

01;02

ДЛИНА СВОБОДНОГО ПРОБЕГА ЭЛЕКТРОНА ВО ВЗАИМОДЕЙСТВУЮЩЕМ ЭЛЕКТРОННОМ ГАЗЕ

© А. П. Палов

Расчеты длины свободного пробега (ДСП) электрона до возбуждения электронно-дырочной пары λ_{eh} и объемного плазмона λ_{pl} в электронном газе (ЭГ) металлов обычно ведутся с использованием диэлектрического формализма в предположении об отсутствии обменно-корреляционного взаимодействия между электронами ЭГ. Для улучшения соответствия расчетных значений λ_{eh} и λ_{pl} экспериментальным данным в области низких энергий электронов, меньших 50 эВ над уровнем Ферми (E_f), в расчетные формулы вводят дополнительный параметр — эмпирический декремент затухания плазмонов, а полученный результат усредняется по распределению электронной плотности исследуемого металла [1]. Однако в области энергий электронов, сравнимых с энергией Ферми, наблюдается заметное (до $\approx 50\%$) расхождение между теоретическими и экспериментальными результатами. В связи с увеличением потока работ по моделированию вторичной электронной эмиссии из металлов [2-5] возникла необходимость проведения более точных расчетов λ_{eh} и λ_{pl} на основе использования минимума информации о веществе.

Цель данной заметки — продемонстрировать необходимость учета обменно-корреляционного взаимодействия электронов в ЭГ при расчетах λ_{eh} и λ_{pl} для низкоэнергетичных электронов. Описание взаимодействующего ЭГ, строится путем введения в выражение для диэлектрической проницаемости (ДП) динамической поправки на локальное поле $G(x, y)$:

$$\varepsilon = 1 + \frac{\varepsilon_{ПХА} - 1}{1 - G^*(\varepsilon_{ПХА} - 1)}, \quad (1)$$

здесь $\varepsilon(x, y)$ — комплексная ДП взаимодействующего ЭГ, $\varepsilon_{ПХА}(x, y)$ — ДП, рассчитанная в приближении хаотических фаз (ПХФ); x, y — изменение волнового вектора и энергии пробного электрона в ЭГ, нормированные на волновой вектор и энергию Ферми соответственно. К настоящему времени различными методами получен ряд выражений для $G(x, y)$ [6-9]. Расчет этих поправок, за исключением

Таблица 1. Длина свободного пробега электрона до неупругого столкновения как функция энергии над уровнем Ферми, рассчитанная для газа невзаимодействующих (ПХА) и взаимодействующих (TW) электронов, для Li и Be

$E - E_f, \text{эВ}$	Li		Be	
	$\lambda_{\text{ПХА}}(A)$	$\lambda_{TW}(A)$	$\lambda_{\text{ПХА}}(A)$	$\lambda_{TW}(A)$
0.63			3030.3	2273.0
3.0	45.9	26.5	185.6	138.5
5.0	21.2	13.6	80.5	59.8
6.0	16.7	10.8	60.8	45.1
7.0	13.8	9.3	48.3	35.8
8.0	11.8	8.1	39.9	29.5
9.0	10.3	7.3	33.8	25.0
10.0	9.1	5.9	29.2	21.6
15.0	4.6	3.3	16.8	12.6
20.0	3.1	3.0	11.5	9.0
25.0	3.3	3.1	8.7	7.1
30.0	3.5	3.2	4.7	4.2
35.0	3.8	3.4	3.8	3.5
40.0	4.0	3.6	3.5	3.3
50.0	4.4	4.1	3.5	3.3

$G_{TW}(x, y)$ [6], представляет собой отдельную сложную вычислительную задачу. Поэтому в дальнейшем мы будем использовать поправку на локальное поле $G_{TW}(x, y)$. То, что использование этой поправки существенно улучшает описание диэлектрических свойств ЭГ, очевидно уже из анализа свойств соответствующей ДП: во-первых, точно выполняется правило сумм для третьего момента ДП, во-вторых, сжимаемость ЭГ остается положительной для электронных плотностей реальных металлов ($1 \leq r_s \leq 6$), где r_s — параметр, определяющий в единицах боровского радиуса радиус сферы, объем которой равен среднему объему, приходящемуся в ЭГ на один электрон [10]. Покажем теперь, что расчетные значения λ_{eh} и λ_{pl} , выполненные для газа взаимодействующих электронов с поправкой $G_{TW}(x, y)$ будут существенно отличаться от соответствующих значений ДПС, полученных для газа невзаимодействующих электронов.

Для удобства расчета $G_{TW}(x, y)$ воспользуемся соотношением

$$G_{TW} = \frac{F}{(\epsilon_{\text{ПХА}} - 1)}, \quad (2)$$

Таблица 2. Длина свободного пробега электрона до неупругого столкновения как функция энергии над уровнем Ферми, рассчитанная для газа невзаимодействующих (ПХА) и взаимодействующих (ТW) электронов, для Al. Экспериментальные данные [11-13], результаты расчетов других авторов [1,14].

$E - E_f$ эВ	Al						
	$\lambda_{\text{ПХА}}(A)$	$\lambda_{\text{ТW}}(A)$	[1]	[14]	[11]	[12]	[13]
0.3	5555.6	4166.7					
3.0	111.7	80.9					
5.0	59.4	42.9		53.9	50	45	
6.0	45.6	32.8		41.3			
7.0	36.7	26.4		33.4		25	
8.0	30.5	22.0		28.0		20	
9.0	26.1	18.8		23.7			
10.0	22.6	16.3	22.8	20.6			
15.0	13.2	9.9	13.2	11.9			
20.0	8.6	6.9	9.2	7.8			
25.0	4.8	4.3					
30.0	3.7	3.4	3.6				
35.0	3.5	3.3					
40.0	3.4	3.2	3.3	3.4			
50.0	3.4	3.3		3.2			3.0

поскольку для мнимой части $F(x, y)$ существует аналитическое выражение, полученное в [10]:

$$\text{Im } F = \beta \begin{cases} \varphi[R(\xi) - R(1)] + \mu[R(\zeta) - R(1)], & 0 \leq y \leq x(2-x), \\ \varphi[R(\xi) - R(\varphi)] + \mu[R(\eta) - R(1)], & x|2-x| \leq y \leq x(x+2), \\ 0 & x(x+2) \leq y, y \leq x(x-2), \end{cases} \quad (3)$$

$$\beta = \frac{3\alpha r_s}{8x^2}, \quad \varphi = \frac{y+x^2}{2x},$$

$$\eta = \frac{y-x^2}{2x}, \quad \xi = \sqrt{1+y}, \quad \zeta = \sqrt{1-y},$$

$$R(t) = \frac{1}{3} \left\{ t^2 + \frac{(3-t)(1+t)^3}{2t} \ln|1+t| - \frac{(3+t)(1-t)^3}{2t} \ln|1-t| \right\},$$

где $\alpha \approx 0.521$. Действительную часть $F(x, y)$ рассчитаем, пользуясь дисперсионным соотношением

$$\operatorname{Re} F = \frac{2}{\pi} \int_0^{\infty} \frac{p dp}{p^2 - y^2} \operatorname{Im} F(x, p). \quad (4)$$

Далее для расчетов ДСП используем формулы первого борновского приближения:

$$\lambda_{eh}^{-1} = \frac{1}{\pi a_0 Z} \int_0^{Z-1} dy \int_{x_1}^{x_2} \frac{dx}{x} \operatorname{Im} \{-\varepsilon_{TW}(x, y)\}^{-1}, \quad (5)$$

$$\lambda_{pl}^{-1} = \frac{1}{a_0 Z} \int_{x_3}^{x_4} \frac{dx}{x} \left\{ \left[\frac{\partial \operatorname{Re} \varepsilon_{TW}(x, y)}{\partial y} \right]_{y=y^*(x)} \right\}^{-1},$$

здесь $\varepsilon_{TW}(x, y)$ — комплексная ДП, рассчитываемая по формуле (1) при $G = G_{TW}(x, y)$; $Z = E/E_f$, a_0 — первый борновский радиус, $x_1 = \sqrt{1+y} - 1$, $x_2 = \sqrt{1+y} + 1$, x_3 — решение уравнения $x = \sqrt{Z} - \sqrt{Z - y^*(x)}$, x_4 — минимальное значение из решений уравнений $y^*(x) = x^2 + 2x$ и $y^*(x) = Z - 1$, $y = y^*(x)$ — дисперсионное соотношение для объемных плазмонов взаимодействующего ЭГ. По рассчитанным λ_{eh} и λ_{pl} вычислялась ДСП электрона до неупругого взаимодействия в ЭГ λ_{inel} :

$$\lambda_{inel}^{-1} = \lambda_{eh}^{-1} + \lambda_{pl}^{-1}. \quad (6)$$

Рассчитанные значения λ_{inel} для Li, Be и Al приведены в табл. 1 и 2. Из табл. 1 видно, что чем больше r_s , тем очевидней расхождение между λ_{inel} , рассчитанными для не- и взаимодействующего ЭГ, в области низких энергий пробного электрона. Так, при $E = 3-7$ эВ над энергией Ферми для Li ($r_s = 3.22$) отличие достигает 45%, в то время как для Be ($r_s = 1.87$) не превосходит 25%. Для Al оказалось возможным провести сравнение полученных значений λ_{inel} с экспериментальными данными [11-13] и результатами полуэмпирической теории [14]. Из табл. 2 видно, что для энергий электронов, больших 30 эВ, результаты разных авторов, расчеты, проведенные в приближении хаотических фаз и с использованием $G_{TW}(x, y)$, хорошо согласуются друг с другом и экспериментальными данными. В области более низких энергий электронов λ_{inel} , полученные для модели взаимодействующего ЭГ, заметно лучше соответствуют результатам эксперимента.

Список литературы

- [1] *Ashby J.C., Tung C.J., Ritshie R.H.* // Surf. Sci. 1978. V. 81. P. 386.
- [2] *Hunter K.L., Snook I.K., Swingler D.L., Wagenfeld H.K.* // J. Phys. D. 1990. V. 23. P. 1738.
- [3] *Kawata J., Ohya K.* // J. Phys. Soc. Jpn. 1994. V. 63. P. 795.
- [4] *Hunter K.L., Snook I.K., Wagenfeld H.K.* // J. Phys. D. 1994. V. 27. P. 1769.
- [5] *Farhany H., Narchan E., Blott B.H.* // J. Phys. D. 1994. V. 27. P. 2266.
- [6] *Toigo F., Woodruff T.O.* // Phys. Rev. B. 1971. V. 4. P. 4312.
- [7] *Devreese J.T., Brozens F., Lemmens L.F.* // Phys. Rev. B. 1980. V. 21. P. 1362.
- [8] *Горобченко В.Д., Кон В.Г.* // ЖЭТФ. 1981. Т. 80. С. 754.
- [9] *Ивлиев С.В., Собакин В.Н.* // ЖЭТФ. 1991. Т. 98. С. 2000.
- [10] *Горобченко В.Д., Максимов Е.Г.* // УФН. 1980. Т. 130. С. 65.
- [11] *Kantor H.* // Phys. Rev. B. 1970. V. 1. P. 522.
- [12] *Callcott T.A., Arakawa E.T.* // Phys. Rev. B. 1975. V. 11. P. 2750.
- [13] *Tracy J.C.* // J. Vacuum Sci. 1974. V. 11. P. 280.
- [14] *D.R. Penn* // Phys. Rev. B. 1987. V. 35. P. 482.

Поступило в Редакцию
14 мая 1996 г.
