+ , тогда их эффективная работа выхода будет $\chi^+ = W^+ - \epsilon_0^+$. Аналогично для s -электронов со спином левой ориентации $\chi^- = W^- - \epsilon_0^-$. Таким образом, предполагается, что величина скачка потенциала W зависит от намагниченности ферромагнетика благодаря влиянию обменного взаимодействия.

Определим число s^+ -электронов, вырываемых с поверхности ферромагнетика при температуре T под действием света частоты ν , близкой к предельной частоте ν_0 . Будем считать, что оно пропорционально числу этих электронов в единице объёма ферромагнитного металла, имеющих перпендикулярную к поверхности составляющую квазимпульса, большую, чем её критическая величина, которую находим из равенства

$$\alpha - \alpha'y + (\beta + \beta'y)k_x^2 + \hbar\nu = W^+.$$

Это число фотоэлектронов, которое мы будем обозначать через N_Φ^+ , определяется выражением

$$N_\Phi^+ = \int n(k_x^+) dk_x^+. \quad (6.2)$$

$$(\alpha - \alpha'y) + (\beta + \beta'y)k_x^2 = W^+ - \hbar\nu$$

Ограничиваясь случаем частот вблизи границы фотоэффекта ($\hbar\nu \sim \chi^+$), нетрудно показать, что число N_Φ^+ определяется формулой

$$N_\Phi^+ = \frac{k^2 T^2}{(\beta + \beta'y)^{3/2} (W^+ - \hbar\nu)^{3/2}} \varphi_l(x^+), \quad (6.3)$$

где $l=1$ при $x^+ = \frac{\hbar\nu - \chi^+}{kT} \leq 0$ и $l=2$ при $x^+ \geq 0$, при этом

$$\varphi_1(x^+) = \frac{1}{16\pi^2 a^3} f_1(x^+),$$

$$\varphi_2(x^+) = \frac{1}{16\pi^2 a^3} f_2(x^+),$$

где f_1 и f_2 определяются по формулам (2.6) и (2.7).

Аналогичные выражения, но с индексами $(-)$ и с заменой $(\beta + \beta'y)$ на $(\beta - \beta'y)$, имеют место для s^- -электронов.

Далее предполагаем, что эффективная работа выхода s^+ -электронов равна эффективной работе выхода s^- -электронов, т. е.

$$\nu_0 = \frac{W^+ - \epsilon_0^+}{\hbar} = \frac{W^- - \epsilon_0^-}{\hbar} = \frac{\chi^+}{\hbar} = \frac{\chi^-}{\hbar} = \frac{\chi}{\hbar}. \quad (6.4)$$

Равенство эффективных работ выхода χ^+ и χ^- следует из термодинамических соображений. Кроме того, если бы равенство (6.4)

хотя бы приближённо не выполнялось, то величина фототока изменялась бы с изменением направления намагниченности на обратное, что противоречило бы соображениям симметрии. Из (6.4) следует, что $\chi^+ = \chi^- = \chi$.

Используя известные выражения^{51, 52} для химических потенциалов s -электронов со спинами правой и левой ориентации и соотношение (6.4), можно получить следующие выражения:

$$W^+ = W + \gamma y, \quad W^- = W - \gamma y, \quad (6.5)$$

где $\gamma = 4\pi^2 \left(\frac{3}{8\pi}\right)^{3/2} \beta \beta'$ и $\delta = \frac{2}{3} k_1 + \frac{\beta'}{\beta}$, а W — скачок потенциала в отсутствие намагниченности. Полное число фотоэлектронов $N_\Phi(y)$, очевидно, будет равно сумме N_Φ^+ и N_Φ^- . После простых, но громоздких преобразований получаем для полного числа фотоэлектронов $N_\Phi(y)$ следующее выражение:

$$N_\Phi(y) = \frac{(kT)^3 \varphi_1[x(y)]}{8\pi^2 \alpha^3 \beta^{3/2} (W - h\nu)^{1/2}} (1 - \Gamma y^2), \quad (6.6)$$

где

$$\Gamma = - \left[\frac{3}{4} \frac{\beta' \gamma \beta}{W - h\nu} + \frac{3}{8} \frac{\gamma^2}{(W - h\nu)^2} + \frac{15}{8} \left(\frac{\beta'}{\beta} \right)^2 \right]. \quad (6.7)$$

Вообще говоря, Γ может иметь как положительный, так и отрицательный знак в зависимости от знаков β , β' , γ и $(W - h\nu)$ и их соотношений. При $y = 0$ выражение (6.6) в точности совпадает с соответствующей формулой Фаулера¹². Предполагая, что фотоэмиссионный ток пропорционален $N_\Phi(y)$, можно написать:

$$j = AT^2 (W - h\nu)^{-1/2} \varphi_1(x) (1 - \Gamma y^2), \quad (6.8)$$

где A — постоянная, не зависящая от y и T .

В формуле (6.8) нас интересует не абсолютное значение фотоэлектрического тока j , а его ферромагнитная «аномалия», т. е.

$$\frac{\Delta j}{j_0} = D y^2, \quad (6.9)$$

где j_0 — значение j при $y = 0$, а

$$D = \Gamma - \frac{\varphi'_1[x(0)] \varepsilon_\beta \delta_1}{\varphi_1[x(0)] kT}. \quad (6.10)$$

Коэффициент D (так же как в случае упорядочивающихся сплавов) является функцией частоты. Поэтому изменение частоты света, вызывающего фотоэффект, обуславливает изменение самого коэффициента D (что соответствует различным кривым фототока у Кардвелла). В выражении (6.9) Δj обозначает разность между фотоэлектрическим током, получаемым при экстраполяции кривой

фототока выше точки Кюри (j_0), и фактически наблюдаемым ниже точки Кюри фототоком. Опытные данные Кардвелла³⁰ качественно подтверждают полученную теоретическую формулу (6.9).

Можно показать непосредственными вычислениями, что эффективная работа выхода ферромагнитного металла является функцией самопроизвольной намагниченности. Действительно, пользуясь соотношениями для химических потенциалов s -электронов и формулой (6.4) и ограничиваясь членами, квадратичными относительно y , легко показать справедливость следующего соотношения:

$$\chi(y) = W - \varepsilon_\beta (1 + \delta_1 y^2), \quad (6.11)$$

где

$$\varepsilon_\beta = 4\pi^2 a^2 \beta \left(\frac{3\pi}{8\pi} \right)^{2/3}, \quad \delta_1 = \left(\frac{2}{3} k_1 \frac{\beta'_1}{\beta} - \frac{1}{9} k_1^2 \right).$$

При $y=0$ формула (6.11) переходит в обычное выражение для эффективной работы выхода. Если в формуле (6.11) пренебречь температурной зависимостью W и ε_β , то эффективная работа выхода будет зависеть от температуры только через самопроизвольную намагниченность. При положительном знаке δ_1 из формулы (6.11) следует, что с повышением температуры величина χ будет возрастать, что находится в согласии с опытными данными Кардвелла.

Пользуясь формулой (6.11), легко определить ферромагнитную «аномалию» эффективной работы выхода ферромагнетика

$$\frac{\Delta\chi}{\chi_0} = \frac{\chi_0 - \chi}{\chi_0} = \frac{\varepsilon_\beta \delta_1}{W - \varepsilon_\beta} y^2, \quad (6.12)$$

где χ_0 — значение χ при $y=0$. Весьма желательно произвести опытную проверку теоретических выводов, представленных формулой (6.12). Таким образом, фотоэлектрический ток ферромагнетиков должен зависеть от величины их самопроизвольной намагниченности. Вблизи температуры ферромагнитного превращения эта зависимость имеет простой квадратичный характер (см. формулы (6.8) и (6.9)). Кроме того, получена зависимость эффективной работы выхода ферромагнетика от величины самопроизвольной намагниченности и её ферромагнитная «аномалия».

Б. Более строгая теория

а) Более последовательная теория фотоэлектрического эффекта в ферромагнитных металлах была предложена А. З. Векслером. Она основывается, с одной стороны, на $(s-d)$ -обменной модели³³, с другой стороны, на строгой теории Тамма — Шубина¹⁶ — Митчелла²³. Все состояния электронов в ферромагнитном кристалле разбиваются на две группы: связанные и свободные. Вероятность

найти электрон, находящийся в связанном состоянии, на очень большом расстоянии от границы раздела металл — вакуум в области вне кристалла очень мала, и поэтому фототок равен нулю. Вероятность найти электрон, находящийся в свободном состоянии, на очень большом расстоянии от границы раздела не равна нулю и потому фототок отличен от нуля. Электронам, находящимся в свободных состояниях, соответствует действительное значение волнового вектора. Электроны, заполняющие связанные состояния, имеют мнимую составляющую волнового вектора по одной из координатных осей. Фотоэффект возникает лишь в тех случаях, когда электроны заполняют свободные состояния. При фотоэффекте электроны получают добавочную энергию, необходимую для перехода в свободное состояние, за счёт поглощения кванта света.

Изложенная в разделе А теория фотоэффекта, в которой не учитывается периодический потенциал кристалла, является непоследовательной потому, что особенности движения электронов в ферромагнетиках определяются их взаимодействием, которое является «объёмным» фактором и слабо связано со свойствами поверхности раздела металл—вакуум. Поэтому движение электрона проводимости в ферромагнитном металле правильнее описывать волновой функцией не в виде суммы двух плоских волн (падающей и отражённой), как это делается обычно в теории фотоэффекта^{16, 23}, а функцией, описывающей движение электрона в периодическом потенциальном поле кристаллической решётки $V(\mathbf{r}) = V(\mathbf{r} + \mathbf{n})$. Эта волновая функция имеет вид:

$$\psi(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}),$$

где

$$u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r} + \mathbf{n}) = u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}),$$

а \mathbf{n} — вектор решётки (в единицах параметра a).

Одновременный учёт периодического потенциала кристалла и граничного потенциала барьера металла позволяет получить общее выражение для тока, в котором объёмный и поверхностный эффекты учитываются в единой схеме.

Пусть металл заполняет всё бесконечное полупространство $x \leq 0$, а область $x \geq x_0$ является вакуумом. Рассмотрим фотоэмиссию s -электронов из металла, вызываемую электромагнитным полем световой волны.

Собственная функция невозмущённого состояния электрона определяется из волновых уравнений:

$$\Delta\psi_1 + \frac{2m}{\hbar^2} [E - V(\mathbf{r})] \psi_1 = 0 \quad x \leq x_0, \quad (6.13)$$

$$\Delta\psi_2 + \frac{2m}{\hbar^2} \left[E + \frac{e^2}{4x} \right] \psi_2 = 0 \quad x \geq x_0, \quad (6.14)$$

где $-\frac{e^2}{x}$ — потенциал, возникающий из-за наличия сил зеркального изображения у границы вне металла.

Решение уравнения (6.13) можно представить в виде ²²:

$$\psi_1 = \sum_n \{ a_n \exp [i(k_x + q_{n_1})(x - x_0)] + \\ + b_n \exp [-i(k_x + q_{n_1})(x - x_0)] + \\ + \exp i[(k_y + q_{n_2})y + (k_z + q_{n_3})z] \}, \quad (6.15)$$

где $q_{n_i} = \frac{2\pi n_i}{a}$, n_i — целые числа, a — постоянная решётки, k_x , k_y , k_z — составляющие квазиимпульса электрона ($i = x, y, z$).

Уравнение (6.14) можно решить методом разделения переменных, полагая

$$\psi_2 = f_1(x)f_2(y)f_3(z). \quad (6.16)$$

Подставляя (6.16) в (6.14), получим:

$$f_2(y) = e^{ig_y y}, \quad f_3(z) = e^{ig_z z}, \quad (6.17)$$

а $f_1(x)$ удовлетворяет уравнению

$$\frac{d^2 f_1(x)}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2} \left(\frac{\hbar^2}{2m} g_x^2 + \frac{e^2}{4x} \right) f_1(x) = 0, \quad (6.18)$$

причём

$$E = \frac{\hbar^2}{2m} (g_x^2 + g_y^2 + g_z^2). \quad (6.19)$$

Общее решение уравнения (6.14) имеет вид

$$\psi_2(x, y, z) = \sum_{g_y g_z} C_g f_1(x) e^{i(g_y y + g_z z)}. \quad (6.20)$$

Коэффициенты C_g находятся из граничных условий

$$\psi_1|_{x=x_0} = \psi_2|_{x=x_0}; \quad \left. \frac{d\psi_1}{dx} \right|_{x=x_0} = \left. \frac{d\psi_2}{dx} \right|_{x=x_0}. \quad (6.21)$$

Граничные условия (6.21) удовлетворяются лишь при выполнении следующих равенств:

$$\left. \begin{aligned} f_y &= k_y + q_{n_2}, \\ f_z &= k_z + q_{n_3}. \end{aligned} \right\} \quad (6.22)$$

Учитывая (6.19), находим:

$$g_x^2 = \frac{2m}{\hbar^2} E - (k_y + q_{n_2})^2 - (k_z + q_{n_3})^2. \quad (6.23)$$

Отсюда следует, что суммирование в формуле (6.20) производится по n_2 и n_3 , и поэтому её можно представить в следующем виде:

$$\psi_2(x, y, z) = \sum_{n_2, n_3} C_{n_2 n_3} f_1(x) \exp \{i[(k_y + q_{n_2})y + (k_z + q_{n_3})z]\}. \quad (6.24)$$

Эту функцию на больших расстояниях от границы раздела можно представить в двух видах:

$$\psi_2(x, y, z) \underset{x \rightarrow \infty}{\sim} \sum_{n_2, n_3} C'_{n_2 n_3} \exp \{i[g_x x + (k_y + q_{n_2})y + (k_z + q_{n_3})z]\}, \quad (6.25)$$

$$\psi_2(x, y, z) \underset{x \rightarrow \infty}{\sim} \sum_{n_2, n_3} C'_{n_2 n_3} \exp \{-\kappa_x x + i[(k_y + q_{n_2})y + (k_z + q_{n_3})z]\}, \quad (6.26)$$

где $\kappa_x = -ig_x$, если g_x — мнимое число.

Состояние электронов, описываемое функцией (6.25), будем называть свободным, а состояние, описываемое функцией (6.26), — связанным.

Свободному состоянию соответствует конечная, отличная от нуля вероятность найти электрон на сколь угодно большом расстоянии от поверхности раздела металл — вакуум. Для связанного состояния вероятность найти электрон на большом расстоянии от поверхности металла мала и с возрастанием x стремится к нулю. Вычисление тока, соответствующего состоянию, описываемому функцией (6.25), приводит к следующему выражению:

$$j_x = \frac{e\hbar}{m} \sum_{n_2 n_3} |C'_{n_2 n_3}|^2 g_x. \quad (6.27)$$

Рассмотрим фотоэффект при частоте света, близкой к граничной. В этом случае подавляющее большинство фотоэлектронов, покидающих металл, обладает энергией порядка тепловой. Как показано в работе ⁵⁵, формула (6.27) тогда упрощается и принимает вид:

$$j_x = \frac{e\hbar}{m} |C'_{0,0}|^2 g_{x(0)}. \quad (6.28)$$

б) Исходим из уравнения первого приближения теории возмущений (3.13). Решение этого уравнения ищем в виде разложения

в интеграл Фурье^{16, 19, 23} по собственным функциям невозмущённой задачи:

$$\psi = \iint_{-\infty}^{\infty} dk_y dk_z \left\{ \int_0^{\infty} C_k^+(t) U_k^+(t) dk_x + \int_0^{\infty} C_k^-(t) U_k^-(t) dk_x \right\}, \quad (6.29)$$

где

$$U_{k_x, k_y, k_z}^-(x, y, z, t) = U_{-k_x, k_y, k_z}^+(x, y, z, t) = \\ = U_{-k_x, k_y, k_z}(x, y, z, t).$$

Подставив (6.29) в (3.13) и учитывая, что $U_k(\mathbf{r}, t)$ является решением уравнения того же вида, что и (3.3), но с правой частью, равной нулю, получим:

$$\iint_{-\infty}^{\infty} dk_y dk_z \left\{ \int_0^{\infty} dk_x \frac{dC_k^+}{dt} U_k^+ + \int_0^{\infty} dk_x \frac{dC_k^-}{dt} U_k^- \right\} = \frac{e}{mc} (\mathbf{A} \nabla) U_k. \quad (6.30)$$

Умножим обе части этого уравнения на $U_{k'}^{\alpha*}$, где α означает $+$ или $-$, и проинтегрируем по координатам:

$$\iint_{-\infty}^{\infty} dk_y dk_z \left\{ \int_0^{\infty} k \frac{dC_k^+}{dt} \int U_k^+ U_{k'}^{\alpha*} d\tau dk_x + \int_0^{\infty} k \frac{dC_k^-}{dt} \int U_k^- U_{k'}^{\alpha*} d\tau dk_x \right\} = \\ = \frac{e}{mc} \int U_{k'}^{\alpha*} (\mathbf{A} \nabla) U_k d\tau. \quad (6.31)$$

Благодаря такому преобразованию получилось уравнение, не зависящее явно от потенциала. Теперь нетрудно определить амплитуды $C_k^{\pm}(t)$, имея в виду, что $U_k^{\pm}(\mathbf{r}, t)$ ортогональны:

$$\left. \begin{aligned} \int U_k^+ U_{k'}^{+*} d\tau &= \int U_k^- U_{k'}^{-*} d\tau = N_k^{(1)} \delta(\mathbf{k} - \mathbf{k}'), \\ \int U_k^+ U_{k'}^{-*} d\tau &= \int U_k^- U_{k'}^{+*} d\tau = N_k^{(2)} \delta(\mathbf{k} - \mathbf{k}'), \end{aligned} \right\} \quad (6.32)$$

где $N_k^{(1)}$ и $N_k^{(2)}$ — нормировочные множители. Поэтому уравнения (6.31) принимают следующий вид:

$$\left. \begin{aligned} N_k^{(1)} \frac{dC_k^+}{dt} + N_k^{(2)} \frac{dC_k^-}{dt} &= \frac{e}{mc} \int U_k^{+*} (\mathbf{A} \nabla) U_k^+ d\tau, \\ N_k^{(2)} \frac{dC_k^+}{dt} + N_k^{(1)} \frac{dC_k^-}{dt} &= \frac{e}{mc} \int U_k^{-*} (\mathbf{A} \nabla) U_k^+ d\tau. \end{aligned} \right\} \quad (6.33)$$

Исключая $\frac{dC_k^-}{dt}$ и интегрируя по времени, в предположении, что при $t < 0$ металл не освещался, получим:

$$C_k^\pm(t) = \frac{\exp\left[\frac{i}{\hbar}(E_k + \hbar\omega - E_{k'})\right] - 1}{\frac{i}{\hbar}(E_k + \hbar\omega - E_{k'})} (k|a|k')^\pm, \quad (6.34)$$

где

$$(k|a|k')^\pm = \frac{e}{mc \{ [N_k^{(1)}]^2 - [N_k^{(2)}]^2 \}} \int (a \nabla \psi_k) d\tau [N_k^{(1)} \psi_k^{\pm*} - N_k^{(2)} \psi_k^\mp]. \quad (6.35)$$

При вычислении $C_k^\pm(t)$ опущен член, соответствующий излучению, а также множитель $\exp\left(i\omega \frac{x \cos \theta + y \sin \theta}{c}\right)$, так как рассматривается случай, когда частота света близка к граничной, в силу чего $\frac{\omega}{c} \ll k$. Так как энергию s^\pm -электрона ферромагнитного металла можно представить в виде

$$E = A + A'y + (B + B'y)(\cos k_x a + \cos k_y a + \cos k_z a), \quad (6.36)$$

то нормировочные множители $N_k^{(1)}$ и $N_k^{(2)}$ будут равны:

$$N_k^{(1)} = \frac{4\pi^3 \hbar^2}{m(B + B'y) \sin k_x a} \left\{ \sum_{n, n'} (2ak_x + 2\pi n_1 + 2\pi n'_1) \times \right. \\ \left. \times (a_n a_{n'}^* - b_n b_{n'}^*) + \sum_{n_2, n_3} |C_{n_2 n_3}|^2 a g_x \right\}, \quad (6.37)$$

$$N_k^{(2)} = \frac{4\pi^3 \hbar^2}{m(B + B'y) \sin k_x a} \times \\ \times \left\{ \sum_{n, n'} (2ak_x + 2\pi n_1 + 2\pi n'_1) (a_n b_{n'}^* - a_n^* b_n) \right\}. \quad (6.38)$$

Матричный элемент будет содержать лишь x -составляющую векторного потенциала, так как его y - и z -составляющие дают выражения, равные нулю из-за ортогональности функций $\exp(ik_y y)$ и $\exp(ik_z z)$. Это приводит к следующему выражению для матричного элемента:

$$(k|a|k')^\pm = (2\pi)^3 (k|a_x|k')^\pm \delta(k_y - k'_y) \delta(k_z - k'_z), \quad (6.39)$$

причём $(k|a_x|k')^\pm$ содержит лишь интеграл по x . Следовательно,

для амплитуд $C_k^\pm(t)$ имеем формулу

$$C_k^\pm(t) = (2\pi)^3 \frac{\exp \frac{i}{\hbar} [(E_k + \hbar\omega - E_{k'})t] - 1}{\frac{i}{\hbar} (E_k + \hbar\omega - E_{k'})} \times \\ \times (k|a_x|k')^\pm \delta(k_y - k'_y) \delta(k_z - k'_z). \quad (6.40)$$

Теперь нетрудно найти добавку v к волновой функции, используя то обстоятельство, что время t , прошедшее с момента начала освещения, очень велико:

$$v = (2\pi)^3 \left\{ \int_0^\infty U_{k'}^+(k|a_x|k')^+ dk'_x + \int_0^\infty U_{k'}^-(k|a_x|k')^- dk'_x \right\} \times \\ \times \frac{\exp \left[\frac{i}{\hbar} (E_k + \hbar\omega - E_{k'})t \right] - 1}{\frac{i}{\hbar} (E_k + \hbar\omega - E_{k'})}. \quad (6.41)$$

Производя интегрирование, можно найти окончательное выражение для v :

$$v = \frac{(2\pi)^3 (k|a_x|\bar{k}')_0^+}{(B+B'y)a \sin \bar{k}'_x a} U_{\bar{k}'}(x, y, z), \quad (6.42)$$

где \bar{k}' — значение k' , определяемое условиями:

$$\left. \begin{aligned} k'_{y,z} &= k_{y,z} + q_{n_1,z} - q'_{n_1,z}, \\ E_{k'} &= E_k + \hbar\omega. \end{aligned} \right\} \quad (6.43)$$

Заметим, что второй интеграл в (6.41) обращается в нуль, так же как в работе¹⁹, поэтому значок $+$ можно отбросить. Матричный элемент $(k|a|\bar{k})$ распадается на две части, одна из которых соответствует области внутри металла, другая — вне его. Производя интегрирование по основной области, находим, что часть матричного элемента, связанная с волновой функцией электрона в металле, равна:

$$(k|a|\bar{k})_{0,1} = a_x \left\{ N_k^{(1)} \sum_{n_1, n'_1} (\bar{k}_x + q_{n_1}) \times \right. \\ \times \left[\frac{a_n^* a_{n'} + b_n^* b_{n'}}{g_x + q_{n_1} - \bar{g}_x - q_{n'_1}} - \frac{a_n^* b_{n'} + b_n^* a_{n'}}{g_x + q_{n_1} + \bar{g}_x + q_{n'_1}} \right] + \\ + N_k^{(2)} \sum_{n_1, n'_1} (\bar{k}_x + q_{n'_1}) \times \\ \times \left[\frac{a_n^* a_{n'} + b_n^* b_{n'}}{g_x + q_{n_1} + \bar{g}_x + q_{n_1}} - \frac{a_n^* b_{n'} + b_n^* a_{n'}}{g_x + q_{n_1} - \bar{g}_x - q_{n'_1}} \right] \Big\}. \quad (6.44)$$

Для области вне металла вычисление матричного элемента представляет значительные трудности. Однако можно установить зависимость матричного элемента от g_x , а отсюда и температурную зависимость фототока. При вычислении матричного элемента вместо волновой функции связанного состояния можно использовать её асимптотическое выражение³¹

$$f_x(x) = b_x e^{-\kappa x} (2\kappa x)^{s/2}, \quad (6.45)$$

где $S = \frac{me^2}{4\hbar^2}$ и $\kappa = ig_x$.

Это выражение представляет функцию с достаточной точностью вплоть до расстояний от поверхности раздела порядка $(3 \div 4) \cdot 10^{-8}$ см. Для свободных состояний такое представление нельзя использовать, так как для области, близкой к поверхности раздела, $2g_x x \ll 1$.

Как показано в работе³¹, для частот света, близких к граничной, т. е. при малых g_x ,

$$f_{g_x}(x) = C_1 \lambda(x)$$

и не зависит в первом приближении от g_x . Таким образом, для второй части матричного элемента имеем выражение

$$\begin{aligned} (k|a_x|k')_{0,2} = a_x c_1 [N_{k'}^{(1)} - N_{k'}^{(2)}] \int_{x_0}^{\infty} \lambda(x) \left[-\kappa e^{-\kappa x} (2\kappa x)^{s/2} + \right. \\ \left. + 2se^{-\kappa x} (2\kappa x)^{\frac{s}{2}-1} \right] dx, \end{aligned} \quad (6.46)$$

которое не зависит от g_x .

При выводе формулы (6.42) было опущено слагаемое, соответствующее закону сохранения квазиимпульса вдоль x -направления:

$$k'_x = k_x + q_{n_1} - q_{n'_1}. \quad (6.47)$$

Это условие должно выполняться одновременно с равенствами (6.43), а это невозможно, если в результате возбуждения электрон не переходит в другую зону, так как энергия в зоне является периодической функцией квазиимпульса⁵⁶:

$$E_l(k + q_n) = E_l(k). \quad (6.48)$$

Если переход совершается в другую зону, то при определённом соотношении между k_x , k_y , k_z равенства (6.43) и (6.48) являются совместными. Этот случай соответствует так называемым оптическим переходам. Следовательно, оптические переходы или, как это явление было уже названо по Тамму и Шубину¹⁶, объёмный фотоэффект может вносить свой вклад в фотоэмиссию лишь при перебрасывании электрона в следующую энергетическую полосу. У Тамма и Шубина объёмный фотоэффект рассматривался без учёта того обстоятельства,

что он возможен лишь при переходах в следующую полосу. Это оказалось возможным потому, что принималась энергия электрона

в виде $E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$, т. е. она не имела периодичности решётки и не

учитывался зонный характер энергетического спектра электрона. Естественно поэтому, что вывод, полученный в указанной работе относительно «красной границы объёмного эффекта», не совсем точен. Это же замечание относится и к работе⁴⁴.

Обычно^{16, 19} объёмный фотоэффект рассматривался отдельно от поверхностного. Из расчёта Векслера видно, что такого искусственного деления производить не нужно, ибо обе части фотоэффекта получаются автоматически, как составные части матричного элемента. На основании вышеизложенного следует, что «вторая красная граница», соответствующая объёмному фотоэффекту, должна определяться энергией, которую необходимо передать электрону, находящемуся у верхнего края частично заполненной полосы, для того чтобы он перешёл в низшее состояние следующей пустой полосы. Для металлов эта энергия гораздо больше, чем энергия, необходимая для перехода электрона в наинизшее свободное состояние.

При вычислении фототока следует учитывать лишь ток, обусловленный добавкой v к волновой функции, ибо ток, происходящий от невозмущённой волновой функции (без поля), всё равно обращается в нуль. Плотность тока определяем из хорошо известной формулы

$$j_x = \frac{e\hbar}{2mi} \left(v^* \frac{\partial v}{\partial x} - v \frac{\partial v^*}{\partial x} \right),$$

где v даётся формулой (6.42). Для того чтобы найти плотность тока электронов в вакууме на большом расстоянии от поверхности раздела, в качестве функции $U_k(x, y, z)$, входящей в (6.42), воспользуемся асимптотическим выражением для гипергеометрической функции⁵⁷:

$$U_k(x, y, z) = C \exp \left[i g_x x + \frac{iS}{g_x} \ln(2i g_x x) \right] \exp[i(g_y y + g_z z)]. \quad (6.49)$$

Тогда плотность тока равна:

$$j_x = \frac{(2\pi)^6 |\mathbf{k} | a_x | \overline{\mathbf{k}}' |^2 e\hbar}{ma^2 (B + B'y)^2 \sin^2 k_x a} g_x |C|^2. \quad (6.50)$$

В работе⁵⁵ показано, что $g_x |C|^2$ не зависит от g_x . Поэтому, если обозначить эту величину через $A(\overline{k}_x)$, то ток можно представить в виде

$$j_x = \frac{(2\pi)^6 e\hbar}{m} \frac{|\mathbf{k} | a | \overline{\mathbf{k}}_0 |^2 A(\overline{k}_x)}{(B + B'y)^2 a^2 \sin^2 k_x a}. \quad (6.51)$$

Интегрируя по всем начальным состояниям электронов в металле, получим полный фототок:

$$J_x = \frac{1}{(2\pi)^3} \int_{-\frac{\pi}{a}}^{\frac{\pi}{a}} dk_y \int_{-\frac{\pi}{a}}^{\frac{\pi}{a}} dk_z \int_{g_x=0}^{\infty} j_x \frac{1}{\exp \frac{E - \varepsilon_0}{kT} + 1} dk_x. \quad (6.52)$$

Разложение функции Ферми в ряд по $\exp \frac{E - \varepsilon_0}{kT}$ приводит к следующим выражениям:

$$\begin{aligned} \left[\exp \left(\frac{E - \varepsilon_0}{kT} \right) + 1 \right]^{-1} &= \\ &= \sum_n (-1)^n \exp \left(- \frac{(n+1)(E - \varepsilon_0)}{kT} \right), \quad E > \varepsilon_0, \end{aligned} \quad (6.53)$$

$$\begin{aligned} \left[\exp \left(\frac{E - \varepsilon_0}{kT} \right) + 1 \right]^{-1} &= \\ &= \sum_n (-1)^n \exp \left(\frac{n(E - \varepsilon_0)}{kT} \right), \quad E < \varepsilon_0. \end{aligned} \quad (6.54)$$

При явном выполнении интегрирования (6.52) воспользуемся вторым соотношением (6.43), которое можно представить в виде

$$E_k = \frac{\hbar^2}{2m} (g_x^2 + g_y^2 + g_z^2) - \hbar\omega,$$

и перейдём к новым переменным интегрирования g_x , $\rho^2 = g_y^2 + g_z^2$ и $\vartheta = \arctg \frac{g_y}{g_z}$. Интегрирование приводит к следующему результату:

$$J_x = \frac{(2\pi)^4 me (kT)^2 |(\mathbf{k} | \mathbf{a}_+ | \mathbf{k}')|^2 A(\overline{k_x})}{\hbar^3 c^3 a^3 (B + B'y)^3 \sin^3 k_0' x a} \Phi_{1,2} \left(\frac{\varepsilon + \hbar\omega}{kT} \right), \quad (6.55)$$

где

$$\Phi_1(x) = \sum_{n=0} \frac{(-1)^n}{(n+1)^3} \exp(n+1)x \quad \text{при } x < 0,$$

$$\Phi_2(x) = \frac{\pi^2}{6} + \frac{x^2}{2} - \sum_{n=0} \frac{(-1)^n}{(n+1)^3} \exp[-(n+1)x] \quad \text{при } x > 0.$$

Общий ток электронов с правой и левой ориентациями спина равен (в случае слабого заполнения полосы):

$$J = (A_0 + B_0 y^2) T^2 \Phi_{1,2} \left[\frac{\varepsilon(\omega) + B y^2}{kT} \right], \quad (6.56)$$

где

$$A_0 = -\frac{16\pi^2 me k^3 D}{\hbar^2 a^4 \alpha_1^{3/4}} M_0 \sum_{n_1} |a_{n_1 00}|^2 (\gamma_1 + q_{n_1}),$$

$$B_0 = -\frac{16\pi^2 me k^3 D}{\hbar^2 a^4 \alpha_1^{3/2}} \sum_{n_1} \left\{ M_0 \gamma_3 + \left(M_1 - \frac{3}{2} \frac{a_2}{a_1} M_0 \right) \gamma_2 + \right.$$

$$\left. + \left[\left(\frac{15}{8} \frac{a_2^2}{a_1^2} - \frac{3}{2} \frac{a_2}{a_1} \right) M_2 - \frac{3}{2} M_1 \frac{a_2}{a_1} \right] (\gamma_1 + q_{n_1}) \right\} |a_{n_1 00}|^2;$$

M_0 , M_1 , M_2 — первый, второй и третий коэффициенты в разложении квадрата модуля матричного элемента по степеням относительной намагнитченности y :

$$|(\mathbf{k} | a_x | \bar{\mathbf{k}})|^2 \cong M_0 + M_1 y + M_2 y^2; \quad \alpha_1 = A^2 + 3B^2 + \varepsilon(\omega)(2B' + A');$$

$$\alpha_3 = 2B'^2 + A'^2 + 4A'B' + B'(A + 2B); \quad \gamma_1 = \arccos \xi_0;$$

$$\gamma_2 = \beta_2 (1 - \xi_0^2)^{-1/2}; \quad \gamma_3 = -(\xi_0 \beta_2^2 + \beta_3) (1 - \xi_0^2)^{-1/2};$$

$$\xi_0 = \frac{\varepsilon(\omega) - (A + 2B)}{B}; \quad \beta_2 = \frac{2B' - A'}{B} + \xi_0 \frac{B'}{B};$$

$$\beta_3 = \xi_0 \frac{B'^2}{B} + \frac{2B' - A'}{B^2} B' + \frac{B'}{B};$$

$$\beta_1 = a^2 (3\pi^2 n)^{3/2} k_1 \left(\frac{3}{8} k_1 \beta + \frac{3}{2} \beta' \right);$$

$$\varepsilon(\omega) = \alpha + a^2 (3\pi^2 n)^{3/2} \beta + \hbar \omega;$$

$$\alpha_2 = 2BB' + 2\varepsilon(\omega)(A' + 2B').$$

Рассмотренная теория фотоэффекта может быть, очевидно, использована и для ферромагнитных металлов, если повсюду считать $y = 0$. Формула (6.56), определяющая зависимость тока насыщения от температуры и частоты, имеет такой же вид, как (6.8).

Однако между этими двумя формулами имеется существенное различие: параметры, входящие в формулу для тока (6.56), получены в самом общем виде без использования каких бы то ни было дополнительных предположений (например, предположения о зависимости скачка потенциала от относительной намагнитченности, как это сделано в работе ³²). Кроме того, различие между упрощенным рассмотрением фотоэффекта и более последовательным его рассмотрением, учитывающим периодичность потенциала внутри металла, особенно заметно при сопоставлении выражений, определяющих распределение фотоэлектронов по скорости (см. подынтегральное выражение (6.52)). Эта зависимость оказывается более сложной, чем в упрощенной теории, что, повидимому, имеет место в действительности ⁵⁴.

При рассмотрении фотоэффекта, вызываемого светом с частотой, гораздо большей, чем граничная, следует учитывать также вторую

составляющую матричного элемента, относящуюся к объёмному эффекту. Сопоставление формулы для фототока (6.56) с известным соотношением, определяющим его температурную зависимость, показывает, что работа выхода равна $-\epsilon_0^\pm = -\epsilon_0$. Этот результат может быть доказан не только путём формального сопоставления соотношений, но также и на основе термодинамического рассмотрения, аналогичного проведённому в работе ⁵⁵.

§ 7. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Как следует из всего вышеизложенного, одноэлектронная модель квантовомеханической теории внешнего фотоэлектрического эффекта в металлах даёт уже достаточно полное качественное, а во многих случаях и количественное объяснение этого важного электронного явления в кристаллах. Однако одноэлектронной модели присущ очень большой и принципиальный недостаток — пренебрежение межэлектронным взаимодействием. Поэтому возникает весьма актуальная задача квантовой теории металлов — задача разработки многоэлектронной схемы расчёта оптических и фотоэлектрических свойств в металлах и твёрдых телах других типов.

В связи с этим следует упомянуть работу Шубина ⁵⁸, в которой был применён метод дираковской матрицы плотности (статистического оператора в p -пространстве) к теории металлов в рамках одноэлектронного приближения. Им было получено выражение для плотности электрического тока, вызванного действием внешнего переменного электрического поля $F \cos \omega t$ частоты ω :

$$j = - \frac{e^2 F a}{\hbar m} \frac{\sin \omega t}{\omega} \sum_{\xi} (\xi | \hat{p} | \xi) \frac{\partial \rho_0}{\partial \xi} + \\ + \frac{2e^2 F}{\hbar m} \sin \omega t \sum_{\xi \neq \xi'} [\rho_0(\xi) - \rho_0(\xi')] \frac{\omega}{\omega(\xi, \xi')} \cdot \frac{|\langle \xi | \hat{p} | \xi' \rangle|^2}{[\omega^2(\xi, \xi') - \omega^2]}, \quad (7.1)$$

где ξ — вектор квазиимпульса стационарного состояния электрона в металле, a — постоянная кристаллической решётки, $(\xi | \hat{p} | \xi)$ и $(\xi | \hat{p} | \xi')$ — соответственно диагональный и недиагональный матричные элементы оператора импульса электрона \hat{p} , $\rho_0(\xi)$ — начальное значение матрицы плотности в состоянии ξ , а

$$\omega(\xi, \xi') = \frac{1}{\hbar} [E(\xi) - E(\xi')],$$

где $E(\xi)$ — энергия электрона в состоянии ξ .

Первое слагаемое в правой части формулы (7.1) описывает эффекты ускоряющего действия поля F , а второй — квантовые (опти-

ческие) переходы. В принципе эта формула может быть применена и для трактовки фотоэлектрического эффекта.

Работу⁵⁸ оказалось возможным обобщить и на случай многоэлектронной модели⁵⁹, не делая при этом никаких ограничивающих приближений относительно величины и характера межэлектронного взаимодействия*). Далее удалось получить общие дисперсионные формулы квантовой оптики металлов в такой многоэлектронной схеме⁶⁰ и учесть в этих расчётах феноменологическим образом эффект электронного затухания⁶¹.

Многоэлектронная теория кристаллов открывает естественные возможности построения единой теории оптических и фотоэлектрических свойств металлов и полупроводников.

Как показывают первые попытки построения более детальной модельной многоэлектронной теории оптических свойств, учёт электронного взаимодействия может привести к более глубокому и полному объяснению и явлений фотоэффекта в кристаллах. Однако пока таких расчётов в законченной форме ещё нет. Можно лишь отметить, что в частном случае полярной многоэлектронной модели атомного полупроводника получаются результаты, существенно отличающиеся от выводов одноэлектронной зонной теории. А именно, если последняя предсказывала переходы электрона из основного состояния системы в кристалле только в наинизшее состояние энергетической полосы проводимости независимо от типа возбуждения (столкновения с фононами, фотонами и т. д.), то в рамках многоэлектронной модели эти переходы различны для различных возбуждений. При оптическом возбуждении система переходит в состояние с энергией, отвечающей какому-то уровню в середине полосы проводимости, тогда как при фононном возбуждении она переходит, как и в одноэлектронной зонной теории, в состояние с наинизшей энергией в полосе проводимости. Расчёт ускоряющего эффекта электрическим полем инфракрасного света при учёте электронного взаимодействия приводит к существенному увеличению эффективной массы носителей электрического тока в кристалле (электронов проводимости, экситонов и т. п.).

В заключение следует отметить также необходимость более интенсивного развития теории фотоэффекта в полупроводниках и полуметаллах. Как отметил в своей последней монографии А. Ф. Иоффе⁶³,

*) Нельзя согласиться с замечанием о квантовомеханической теории оптических свойств металлов, приведённым в обзорной статье⁶² (см. на стр. 493), в котором говорится, что получение формул типа (7.1) с помощью квантовых расчётов «вносит мало нового» в теорию. Помимо того, что из этих формул видно, как следует правильно вычислять эффективную массу электронов проводимости (рассматриваемых в рамках этой теории как некий тип элементарных возбуждений всей электронной системы в целом), они позволяют с единой точки зрения подойти к трактовке всех «оптических» процессов, протекающих в электронном коллективе кристаллической решётки.

этот вопрос разработан очень слабо (см. также ¹¹⁶). При построении теории фотоэффекта в полупроводниках, как показано в работе ⁶⁴, оказывается необходимым учитывать влияние поверхностных таммовских энергетических уровней электронов в кристалле ⁶⁵.

ЦИТИРОВАННАЯ ЛИТЕРАТУРА

1. H. Hertz, Ann. d. Physik **31**, 983 (1887).
2. А. Г. Столетов, Собр. соч., т. I, М.—Л. (1939), стр. 217—275; см. также С. R. Acad. Sci. **106**, 1149, 1593 (1888); **107**, 91 (1889); **108**, 1241 (1889); Journ. de phys. (2) **9** (1890).
3. W. Hallwachs, Ann. d. Phys. **33**, 301 (1888).
4. P. Lenard, Wien. Ber. **108**, 649 (1899); Ann. d. Phys. **2**, 359 (1900).
5. J. J. Thomson, Phil. Mag. **48**, 577 (1899).
6. A. Einstein, Ann. d. Phys. **17**, 132 (1905).
7. А. Ф. Иоффе, Элементарный фотоэлектрический эффект, СПб (1913); см. также ЖРФХО **39**, 248 (1907); Ann. d. Phys. **24**, 939 (1907).
8. П. И. Лукирский и С. С. Прилежаев, Zeits. f. Phys. **49**, 236 (1928); ЖРФХО **60**, 111 (1928).
9. J. Elster u. H. Geitel, Ann. d. Phys. **52**, 433 (1894); см. также H. Ives, Phys. Rev. **38**, 1209 (1931).
10. С. Ю. Лукьянов, ЖТФ **9**, 1175 (1939).
11. а) А. Л. Юзи и Л. А. Дюбридж, Фотоэлектрические явления, Л.—М. (1936); б) Л. Н. Добрецов, Электронная и ионная эмиссия, М.—Л. (1950); в) Л. Б. Линфорд, УФН **14**, 133 (1934); г) Л. Дюбридж, УФН **19**, 74 (1938).
12. R. H. Fowler, а) Proc. Roy. Soc., A **118**, 229 (1928); б) Phys. Rev. **38**, 45 (1931).
13. L. Nordheim, Phys. Zeits. **30**, 177 (1929).
14. Du Bridge, Phys. Rev. **39**, 108 (1932).
15. G. Wentzel, Sommerfeld's 60 Geburtstag Festschrift, 1928, стр. 79.
16. И. Е. Тамм и С. П. Шубин, Zeits. f. Physik **68**, 97 (1931).
17. H. Fröhlich, Ann. d. Physik **7**, 103 (1930).
18. Д. И. Блохинцев, Сов. физ. **1**, 781 (1932).
19. K. Mitchell, Proc. Roy. Soc. A. **146**, 442 (1934).
20. а) K. D. Myers, Phys. Rev. **49**, 938 (1936); б) R. E. B. Makinson, Phys. Rev. **75**, 1908 (1949).
21. A. G. Hill, Phys. Rev. **53**, 184 (1938).
22. Г. Бете и А. Зоммерфельд, Электронная теория металлов, М.—Л. 1938, § 24.
23. K. Mitchell, Proc. Roy. Soc. A **153**, 513 (1936).
24. F. Klauer, Ann. d. Phys. **20**, 909 (1934).
25. L. I. Schiff a. L. H. Thomas, Phys. Rev. **47**, 860 (1935).
26. R. E. B. Makinson, Proc. Roy. Soc. A **162**, 367 (1937).
27. E. Rudberg, Phys. Rev. **48**, 811 (1935).
28. M. J. Buckingham, Phys. Rev. **80**, 704 (1950).
29. J. Bardeen, Phys. Rev. **49**, 653 (1936).
30. I. I. Brady, Phys. Rev. **46**, 768 (1934).
31. K. Mitchell, Proc. Camb. Phil. Soc. **31**, 416 (1935).
32. W. V. Houston, Phys. Rev. **52**, 1047 (1937).
33. В. Я. Савельев, ЖЭТФ **4**, 407 (1934).
34. R. Fowler a. L. Nordheim, Proc. Roy. Soc. A **119**, 173 (1928).
35. E. O. Lawrence a. L. B. Lindford, Phys. Rev. **36**, 482 (1930).
36. E. Guth a. Ch. J. Mullin, Phys. Rev. **59**, 867 (1941).
37. R. E. B. Makinson a. M. J. Buckingham, Proc. Phys. Soc. A **64**, 135 (1951).

38. H. Ives, Phys. Rev. **38**, 1208 (1931).
 39. Де-Бур, Электронная эмиссия и явления адсорбции, М.—Л. 1936.
 40. Я. И. Френкель, Phys. Rev. **38**, 309 (1931).
 41. C. Zener, Phys. Rev. **47**, 15 (1935).
 42. С. Рыжанов, ЖЭТФ **9**, 38 (1939).
 43. R. Suhrman u. H. Theissing, Zeits. f. Phys. **52**, 453 (1928).
 44. H. I. Fan, Phys. Rev. **68**, 43 (1945).
 45. R. J. Cashman a. E. Bassoe, Phys. Rev. **55**, 63 (1939).
 46. См., например, Ф. Никс и В. Шокли, УФН **20**, 344 (1938).
 47. А. В. Соколов, ЖЭТФ **21**, 1384 (1951).
 48. А. А. Смирнов, ЖЭТФ **17**, 730 (1947).
 49. См., например, Л. Д. Ландау и Е. М. Лифшиц, Статистическая физика, М.—Л. 1951.
 50. A. V. Cardwell, Phys. Rev. **76**, 125 (1949).
 51. С. В. Вонсовский, Современное учение о магнетизме, М.—Л. 1953.
 52. С. В. Вонсовский и А. В. Соколов, ДАН **76**, 197 (1951).
 53. С. В. Вонсовский, ЖЭТФ **16**, 981 (1946).
 54. I. Dickey, Phys. Rev. **81**, 612 (1951).
 55. А. В. Соколов и А. З. Векслер, ЖЭТФ **25**, 215 (1953).
 56. L. P. Bouckaert, R. Smoluchowski a. E. Wigner, Phys. Rev. **50**, 58 (1936).
 57. См., например, Е. Т. Уиттекер и Г. Н. Ватсон, Курс современного анализа, ч. II, Л.—М. 1934, гл. 14.
 58. С. П. Шубин, ДАН **3** (8), 15 (1935).
 59. С. В. Вонсовский, Изв. АН СССР, сер. физич. **12**, 337 (1948).
 60. А. В. Соколов, ЖЭТФ **25**, 341 (1953).
 61. А. В. Соколов, В. И. Черепанов и И. Б. Штейнберг, ЖЭТФ **28**, 330 (1955).
 62. В. Л. Гинзбург и Г. П. Мотулевич, УФН **55**, 469 (1955).
 63. А. Ф. Иоффе, Полупроводники в современной физике, М.—Л. 1955.
 64. Г. Е. Пикус, ЖЭТФ **27**, 369 (1954).
 65. И. Е. Тамм, Сов. физ. **1**, 733 (1932).
-