

01,05

О характерных временах термализации электронов в диэлектрических средах

© С.В. Ивлиев, В.К. Ляпидевский, М.И. Рязанов

Московский инженерно-физический институт,
115409 Москва, Россия

(Поступило в Редакцию 12 февраля 1996 г.)

Получено приближенное решение кинетического уравнения термализации электронов с энергиями ниже потенциала ионизации атома. Результаты применяются для оценки времени термализации и удаления электрона ионизации от своего атома в газообразном и жидком состояниях инертных газов.

Введение

Выбитые из атомов быстрой частицей первичные электроны ионизации удаляются от своих ионов на значительные расстояния, так что их влияние на ионы оказывается слабым. Таким образом, в течение некоторого времени в области вблизи этих ионов возникает локальное нарушение зарядовой нейтральности диэлектрика, играющее роль в образовании трека частицы. Время существования локального нарушения нейтральности зависит от времени термализации первичных электронов. Поэтому представляет интерес оценка величины времени термализации и обсуждение различных механизмов термализации горячих электронов с энергией, меньшей, чем потенциал ионизации атома ($I = 10$ эВ), но большей, чем тепловая энергия ($kT = 0.025$ эВ). Численные расчеты времени термализации быстрых электронов в газах проводились в [1–3], упрощающие предположения, сделанные в этих работах, были проверены методом моментов в [4] и показано, что для модели жестких сфер расхождение достигает 25%, хотя в других случаях расхождение меньше.

Точная теория термализации электронов требует знания точных сечений для различных процессов взаимодействия электронов с веществом во всем рассматриваемом диапазоне энергий. Однако расчет таких сечений достаточно труден и во многих случаях сечения теоретически не были вычислены. Экспериментальные измерения сечений также не могут дать полной картины их энергетической и угловой зависимости во всей рассматриваемой области энергий. В такой ситуации точные результаты теории должны либо дожидаться получения точных данных о сечениях, либо использовать интерполированные по имеющимся данным сечения.

С другой стороны, время термализации, представляющее основной интерес, очевидно, является некоторой усредненной характеристикой вещества и для его вычисления необязательно знание всех деталей поведения сечений. При таком положении вещей особый интерес приобретает развитие приближенных методов рассмотрения, когда нужно не детальное знание поведения сечений, а некоторые общие интегральные характеристики свойств вещества, расчеты или измерения которых не столь трудоемки.

Кинетическое уравнение для термализации горячих электронов

Для электронов с энергией меньше потенциала ионизации атома длина волны больше атомных размеров, поэтому рассеяние на атомах практически изотропно, а потери энергии возникают за счет отдачи атомов при упругих столкновениях, возбуждения молекул при неупругих столкновениях и генерации низкоэнергетических коллективных возбуждений вещества, в частности фононов. Для описания поведения замедляющихся электронов введем функцию распределения электронов по координатам и импульсам $f(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t)$. Если не учитывать процессов захвата электронов на ловушки в веществе, то кинетическое уравнение, которому подчиняется функция распределения электронов, будет иметь вид [5]

$$\left\{ \frac{d}{dt} + \mathbf{v}d/d\mathbf{p} + \mathbf{F}d/d\mathbf{r} \right\} f(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t) = \int d^3p' \left\{ w(\mathbf{p}, \mathbf{p}') \delta[E - E' + \delta E(\mathbf{p}, \mathbf{p}')] f(\mathbf{r}, \mathbf{p}', t) - w(\mathbf{p}, \mathbf{p}) \delta[E - E' + \delta E(\mathbf{p}, \mathbf{p})] f(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t) \right\}, \quad (1)$$

где $E = p^2/2m$; $E' = p'^2/2m$; $\mathbf{v} = \mathbf{p}/m$; m — масса электрона; $w(\mathbf{p}, \mathbf{p}') \delta[E - E' + \delta E(\mathbf{p}, \mathbf{p}')]$ — вероятность перехода электрона из состояния с импульсом p в состояние с импульсом p' в интервал импульсов d^3p' за единицу времени; $\delta E(\mathbf{p}, \mathbf{p}')$ — переданная атому в процессе столкновения энергия, \mathbf{F} — действующая на электрон со стороны ионизованного атома сила.

В начальной стадии кинетическая энергия электрона велика по сравнению с потенциальной, так что действием этой силы можно пренебречь. Роль этой силы в дальнейшем зависит от того, что сильнее убывает — кинетическая энергия электрона из-за его замедления или потенциальная энергия электрона из-за его удаления от ионизованного атома. Поэтому в первом приближении силу \mathbf{F} можно опустить. Используя решение первого приближения, ниже будет получена оценка величины поправок, обусловленных кулоновским взаимодействием электрона с ионом.

В рассматриваемой области энергий электронов потери энергии при одном столкновении относительно малы,

т.е. можно считать, что $\delta E(\mathbf{p}, \mathbf{p}') \ll E$. Это позволяет преобразовать кинетическое уравнение (1) к уравнению типа Фоккера–Планка, описывающему диффузию в энергетическом пространстве, преходя от функции распределения $f(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t)$ к функции, описывающей распределение электронов по энергиям,

$$n(\mathbf{r}, E, T) = (1/4\pi) \int d\Omega_{\mathbf{p}} f(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t). \quad (2)$$

Из (1) следует уравнение для $n(\mathbf{r}, E, t)$

$$\left[d/dt - D(E)\Delta \right] n(\mathbf{r}, E, t) = \int d^3 p' \delta E(\mathbf{p}, \mathbf{p}') \delta(E - E') \times \left\{ w(\mathbf{p}, \mathbf{p}') n(\mathbf{r}, E', t) - w(\mathbf{p}, \mathbf{p}) n(\mathbf{r}, E, t) \right\}. \quad (3)$$

Здесь ($pp' = pp' \cos \theta$)

$$D(E) = (v^2/3) \int d^3 p' w(\mathbf{p}, \mathbf{p}') \delta(E - E') (1 - \cos \theta). \quad (4)$$

Подчеркнем, что зависимость коэффициента диффузии от энергии электронов здесь является принципиальной, поскольку в процессе термализации энергия электронов меняется на три порядка. Так как при малых энергиях сечение взаимодействия электронов с атомами и молекулами практически изотропно, то можно пренебречь косинусом под знаком интеграла в (4). Тогда коэффициент диффузии может быть выражен через длину свободного пробега электрона $l(E)$ с помощью соотношения

$$D(E) = \left\{ v/3n\sigma(E) \right\} = vl(E)/3, \quad (5)$$

где n — число атомов на единицу объема вещества, $\sigma(E)$ — полное сечение рассеяния электрона с энергией E на отдельном атоме.

Введем теперь функцию потери энергии

$$g(E) = \int d^3 p' w(\mathbf{p}, \mathbf{p}') \delta E(\mathbf{p}, \mathbf{p}') \delta(E - E') \quad (6)$$

и новую переменную размерности квадрата длины, аналогичную "возрасту" в теории замедления нейтронов [6]

$$T = T(E) = \int_{E_0}^E dE' D(E')/g(E'). \quad (7)$$

Из (7) можно найти и обратную зависимость $E(T)$, позволяющую легко преобразовать любую функцию E в функцию переменной T . Перейдем к описанию распределения электронов с помощью функции

$$N(\mathbf{r}, T, t) = E(T)^{1/2} g(E(T)) n(\mathbf{r}, E(T), t), \quad (8)$$

для которой из (3) можно получить уравнение

$$\left[1/D(T) \right] (dN(\mathbf{r}, T, t)/dt) = \left\{ \Delta - d/dT \right\} N(\mathbf{r}, T, t). \quad (9)$$

Если в начале координат имеется источник частиц, испускающий в момент времени $t = 0$ некоторое число частиц с заданной энергией, то это может быть учтено добавлением в (9) плотности источников, что дает вместо (9) уравнение

$$\left\{ D(T)^{-1} d/dt + d/dT - \Delta \right\} N(\mathbf{r}, T, t) = q\delta(\mathbf{r}) \delta(T) \delta(t). \quad (10)$$

Это уравнение решается точно с помощью преобразований Фурье и Лапласа и его решением является функция ($T > 0$)

$$N(\mathbf{r}, T, t) = qr^{-3/2} \exp[-r^2/4T] \delta\{t - T_0 dT' D(T')^{-1}\}. \quad (11)$$

Отсюда следует, что в рассматриваемом приближении пространственное распределение термализующихся электронов имеет форму гауссовского распределения с шириной, определяемой "возрастом" T электрона, а время t и энергия E жестко связаны между собой соотношением

$$t = \int_0^{T(E)} dT' D(T')^{-1}. \quad (12)$$

Такой характер связи между временем замедления и энергией частицы является характерной чертой использованного выше при выводе приближения "непрерывного замедления", в котором пренебрегается флуктуациями энергетических потерь электрона в одном столкновении. Среднее расстояние, на которое электрон уходит от своего атома, определяется выражением

$$\langle r \rangle = \langle r^2 \rangle^{1/2} = (6T(E))^{1/2}, \quad (13)$$

т.е. является функцией энергии частицы, или с учетом (12) функцией времени t . Преимуществом используемого приближения нужно считать возможность оценить и сравнить с помощью полученных выше соотношений (12) и (13) время термализации и удаление электрона от своего атома для разных веществ, отличающихся друг от друга различными механизмами диссипации энергии. Конкретные свойства замедляющей среды входят только в определение коэффициента диффузии $D(E)$ и возраста $T(E)$.

Время термализации в инертных газах

В рассматриваемой области энергии электронов неупругие столкновения с атомами инертных газов играют малую роль из-за больших величин энергии возбуждения таких атомов. Поэтому в одноатомных газах основным механизмом потери энергии электрона являются упругие столкновения с потерей энергии на отдачу атома. Для оценки будем считать, что сечение упругого столкновения слабо зависит от энергии и углов, тогда, учитывая сказанное выше, нетрудно получить (M — масса атома)

$$g(E) = (2Em/M)(v/l); \quad E = E_0 \exp\left\{-6Tm/Ml^2\right\}. \quad (14)$$

Временем термализации t_{term} называется время замедления электрона до конечной энергии E_T , равной тепловой энергии. Из (14) следует, что в инертном газе время термализации зависит от начальной энергии электрона $E_0 = (1/2)mv_0^2$ как

$$t_{\text{term}} = (lM/mv_0) \left\{ [E_0/E_T]^{1/2} - 1 \right\}. \quad (15)$$

Среднее расстояние, на которое уходит от своего атома первичный электрон ионизации в инертном газе, в соответствии с (13) имеет вид

$$\langle r \rangle = l \left[(M/m) \ln(E_0/E_T) \right]^{1/2}. \quad (16)$$

Сделанное выше предположение о слабой зависимости сечения рассеяния от энергии справедливо лишь для легких атомов инертных газов, гелия и неона, к которым и применимы соотношения (15), (16). Для более тяжелых инертных газов (Ar, Kr, Xe) существует резкий минимум сечения рассеяния при энергиях электронов порядка 0.4 эВ (эффект Рамзауэра–Таунсенда), так что при интегрировании в (7) нельзя пренебречь зависимостью сечения рассеяния от энергии. Существование резкого минимума в сечении приводит к тому, что, достигнув энергии порядка 0.4 эВ, электроны почти перестают замедляться. Это приводит к существенному увеличению времени термализации электрона. Полезно подчеркнуть, что выражения (15) и (16) получены для частного случая слабо зависящего от углов и энергий сечения рассеяния и поэтому неприменимы для сильно меняющихся с энергией сечений. Для грубой оценки времени термализации электрона в тяжелых инертных газах можно использовать следующие рассуждения. За время dt электрон с энергией E совершает $(vdt/n\sigma(E))$ столкновений, теряя за это время энергию порядка

$$\begin{aligned} dE &= -\delta E(\mathbf{p}, \mathbf{p}') (v/n\sigma(E)) dt \\ &= -2(m/M) E [2E/m]^{1/2} n\sigma(E) dt. \end{aligned} \quad (17)$$

Интегрируя это выражение от начального значения энергии до тепловой энергии E_T , нетрудно получить для времени термализации значение

$$t_{\text{term}} = (M/2n)(1/2m)^{1/2} \int_{E_T}^{E_0} dE E^{-3/2} (1/\sigma(E)). \quad (18)$$

В частном случае не меняющегося с энергией сечения результат совпадает с (15). Из (18) можно видеть, что основной вклад в интеграл дает область энергий, близких к нижнему пределу. Другими словами, время термализации набирается в основном в конце процесса термализации и существование минимума в зависимости сечения от энергии может существенно изменить результат.

Для среднего расстояния, на которое уходит электрон от своего атома, существенна не конечная, а начальная

стадия процесса термализации, когда электрон может за малые промежутки времени проходить сравнительно большие расстояния. Поэтому существование минимума сечения по энергии в конечной стадии термализации, не дает существенного вклада в расстояние от атома. Отсюда следует, что для оценки расстояния, на которое электрон удалится от своего атома, использованное выше приближение не зависящего от энергии сечения применимо в более широкой области, чем для времени термализации электрона.

Возбуждение колебательных и вращательных степеней свободы в двухатомных газах

В двухатомных газах кроме потерь энергии на упругие столкновения возможны также и потери энергии на возбуждение колебательных и вращательных степеней свободы молекул. При столкновении с молекулой такого газа значения потерянной электроном энергии дискретны, а сечение взаимодействия по порядку величины совпадает с сечением упругого рассеяния. Предполагая по-прежнему слабую зависимость сечения от энергий и углов и обозначив через ξ среднюю величину потерянной за одно столкновение энергии, можно написать вместо (6)

$$g(E) = \xi(v/l),$$

что дает при подстановке в (12) и (13) время термализации в виде

$$t_{\text{term}} = (ml/\xi)(v_0 - v_T) \quad (19)$$

и для среднего расстояния, на которое электрон ушел от своего атома, выражение

$$\langle r \rangle = l \left[(E_0 - E_T)(2/\xi) \right]^{1/2}. \quad (20)$$

Потери на возбуждение колебательных и вращательных степеней свободы оказываются более существенными и они определяют ход процесса замедления до тех пор, пока энергии электрона хватает на возбуждение этих дискретных уровней энергии. При меньших энергиях дальнейший процесс термализации идет за счет упругих столкновений. Условие малого влияния кулоновского поля в области потерь на возбуждение колебательных и вращательных уровней выполняется; при меньших энергиях ситуация та же, что и для потерь на упругие столкновения.

Возбуждение акустических фононов в жидкостях

Рассмотрим теперь процесс термализации электронов в жидких диэлектриках за счет возбуждения акустических фононов. Потерянная при одном акте взаимодействия энергия имеет вид

$$\delta E(\mathbf{p}, \mathbf{p}') = c|\mathbf{p} - \mathbf{p}'|,$$

где c — скорость звука.

Подстановка этого выражения в (5) и (6) приводит к соотношениям для функции потери энергии

$$g(E) = (4/3)mv^2(c/l) \quad (21)$$

и для переменной возраста

$$T = (v_0 - v)(l^2/4c). \quad (22)$$

Используя (21) и (22), нетрудно получить выражение для времени термализации из-за потерь энергии на образование акустических фононов

$$t_{\text{term}} = (3l/4c) \ln(v_0/v_T). \quad (23)$$

Среднее расстояние, на которое уходит электрон от своего атома, имеет в этом случае вид

$$\langle r \rangle = l[(3/2c)(v_0 - v_T)]^{1/2}. \quad (24)$$

Влияние кулоновского поля

Оценим теперь поправки, связанные с учетом влияния кулоновского поля. Учет кулоновского поля приводит к тому, что к кинетической энергии частицы добавляется отрицательная потенциальная энергия $U(\mathbf{r}) = -(e^2/r)$. Рассмотрим поправки, возникающие в области, где $|U|$ мало по сравнению с E . Предположим, что известна точная зависимость среднего расстояния, на которое уходит электрон, от энергии с учетом кулоновского поля $E' = E + U$, $\langle r(E') \rangle$. При $|U| \ll E$ можно написать

$$\langle r(E + U) \rangle = \langle r(E) \rangle + \langle U \rangle (d\langle r(E) \rangle / dE),$$

где $\langle r(E) \rangle$ и $(d\langle r(E) \rangle / dE)$ берутся при $U = 0$, т.е. без учета кулоновского поля, как в (13). Тогда из (13) и (7) следует

$$(d\langle r(E) \rangle / dE) = [3/2T(E)]^{1/2} \{D(E)/g(E)\}.$$

Для среднего удаления электрона от атома с учетом кулоновского поля можно написать

$$\langle r(E + U) \rangle = \langle r(E) \rangle \left\{ 1 - e^2 \langle r(E) \rangle^{-2} [d\langle r(E) \rangle / dE] \right\}. \quad (25)$$

Условием применимости этого соотношения является малость второго слагаемого правой части по сравнению с первым, т.е. неравенство

$$h = e^2 \langle r(E) \rangle^{-2} [d\langle r(E) \rangle / dE] \ll 1. \quad (26)$$

Заметим, что в соответствии с (25) кулоновское притяжение электрона к иону уменьшает расстояние между ионом и электроном, как это и следует из элементарных соображений. Полезно подчеркнуть, что (25) относится к случаю, когда между ионом и электроном нет других заряженных частиц. Присутствие других зарядов качественно изменит ситуацию, так как задача станет

многочастичной. Тем не менее из (25) можно оценить величину погрешности, связанной с пренебрежением влиянием кулоновского поля. Для одноатомного инертного газа относительная погрешность в соответствии с (14) составляет

$$h = (e^2/2E_0l) (m/M)^{1/2} [\ln(E_0/E_T)]^{-3/2}. \quad (27)$$

Для термализации электрона в двухатомном газе

$$h = (e^2/l) \xi^{1/2} (2E_0)^{-3/2}. \quad (28)$$

Наконец, для термализации электрона в жидкости из-за рассеяния на акустических фононах относительная погрешность, связанная с игнорированием действия кулоновского поля, составляет

$$h = (e^2/4l)(c/3)^{1/2}(2/m)^{1/4}E_0^{-5/4}. \quad (29)$$

Обсуждение результатов

Выше показано, что время термализации электронов существенно зависит от механизма потерь энергии электронов и в соответствии с этим в разных веществах различным образом зависит от начальной энергии электрона. Различные механизмы диссипации энергии приводят к тому, что среднее расстояние, на которое удаляется электрон от своего атома, также существенно различно в веществах с разными механизмами потерь энергии.

Предположение о слабой зависимости сечения взаимодействия от энергии ограничивает точность полученных результатов. Оценить погрешность этого приближения можно, используя для величины времени термализации приближенные формулы, аналогичные (17), (18). Для потерь на возбуждение колебательных и вращательных степеней свободы двухатомных молекул можно написать аналогично (18)

$$t_{\text{term}} = (1/n\xi)(m/2)^{1/2} \int_{E_T}^{E_0} dE / [E^{1/2}\sigma(E)]. \quad (30)$$

Для потерь на возбуждение фононов в жидкости время термализации может быть получено аналогично (18) в форме

$$t_{\text{term}} = (3/4nc) \int_{E_T}^{E_0} dE / [E\sigma(E)]. \quad (31)$$

Сравнение с экспериментальными данными по времени термализации электронов в жидких и твердых Ag, Kr и Xe позволяет сделать вывод об удовлетворительном согласии полученных оценок с имеющимися в литературе экспериментальными данными [7,8].

Авторы благодарны Российскому фонду фундаментальных исследований за финансовую поддержку.

Список литературы

- [1] *Mozumber A.* // J. Chem. Phys. 1980. Vol. 72 (3). P. 1657–1664.
- [2] *Mozumber A.* // J. Chem. Phys. 1980. Vol. 72 (11). P. 6289–6298.
- [3] *Mozumber A.* // J. Chem. Phys. 1981. Vol. 74 (12). P. 6911–6920.
- [4] *Knierim K.D., Waldman M., Mason E.A.* // J. Chem. Phys. 1982. Vol. 77 (2). P. 943–950.
- [5] *Лифшиц Е.М., Питаевский Л.П.* Физическая кинетика. М.: Наука, 1979. 527 с.
- [6] *Ахиезер А.И., Пелетминский С.В.* Методы статистической физики. М.: Наука, 1977. 384 с.
- [7] *Sawada U.* // Phys. Rev. B. 1982. Vol. 25 (5). P. 3434–3441.
- [8] *Kubota S.* // Phys. Rev. B. 1978. Vol. 20 (8). P. 3486–3492.