

ФИЗИКА

УДК 538.935

В.Г. Тютюрев

КВАЗИСТАЦИОНАРНЫЙ РЕЖИМ ЭЛЕКТРОН-РЕШЕТОЧНОЙ РЕЛАКСАЦИИ ВЫСОКОВОЗБУЖДЕННЫХ ЭЛЕКТРОНОВ В ДИЭЛЕКТРИКЕ

Томский государственный педагогический университет

Введение

Процессы, происходящие при импульсном воздействии пучка высокоэнергетических электронов на диэлектрический кристалл, согласно сложившимся представлениям [1] можно разделить на два этапа. Первичные электроны, обладающие энергией в несколько МэВ, попадая в кристалл, участвуют в процессах ударной и Оже-ионизации, создавая вторичные электроны. При этом электроны быстро теряют энергию. В области энергий, верхняя граница которой E_m , отсчитанная от дна зоны проводимости, приближенно равна значению ширины запрещенной зоны, электроны (первичные и порожденные ими вторичные) уже не обладают энергией, достаточной для выбивания электронов из валентной зоны. Далее электроны могут терять энергию только за счет значительно более медленных процессов электрон-фононного взаимодействия. За этой областью энергий закрепилось название электрон-дырочно пассивной (ЭДП) зоны [1].

Экспериментальные исследования [1, 2] показывают, что характерное время процессов электрон-дырочной релаксации энергии составляет величину порядка 10^{-14} с. За это время в ЭДП зоне формируется «мгновенное» распределение электронов [3]. Поскольку характерное время прохождения электроном ЭДП зоны составляет величину порядка 10^{-12} с, а продолжительность действия импульса внешнего электронного пучка обычно составляет величину порядка 10^{-9} с [1, 2], то в ЭДП зоне устанавливается некоторое квазистационарное неравновесное распределение электронов по энергиям [1, 2, 4], зависимость которого от времени определяется формой внешнего импульса.

В процессах релаксации энергии в ЭДП зоне главным образом участвуют фононы с большими волновыми векторами [4].

Кинетическое уравнение

Уравнение для временной зависимости числа заполнения $n_{\lambda k}$ электронного уровня энергии записывается в виде

$$dn_{\lambda k}(t)/dt = (1 - n_{\lambda k}(t)) \sum_{\lambda' k'} W_{\lambda k, \lambda' k'} n_{\lambda' k'}(t) -$$

$$- n_{\lambda k}(t) \sum_{\lambda' k'} W_{\lambda k, \lambda' k'} (1 - n_{\lambda' k'}(t)) + [dn_{\lambda k}/dt]_{ext}. \quad (1)$$

Здесь первое и второе слагаемые в правой части описывают соответственно приход и уход электронов за счет процессов рассеяния, последний член учитывает наличие внешнего источника электронов.

Вероятность рассеяния электронов в единицу времени на колебаниях решетки из состояния с волновой функцией $\Psi_{\lambda k}$ и энергией $E_{\lambda k}$ в состояние с $\Psi_{\lambda' k'}$, $E_{\lambda' k'}$ записывается в виде

$$W_{\lambda k, \lambda' k'} = \sum_{\sigma q} P_{\lambda k, \lambda' k'}(\sigma q) \left(Q_{\sigma q}(t) + \frac{1}{2} \pm \frac{1}{2} \right) \times \\ \times \delta(E_{\lambda k} - E_{\lambda' k'} \mp \hbar \omega_{\sigma q}) \delta_{\mathbf{k}-\mathbf{k}' \mp \mathbf{q} + \mathbf{K}}. \quad (2)$$

Здесь λ – номер зоны, \mathbf{k} – волновой вектор электрона, $\hbar \omega_{\sigma q}$ – энергия фонона ветви σ с волновым вектором \mathbf{q} , $Q_{\sigma q}$ – число заполнения фонона, \mathbf{K} – вектор обратной решетки, учитывающий процессы переброса.

$$P_{\lambda k, \lambda' k'}(\sigma q) = \frac{2\pi}{\hbar} \left| \sum_s \sqrt{\frac{\hbar}{2m_s \omega_{\sigma q}}} (\mathbf{D}_{\lambda k, \lambda' k'}^s \mathbf{e}^s(\sigma q)) \right|^2, \quad (3)$$

где N – число ячеек в основном блоке кристалла, s – номер атома в ячейке, m_s – его масса,

$$\mathbf{D}_{\lambda k, \lambda' k'}^s = N^{-1} \langle \Psi_{\lambda k} | \nabla V_s | \Psi_{\lambda' k'} \rangle \quad (4)$$

– деформационный потенциал, $\mathbf{e}^s(\sigma q)$ – вектор поляризации фонона, ∇V_s – градиент атомного потенциала.

Предполагая характерное время релаксации импульса малым по сравнению с временем релаксации энергии, можем считать, что числа заполнения зависят только от энергии

$$n_{\lambda k}(t) = n(t, E_{\lambda k}), \quad Q_{\sigma q}(t) = Q(t, \hbar \omega_{\sigma q}). \quad (5)$$

Введем характеристическую функцию электрон-фононной связи соотношением

$$F^{(\pm)}(E, \varepsilon) = G^{-1}(E) \sum_{\mathbf{q}} \sum_{\mathbf{k} \mathbf{k}' \lambda \lambda' \sigma} \delta(E - E_{\lambda k}) P_{\lambda k, \lambda' k'}(\sigma q) \times \\ \times \delta_{\mathbf{k}-\mathbf{k}' \pm \mathbf{q} + \mathbf{K}} \delta(\varepsilon - \hbar \omega_{\sigma q}) \delta(E \pm \varepsilon - E_{\lambda' k'}). \quad (6)$$

В теории сверхпроводимости в металлах эта величина при значении E , равном энергии Ферми, известна как функция Элиашберга. Здесь

$$G(E) = \sum_{\lambda\kappa} \delta(E - E_{\lambda\kappa}) \quad (7)$$

– плотность электронных состояний. Уравнение (1) записывается как интегродифференциальное:

$$\begin{aligned} \partial n(t, E) / \partial t = & (1 - n(t, E)) \int n(t, E + \varepsilon) F^{(+)}(E, \varepsilon) d\varepsilon - \\ & - n(t, E) \int (1 - n(t, E - \varepsilon)) F^{(-)}(E, \varepsilon) d\varepsilon + \\ & + \int Q(t, \varepsilon) (n(t, E + \varepsilon) - n(t, E)) F^{(+)}(E, \varepsilon) d\varepsilon + \\ & + \int Q(t, \varepsilon) (n(t, E - \varepsilon) - n(t, E)) F^{(-)}(E, \varepsilon) d\varepsilon + \\ & + [\partial n(t, E) / \partial t]_{ext}. \end{aligned} \quad (8)$$

Модель эффективного фонона

При наличии плоских фононных зон выполнение условия сохранения импульса $\delta_{\mathbf{k}-\mathbf{k}'\pm\mathbf{q}}$ практически всегда обеспечивается [5], величина $P_{\lambda\kappa, \lambda'\kappa'}(\sigma\mathbf{q})$ для конечных величин волновых векторов слабо зависит от $\mathbf{k}, \mathbf{k}', \mathbf{q}$. В связи с этим представляется разумным приближение [4]

$$\begin{aligned} W_{\lambda\kappa, \lambda'\kappa'} = & P \left(Q(t, \varepsilon) + \frac{1}{2} \pm \frac{1}{2} \right) \times \\ & \times \delta(E_{\lambda\kappa} - E_{\lambda'\kappa'} \mp \varepsilon_0) \delta_{\mathbf{k}-\mathbf{k}'\mp\mathbf{q}+\mathbf{K}}, \end{aligned} \quad (9)$$

где P – усредненный параметр электрон-фононной связи; ε_0 – средняя энергия «эффективного» коротковолнового фонона, которая лежит в области порядка 0.01 эВ. Тогда функция (6) принимает простой вид

$$F^{(\pm)}(E, \varepsilon) = P \delta(\varepsilon - \varepsilon_0) G(E) G(E \pm \varepsilon_0), \quad (10)$$

что позволяет свести уравнение (8) к дифференциально-разностному виду

$$\begin{aligned} \partial n(t, E) / \partial t = & \\ = & PG(E) \left[(1 - n(t, E)) n(t, E + \varepsilon_0) G(E + \varepsilon_0) - \right. \\ & \left. - n(t, E) (1 - n(t, E - \varepsilon_0)) G(E - \varepsilon_0) \right] + \\ & + PQ(t, \varepsilon_0) G(E) (n(t, E + \varepsilon_0) - n(t, E)) G(E + \varepsilon_0) + \\ & + PQ(t, \varepsilon_0) G(E) (n(t, E - \varepsilon_0) - n(t, E)) G(E - \varepsilon_0) + \\ & + [\partial n(t, E) / \partial t]_{ext}. \end{aligned} \quad (11)$$

Ввиду малости величины $\varepsilon_0 \ll E_m$ уравнение (11) с точностью до квадратичных по ε_0^2 членов приводится к дифференциальному. Здесь E_m – характерная энергия, которая определяет верхнюю границу ЭДП зоны, в которой основную роль играет электрон-фононный механизм релаксации энергии.

$$\begin{aligned} \frac{\partial n(t, E)}{\partial t} = & P\varepsilon_0 \frac{1}{G(E)} \frac{\partial}{\partial E} (G^2(E) n(t, E)) - \\ & - P\varepsilon_0 \frac{1}{G(E)} \frac{\partial}{\partial E} (G^2(E) n^2(t, E)) + \\ & + P \left(Q(t, \varepsilon_0) + \frac{1}{2} \right) \varepsilon_0^2 \frac{1}{G(E)} \frac{\partial}{\partial E} \left(G^2(E) \frac{\partial}{\partial E} n(t, E) \right) + \\ & + [\partial n(t, E) / \partial t]_{ext}. \end{aligned} \quad (12)$$

Стационарное решение

В хорошем приближении можно пренебречь зависимостью фононных чисел заполнения от времени $Q(t, \varepsilon_0) = Q_0$. Нетрудно проверить непосредственным вычислением, что в отсутствие внешнего источника существует стационарное решение нелинейного уравнения (12) в форме фермиевского распределения

$$n(E) = \frac{1}{2} \left(1 - \text{th} \frac{E + c}{\varepsilon_0 (2Q_0 + 1)} \right). \quad (13)$$

Константа c определяется нормировкой.

Скорость релаксации энергии

В условиях эксперимента можно считать средние числа заполнения электронов малыми $n(t, E) \ll 1$ и пренебречь в (12) нелинейными членами. Кроме того, можно также пренебречь процессами вынужденного поглощения и испускания фононов, положив $Q_0 = 0$. Линеаризованное кинетическое уравнение (12) без источника принимает вид

$$\frac{\partial n(t, E)}{\partial t} = P\varepsilon_0 \frac{1}{G(E)} \frac{\partial}{\partial E} (G^2(E) n(t, E)). \quad (14)$$

Подстановкой $q(t, E(u)) = G^2(E) n(t, E)$, где

$$u(E) = (P\varepsilon_0)^{-1} \int_0^E G^{-1}(E) dE, \quad (15)$$

уравнение (14) сводится к форме

$$\frac{\partial q(t, u)}{\partial t} = \frac{\partial q(t, u)}{\partial u}. \quad (16)$$

Тогда решение для $n(t, E)$ запишется в виде

$$n(t, E) = G^{-2}(E) \Phi \left(t + (P\varepsilon_0)^{-1} \int_0^E G^{-1}(E) dE \right), \quad (17)$$

где $\Phi(t)$ – функция произвольного вида. Задание при $t = 0$ дельтаобразного распределения электронов, созданного на границе ЭДП зоны при энергии E_m , определяет его эволюцию в процессе релаксации соотношением

$$n(t, E) = G^{-2}(E) \delta \left(t + (P\varepsilon_0)^{-1} \int_{E_m}^E G^{-1}(E) dE \right). \quad (18)$$

Уравнение

$$t + (P\varepsilon_0)^{-1} \int_{E_m}^E G^{-1}(E) dE = 0 \quad (19)$$

формально определяет положение электрона на шкале энергий E в момент времени t , отсюда

$$dt/dE = -(P\varepsilon_0)^{-1} G^{-1}(E). \quad (20)$$

Время, за которое электрон в процессе релаксации «опускается» с уровня энергии E_m на дно зоны, определяется выражением

$$\tau_m = (P\varepsilon_0)^{-1} \int_0^E G^{-1}(E) dE. \quad (21)$$

Рассматривая положение электрона на шкале энергий как функцию времени, можем записать

$$dE/dt = -P\varepsilon_0 G(E). \quad (22)$$

Следовательно, скорость «падения» отдельного электрона в шкале энергий в модели эффективного коротковолнового фона пропорциональна плотности состояний.

Связь с функцией мощности потерь энергии

Изменение энергии в единицу времени всех электронов, находящихся в интервале энергий от E до $E+dE$, запишем в виде

$$dP(E) = \sum_{\lambda\lambda'} \sum_{kk'} \delta(E - E_{\lambda k})(E_{\lambda k} - E_{\lambda' k'}) W_{\lambda k, \lambda' k'} dE. \quad (23)$$

Величина

$$B(E) = -G^{-1}(E) \frac{dP(E)}{dE} \quad (24)$$

имеет смысл скорости потерь энергии (мощности потерь) отдельным электроном, находящимся на уровне энергии E . С учетом соотношения (6) ее можно переписать в виде

$$B(E) = \iint \left[(Q(t, \varepsilon) + 1) F^{(-)}(E, \varepsilon) - Q(t, \varepsilon) F^{(+)}(E, \varepsilon) \right] \varepsilon d\varepsilon. \quad (25)$$

В модели эффективного фона она приобретает простой вид

$$B(E) = P\varepsilon_0 G(E) \quad (26)$$

и, следовательно, согласно (22), совпадает со скоростью электрона в шкале энергий $dE/dt = -B(E)$. Среднее значение мощности потерь энергии запишется в виде

$$\langle B \rangle = E_m^{-1} \int_0^{E_m} B(E) dE = E_m^{-1} N_m P\varepsilon_0, \quad (27)$$

где $N_m = \int_0^{E_m} G(E) dE$ – полное число электронных состояний в ЭДП зоне. Определяя среднюю мощность потерь энергии как отношение средней энергии фо-

нона ε_0 к среднему времени его испускания электроном τ_0 , из (26) получаем связь между τ_0 и усредненным параметром электрон-фононной связи P в виде $\tau_0 = E_m / PN_m$.

Квазистационарное решение

Для исследования свойств квазистационарного решения в этой модели полезно вернуться к дифференциально-разностному кинетическому уравнению (11), которое в линеаризованной форме имеет вид

$$\begin{aligned} \partial n(t, E) / \partial t = Pn(t, E + \varepsilon_0) G(E + \varepsilon_0) - \\ - Pn(t, E) G(E - \varepsilon_0) + \left[\partial n(t, E) / \partial t \right]_{ext}. \end{aligned} \quad (28)$$

Аналитическое решение дифференциально-разностного уравнения (28) удастся найти на сетке точек $E_k = k \times \varepsilon_0$, где k – целые числа, поскольку в этом случае оно сводится к системе обыкновенных дифференциальных уравнений. Имея в виду ограниченность плотности состояний снизу ($G(E) = 0$, если $E \leq 0$) и граничное условие $n(t, E) = 0$ при $E > E_m$, запишем эту систему в виде

$$\begin{aligned} dn_0/dt = n_1(t) g_1 + h_0(t), \\ dn_1/dt = n_2(t) g_2 + h_2(t), \\ dn_2/dt = n_3(t) g_3 - n_2(t) g_1 + h_3(t), \\ dn_k/dt = n_{k+1}(t) g_{k+1} - n_k(t) g_{k-1} + h_k(t), \\ dn_{m-1}/dt = n_m(t) g_m - n_{m-1}(t) g_{m-2} + h_{m-1}(t), \\ dn_m/dt = -n_m(t) g_{m-1} + h_m(t), \end{aligned} \quad (29)$$

где

$$n_k(t) = n(t, k\varepsilon_0), \quad g_k = PG(k\varepsilon_0),$$

$$h_k(t) = \left[\partial n(t, k\varepsilon_0) / \partial t \right]_{ext}.$$

Максимальное значение индекса m соответствует верхней границе ЭДП зоны $E_m = m\varepsilon_0$. Решение последнего из уравнений системы (29) можно записать в виде

$$\begin{aligned} n_m(t) = h_m(t) g_{m-1}^{-1} (1 - \exp(-g_{m-1}t)) - \\ - g_{m-1}^{-1} \int_0^t \frac{dh_m(\tau)}{d\tau} (1 - \exp(-g_{m-1}\tau)) d\tau + \\ + C \exp(-g_{m-1}t), \end{aligned} \quad (30)$$

C – константа интегрирования. Предполагая медленное изменение внешнего источника со временем, $g_{m-1}^{-1} dh_m(t)/dt \ll 1$, опуская затухающие через время $\tau_m = g_{m-1}^{-1}$ члены, получим

$$n_m(t) = g_{m-1}^{-1} h_m(t). \quad (31)$$

Интегрирование предпоследнего уравнения из системы (29) при тех же условиях дает через время $\tau_{m-1} = 1/g_{m-2} + \tau_m$ решение в виде

$$n_{m-1}(t) = \frac{1}{g_{m-1}g_{m-2}}(h_m(t) + h_{m-1}(t)g_{m-1}). \quad (32)$$

Повторяя процедуру рекуррентным образом и пренебрегая в дальнейшем малым вкладом в сумму от члена $h_m(t)$, получим

$$n_k(t) = \frac{1}{g_k g_{k-1}} \sum_{s=k}^{m-1} h_s(t) g_s. \quad (33)$$

Эта формула справедлива вплоть до $k=2$ по истечении времени $\tau_k = \sum_{s=k}^{m-1} 1/g_s$.

Для ближайших к дну зоны значений энергии, соответствующих решению первого и второго уравнений системы (29), эти формулы заменяются на

$$n_1(t) = g_1^{-1} \sum_{s=0}^{m-1} g_{m-s} \int_0^t h_{m-s}(t) dt + C \quad (34)$$

$$n_0(t) = \sum_{s=0}^{m-1} g_{m-s} \int_0^t \int_0^{\tau} h_{m-s}(\tau') d\tau' d\tau + \int_0^t h_0(\tau) d\tau + C. \quad (35)$$

Таким образом, в диапазоне энергий $\epsilon_0 < E < E_m$ устанавливается квазистационарное распределение электронов (33), временная зависимость которого определяется временной разверткой $h_k(t)$ внешнего источника электронов. Учитывая малость величины ϵ_0 , заменим суммирование интегрированием и с точностью до малых членов перепишем квазистационарное распределение (33) в виде, справедливом в указанном диапазоне энергий:

$$n(t, E) = \frac{1}{P\epsilon_0 G^2(E)} \int_E^{E_m} G(E) [\partial n(t, E) / \partial t]_{ext} dE. \quad (36)$$

Это распределение устанавливается через время

$$\tau = (P\epsilon_0)^{-1} \int_{\epsilon_0}^{E_m} G^{-1}(E) dE. \quad (37)$$

Вблизи дна зоны при энергиях $E < \epsilon_0$ распределение (34), (35) уже не является квазистационарным. В этой области, известной в литературе [1, 2] как область энергий, пассивная относительно оптического фонона, происходит накопление электронов. Релаксация энергии связана с иными механизмами и требует отдельного рассмотрения.

Функция распределения

Для практических вычислений [4] удобно ввести функцию распределения электронов $f(t, E)$, связанную со средним числом заполнения соотношением

$$f(t, E) = n(t, E) G(E). \quad (38)$$

Соответственно ее изменение за счет внешнего источника запишется в виде

$$[\partial f(t, E) / \partial t]_{ext} = G(E) [\partial n(t, E) / \partial t]_{ext}. \quad (39)$$

Функцию внешнего источника удобно записать в форме

$$[\partial f(t, E) / \partial t]_{ext} = Y(t) S(E). \quad (40)$$

Здесь $Y(t)$ – количество внешних (первичных) электронов, попадающих в единицу объема кристалла в интервале времени от t до $t + dt$, эта величина определяется формой импульса электронного пучка; $S(E)$ – мгновенное распределение электронов в ЭДП зоне, т.е. количество вторичных электронов в расчете на единичный интервал энергии, которое создает в ней каждый первичный электрон за счет процессов электрон-электронных столкновений. Тогда квазистационарное распределение для функции распределения перепишется в виде

$$f(t, E) = Y(t) B^{-1}(E) \int_E^{E_m} S(E) dE. \quad (41)$$

Как видно из (41), в принятой модели временная зависимость квазистационарной функции распределения $f(t, E)$ повторяет форму импульса внешнего источника электронов.

Литература

1. Вайсбурд Д.И., Семин Б.И., Таванов Э.Г. и др. Высокоэнергетическая электроника твердого тела. Новосибирск, 1982.
2. Vaisburd D. Nonlinear physics of solid dielectrics charging-discharging dynamics under the action of pulsed high-current-density electron beams // Science, technique et applications. 1995.
3. Вайсбурд Д.И., Евдокимов К.Е. «Мгновенное» распределение ионизационно-пассивных электронов и дырок в диэлектрике при облучении интенсивным электронным или лазерным пучком // Изв. вузов. Физика. 2004. № 11.
4. Vaisburd D.I. et al. Ultrafast stages of electron relaxation in a dielectric excited by high-current density electron beam // Современные проблемы физики и высокие технологии. Томск, 2003.
5. Raunio G. et al. Phonon dispersion relations in NaCl // Phys. Rev. 1969. V. 178. № 3.