

ДИЭЛЕКТРИЧЕСКАЯ ПРОНИЦАЕМОСТЬ ВЕЩЕСТВА И МОДЕЛИРОВАНИЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ ВОЛНОВЫХ ПУЧКОВ С МЕТАЛЛАМИ И ПОЛУПРОВОДНИКАМИ

к.т.н. А.М. Сотников, к.т.н. Г.Ф. Коныхин, к.ф.-м.н. В.Е.Новиков,
С.И. Клевец, В.В. Белимов
(представил проф. В.Е. Пустоваров)

Рассмотрен способ расчета результатов неупругого взаимодействия электрона с веществом с помощью дважды дифференциального сечения, а также в терминах диэлектрической проницаемости.

При поглощении энергии волнового пучка в полупроводниковых или гетерогенных структурах могут возникать сильные электрические поля и существенные отклонения функции распределения электронов по энергии. Неравновесные состояния электронной подсистемы могут существенно исказить профиль энерговыделения в веществе. Для правильной оценки энерговыделения в твердом теле необходимо определение поляризуемости и проводимости в неравновесных условиях во время поглощения энергии электронов.

Рассмотрим способ расчета результатов неупругого взаимодействия электрона с веществом, базирующийся на эффективной реализации метода Монте-Карло с помощью дважды дифференциального сечения. Сечение, в свою очередь, может быть рассчитано с использованием данных о диэлектрической проницаемости вещества. Для количественного определения искомых параметров, т.е. для моделирования основных эффектов, требуется информация о функции распределения электронов. Она может быть получена из кинетического уравнения.

Как известно [1, 3], неупругое взаимодействие электрона с веществом может быть описано в терминах диэлектрической проницаемости $\tilde{\epsilon}(\mathbf{q}, \omega)$, которая связана с дважды дифференциальным сечением неупругого рассеяния соотношением

$$\frac{d^2\sigma}{d(\hbar\omega)d(\hbar q)} = \frac{1}{\pi a_0 q E} \operatorname{Im} \left(-\frac{1}{\tilde{\epsilon}(\mathbf{q}, \omega)} \right), \quad (1)$$

где E – энергия электрона, отсчитываемая от дна зоны проводимости; $\hbar\omega$ и $\hbar q$ – изменение энергии и импульса электрона в результате неупругого рассеяния; $a_0 = \hbar^2 / mc^2$ – боровский радиус.

Аналитическое выражение для диэлектрической проницаемости

$\tilde{\varepsilon}(\mathbf{q}, \omega)$, зависящей от частоты и волнового вектора, известно лишь в некоторых простых случаях, например, в равновесном состоянии.

Таким образом, функция $\text{Im}(-1/\tilde{\varepsilon}(\mathbf{q}, \omega))$ оказывается определенной лишь в окрестности прямой $\mathbf{q} = \mathbf{0}$. Для расширения области определения $\text{Im}(-1/\tilde{\varepsilon}(\mathbf{0}, \omega))$ на всю плоскость можно воспользоваться методом экстраполяции, предложенным в работе [2]. Суть его заключается в том, что $\text{Im}(-1/\tilde{\varepsilon}(\mathbf{q}, \omega))$ представляется в виде интеграла по частотам возможных возбуждений плазмонов, при этом связь между ω, \mathbf{q} и плазменной частотой ω_p дается дисперсионным соотношением $\omega = \omega_q(\mathbf{q}, \mathbf{q}_p)$.

Интегрирование дважды дифференциального сечения (1) по всем возможным значениям переданного импульса (т.е. по всем возможным углам неупругого рассеяния) дает следующее выражение для дифференциального сечения по потерям энергии

$$\frac{d\sigma}{d(\hbar\omega)} = \int_0^{\hbar q_{\max}} \frac{d^2\sigma}{d(\hbar\omega)d(\hbar q)} d(\hbar q), \quad (2)$$

где $\hbar q_{\max}$ - максимально возможное значение переданного импульса. Конкретная форма зависимости дифференциальных сечений (1) и (2) определяется дисперсионным соотношением.

Рассмотрим эволюцию пространственно однородных систем частиц, подчиняющихся квантовой статистике, находящихся при постоянном воздействии источников, стоков частиц в пространстве энергий. Изучим эволюцию диэлектрической проницаемости этой системы под воздействием постоянных процессов ионизации в веществе.

Кинетическое уравнение для изотропной функции распределения частиц по энергии имеет вид уравнения непрерывности

$$\frac{\partial f}{\partial t} = -\frac{\partial}{g(\varepsilon)\partial\varepsilon} \prod \{f, f, \varepsilon\} + \Psi(\varepsilon) \quad (3)$$

с потоком в фазовом пространстве $\prod \{f, \varepsilon\}$ и источниками и стоками $\Psi(\varepsilon)$, которые в предположении о том, что они являются локализованными в пространстве энергий, могут быть записаны в виде

$$\Psi(\varepsilon) = \frac{Q_1}{g(\varepsilon)} \delta(\varepsilon - \varepsilon_1) + \frac{Q_2}{g(\varepsilon)} \delta(\varepsilon - \varepsilon_2) + \frac{Q_3}{g(\varepsilon)} \delta(\varepsilon - \varepsilon_3), \quad (4)$$

где Q_1, Q_2, Q_3 - мощности источников и стоков, а $\varepsilon_1, \varepsilon_2, \varepsilon_3$ - положения областей локализации источников и стоков в фазовом пространстве.

Поток можно представить в виде [3]:

$$\prod \{f, \varepsilon\} = \varepsilon g(\varepsilon) \mathcal{V}(\varepsilon) \left[T_0 \frac{\partial f}{\partial \varepsilon} + f - f^2 \right]. \quad (5)$$

В этом выражении плотность состояний для большинства случаев рассчитывается как $g(\varepsilon) = 4\sqrt{2}\pi m_e^{3/2} \sqrt{\varepsilon}$, $v(\varepsilon) = v_0 \left(\frac{\varepsilon}{T_e} \right)^4$, а значения ве-

личин v_0, q для различных механизмов взаимодействия электронов с фононами приведены в [2]. В качестве источника неравновесности для квазичастиц в полупроводниковых системах можно эффективно использовать дополнительные источники ионизации, возникающие в результате прохождения через твердотельное покрытие быстрых заряженных частиц (ионов) (например, α -частиц, возникающих при радиоактивном распаде). При этом происходит ионизация атомов вещества на длине их пробега, и образуются источники в энергетическом пространстве, которые (при теоретическом анализе) предполагаются локализованными в пространстве энергий. Использование подобных источников в полупроводниковых покрытиях существенно увеличивает возможности по качественному изменению дисперсионных свойств покрытия в неравновесных условиях, так как соотношение между плотностями неравновесной и равновесной компонент в этом случае могут изменяться в широких пределах и достигать достаточно больших значений. Для прояснения влияния интенсивности радиоизотопных источников на степень неравновесности состояний электронов в твердом теле приведем результаты численного решения кинетического уравнения.

Характер зависимости функции распределения от мощности источника продемонстрирован на рис. 1.

Двухкомпонентный (в фазовом пространстве) характер функции распределения приводит к существенному изменению дисперсии плазменных колебаний в твердотельной плазме. Рассмотрим неравновесное состояние с большой плотностью частиц в области энергий, близких к энергии ε_i (и соответственно скорости v_i) – характерной энергии источника высокоэнергичных частиц в системе. Диэлектрическая проницаемость

$$\varepsilon^{\ell}(\omega, \vec{q}) = 1 + \frac{4\pi e^2}{q^2} \int d\vec{p} \frac{1}{\omega - \vec{q}\vec{v}} \vec{q} \frac{\partial f}{\partial \vec{p}} \quad (6)$$

для такой функции распределения легко вычисляется. Дисперсия продольных колебаний в области малых волновых чисел при этом оказывается равной

$$\omega^2 = \frac{\omega_p^2}{\left(1 + \omega_{ps}^2 / q^2 v_i^2\right)}$$

и имеет акустический вид $\omega = c_s q$, $c_s = \sqrt{\frac{n}{n_s}} v_i$, при $q \ll \frac{\omega_{ps}}{v_i}$. Это

условие означает попадание фазовой скорости волны в область между равновесной и неравновесной частью функции распределения.

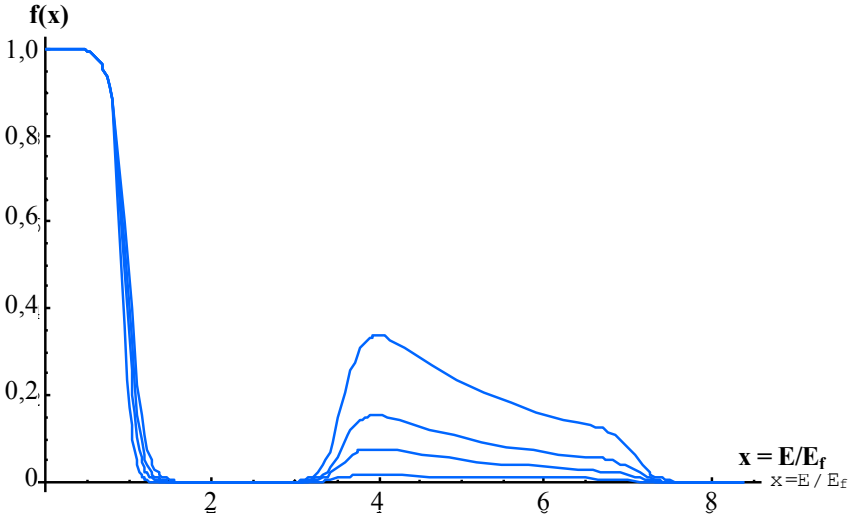


Рис.1. Графики функций распределения при $\Pi = -1.81, -0.81$

В столкновениях с большей передачей энергии и импульса электрон ведет себя как классический объект, поэтому $\omega_q \rightarrow \hbar q^2 / 2m$ при $q \rightarrow \infty$. Дисперсионные соотношения, удовлетворяющие этому условию, могут быть выбраны в различных формах. Например, мы можем использовать следующую интерполяционную форму

$$\varepsilon^\ell(\omega, \vec{q}) = 1 + \frac{\omega_{ps}^2}{q^2 v_i^2} - \frac{\omega_0^2 + \frac{1}{2} v_F^2 (\omega_0) q^2 + \left(\frac{\hbar q^2}{2m} \right)^2}{\omega_q^2} - i\pi f' \left(m \frac{\omega_q}{q} \right), \quad (7)$$

где v_F – скорость Ферми.

Эта аппроксимация приводит к закону дисперсии

$$\omega_q^2 = \frac{\omega_0^2 + \frac{1}{2} v_F^2 (\omega_0) q^2 + \left(\frac{\hbar q^2}{2m} \right)^2}{1 + \frac{\omega_{ps}^2}{q^2 v_i^2}}, \quad (8)$$

имеющему акустический вид в области малых волновых чисел и классический предел в области больших передач импульса.

Подстановка (1), (6) в (2) дает

$$\frac{d\sigma}{d(\hbar\omega)} = \int_0^{\hbar q_{\max}} \frac{1}{\pi a_0 q E} \operatorname{Im} \left(-\frac{1}{\tilde{\varepsilon}(\mathbf{q}, \omega)} \right) d(\hbar q). \quad (9)$$

При $\hbar\omega$ порядка десятков eV функция $\mathbf{W}(\hbar\omega)$ имеет достаточно сложную структуру, отражающую форму $\operatorname{Im}(-1/\varepsilon(\hbar\omega))$. Тем не менее, она может быть аппроксимирована аналитическим выражением, в которое, естественно, входит большое число параметров, определяющих положение и характер основных особенностей. Этот способ описания $\mathbf{W}(\hbar\omega)$ оказывается все же эффективнее, чем просто задание массивом значений, и несет в себе больше информации об ее структуре.

При численном моделировании траектории методом Монте-Карло для расчета потери энергии электрона и изменения направления его движения в результате неупругого взаимодействия с веществом последовательно решаются два трансцендентных уравнения.

Уравнение для определения потери энергии имеет вид

$$\mathbf{R} = \frac{\int_0^{Q\hbar\omega_{\max}} \frac{d\sigma}{d\hbar\omega} d\hbar\omega}{\int_0^{\hbar\omega_{\max}} \frac{d\hbar}{d\hbar\omega} d\hbar\omega} = \frac{G_1(\mathbf{E}, \mathbf{Q})}{G_1(\mathbf{E}, 1)}, \quad (10)$$

где \mathbf{Q} - относительная потеря энергии в неупругом столкновении; \mathbf{R} - случайное число, равномерно распределенное в интервале $[0,1]$; $\hbar\omega_{\max}$ - максимально возможная потеря энергии, которая определяется соотношением $\hbar\omega_{\max} = \min(\mathbf{E}, \mathbf{E} - \mathbf{E}_F)$, где \mathbf{F} - уровень Ферми.

Определение результатов неупругого рассеяния из (10) неэффективно, так как требует решения трансцендентного уравнения на каждом шаге численного моделирования траектории. В связи с этим имеет смысл рассмотреть функцию $\mathbf{Q}(\mathbf{E}, \mathbf{R})$, неявно определяемую соотношением (10).

Итак, при использовании аппроксимирующих зависимостей потери энергии в каждом неупругом столкновении вычисляются по простой аналитической формуле.

Перейдем теперь к расчету угла рассеяния в неупругом взаимодействии. Изменение направления движения электрона в результате неупругого столкновения определяется из трансцендентного уравнения

$$\mathbf{R} = \frac{G_2(\mathbf{E}, \hbar\omega, \theta)}{G_2(\mathbf{E}, \hbar\omega, \theta_{\max})}, \quad (11)$$

где \mathbf{R} , как и раньше, случайное число, равномерно распределенное в интервале $[0,1]$; через $G_2(\mathbf{E}, \hbar\omega, \theta)$ обозначен интеграл

$$G_2(\mathbf{E}, \hbar\omega, \theta) = \int_{\mathbf{B}(\mathbf{E}, \hbar\omega, \theta)}^{\mathbf{B}[\mathbf{E}, \hbar\omega, 0]} \frac{x}{\hbar\omega - x} \operatorname{Im} \left(\frac{-1}{\varepsilon(x)} \right) dx;$$

$$\mathbf{B}(\mathbf{E}, \hbar\omega, \theta) = 2 \left(\hbar\omega - \mathbf{E} + \cos \theta \sqrt{\mathbf{E}(\mathbf{E} - \hbar\omega)} \right). \quad (12)$$

Максимально возможный угол рассеяния θ_{\max} определяется уравнением

$$\mathbf{B}(\mathbf{E}, \hbar\omega, \theta_{\max}) = 0.$$

Отыскание угла рассеяния из соотношения (12) требует знания трехмерного массива значений интеграла $G_2(\mathbf{E}, \hbar\omega, \theta)$. Однако, вследствие того, что $G_2(\mathbf{E}, \hbar\omega, \theta)$ зависит от \mathbf{E} и θ лишь через пределы интегрирования, объем данных, необходимых для определения угла рассеяния, может быть значительно уменьшен.

Важным для многих приложений является определение высокоэнергетической проводимости в широкощелевых материалах, обусловленной тем, что при остывании электрона до энергии $\varepsilon \approx 1,5\varepsilon_g$ порядка ширины запрещенной зоны, резко уменьшается мощность энергетических потерь из-за невозможности дальнейшего возбуждения электронов из запрещенной зоны в зону проводимости. Основным каналом остывания электронов с энергиями в диапазоне $T < \varepsilon < 1,5\varepsilon_g$ является взаимодействие с оптическими фононами с интенсивностью потери энергии

$$Q_{d0} \approx \mu\omega_0\hbar\omega_0(\varepsilon/\hbar\omega_0)^{1/2}$$

и с термализованными при температуре T электронами

$$Q_T \approx \omega_0 / \mu^5 \hbar\omega_0 (N_T a^3) \hbar\omega_0 (\hbar\omega_0 / \varepsilon)^{1/2},$$

где ω_0 - частота оптического фонона; $(N_T a^3) \approx 10^{-11} W(x, t) \Gamma^{3/2}(x, t)^{1/2}$ - определяемое бинарными столкновениями число термализованных электронов в элементарной ячейке a^3 ; $W(x, t) \left[\frac{J}{\text{cm}^3 \cdot \text{ns}} \right]$ - интенсивность энерговыделения электронного пучка на глубине x в момент времени t и $\mu = (m/M)^{1/4} \approx 0,1$ - параметр малости.

При дальнейшем остывании электронов, $\epsilon < \hbar\omega_0$, испускание оптических фононов становится невозможным и оказывается эффективным лишь взаимодействие электронов с акустическими фононами.

Таким образом, величина высокоэнергетической проводимости

$$\sigma \approx \frac{e^2}{m_e} \int_{\max\{\Gamma, \eta\omega_0\}}^{1,2\epsilon_g} g(\epsilon) f(\epsilon) \tau_{\perp}(\epsilon) d\epsilon,$$

где $\tau_{\perp} \approx \tau_{g0} \approx \mu\omega_0 (\Gamma/\hbar\omega_0) \cdot (\epsilon/\hbar\omega_0)^{1/2}$ - время релаксации электронного импульса; $f(\epsilon)$ - неравновесная функция распределения высокоэнергетических электронов.

Представленный алгоритм позволяет эффективно, с точки зрения использования вычислительных ресурсов, моделировать неупругое взаимодействие электрона с веществом с учетом неравновесности, возникающей в веществе электронных состояний.

ЛИТЕРАТУРА

1. Пойнс Д. *Элементарные возбуждения в твердых телах.* – М.: Мир, 1965. – 382 с.
2. Ding Z.J. *Fundamental Studies on the Interactions of kV Electrons with solids for Applications to Electron Spectroscopies.* // PHD Thesis. Osaka University, 1990. – 219 p.
3. Петеркоп Р.К. *Теория ионизации атомов электронным ударом.* – Рига: Зинатне, 1975. – 190 с.

Поступила 30.04.2002

СОТНИКОВ Александр Михайлович, канд. техн. наук, доцент, нач. кафедры ХВУ. В 1980 году окончил ХВВКИУ РВ. Область научных интересов – противодействие системам обнаружения летательных аппаратов, взаимодействие электромагнитных волн с плазмой.

КОНЯХИН Григорий Фатеевич, канд. техн. наук, доцент, профессор кафедры ХВУ. В 1961 году окончил ХВАИВУ. Область научных интересов – противодействие системам обнаружения летательных аппаратов, взаимодействие электромагнитных волн с плазмой.

НОВИКОВ Валерий Евгеньевич, канд. физ.-мат. наук. В 1972 году окончил физфак ХГУ. Область научных интересов – кинетическая теория газовой и твердотельной плазмы, взаимодействие электромагнитных волн с плазмой.

КЛЕВЕЦ Сергей Иванович, адъюнкт кафедры ХВУ. В 1986 году окончил ЖВУРЭ ПВО. Область научных интересов – противодействие системам обнаружения летательных аппаратов, взаимодействие электромагнитных волн с плазмой.

БЕЛИМОВ Владимир Васильевич, зам. нач. учебной части факультета ХВУ. В 1994 году окончил ХВУ. Область научных интересов – противодействие системам обнаружения летательных аппаратов, взаимодействие электромагнитных волн с плазмой.