

01

© 1992

О РАСЧЕТЕ ДЛИНЫ СВОБОДНОГО ПРОБЕГА
ПРОБНОГО ЭЛЕКТРОНА В ЭЛЕКТРОННОМ ГАЗЕ

А.П. П а л о в

Для расчетов длины свободного пробега λ_{e-h} пробного электро- на на возбуждение электронно-дырочной пары электронного газа обычно используется выражение для диэлектрической проницаемости (ДП) [1] с полуэмпирическими параметрами E_f , ω_{pl} , N , δ (где E_f - энергия Ферми, ω_{pl} - частота плазменных колебаний электро- нного газа, N - число электронов атома, принимающих участие в образовании Ферми газа, δ - декремент затухания колебания коле- баний электронного газа). Кроме того, для лучшего соответствия расчетных значений λ_{e-h} экспериментальным данным в области низких энергий $E < 100$ эВ результат усредняется по распределению электронной плотности Ферми-газа для данного материала [2]. В связи с увеличением потока работ, посвященных Монте-Карло моде- лированию переноса низкоэнергичных электронов в металлических мишенях [3-5], возникла необходимость в получении простых мо- дельных, аналитических формул для λ_{e-h} и соответствующих не- прерывных энергетических потерь электронов dE/dx_{e-h} , основанных на использовании меньшего числа полуэмпирических параметров.

Цель данной заметки - изложить подход, позволяющий получать необходимые для Монте-Карло моделирования аналитические выра- жения для λ_{e-h} , dE/dx_{e-h} , использование которых приводит к хоро- шему соответствию с экспериментальными данными во всем диапазо- не энергий пробного электрона и не требует применения выражения ДП. Подход основан на использовании формулы, описывающей не- упругое рассеяние пробного электрона на атомных электронах без учета обменного взаимодействия в первом приближении Борна в пред- положении об ускорении пробного электрона в поле иона перед столк- новением, так же, как это сделано в квантовой теории бинарных столк-

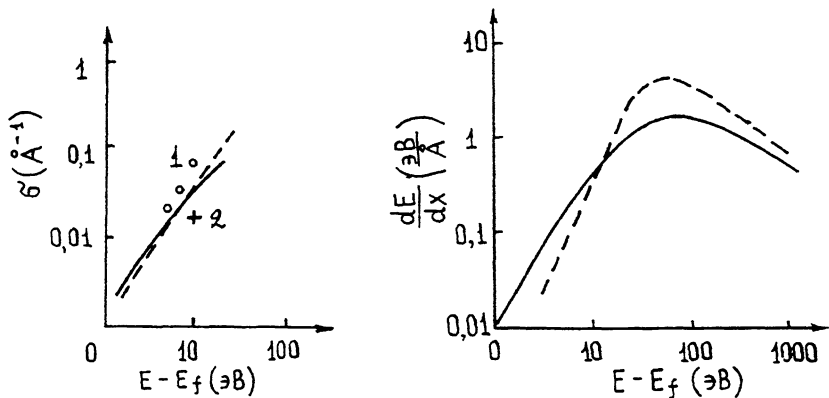


Рис. 1. Зависимость σ_{e-h} от энергии налетающего электрона. Штриховая линия - расчет [2], сплошная - данная работа. Эксперимент: о - [8], + - [9].

Рис. 2. Зависимость dE/dx_{e-h} от энергии налетающего электрона. Штриховая линия - расчет [2], сплошная - данная работа.

новений [6], что означает увеличение кинетической энергии пробного электрона $E' = E + 2 \cdot E_f$ (т. к. энергия связи учитываемых атомных электронов принимается равной E_f). Кроме того, используется стандартная процедура учета экранирования электрона газа Ферми с радиусом экранирования $R_d = I/K_c$, где K_c , согласно [7], равен ω_{pL}/v_f (v_f - средняя скорость электронов газа).

Запишем формулу для вероятности перехода между состояниями 0 и n атомного электрона:

$$dW_{0n} = \frac{2\pi}{\hbar} |\langle P', p_n | U | P_0, p \rangle|^2 \delta\left(\frac{\vec{P}^2 - \vec{P}'^2}{2m} - \frac{\vec{p}^2 - \vec{p}'^2}{2m}\right) d^3\vec{p}' / (2\pi\hbar)^3, \quad (1)$$

здесь $U = \sum \exp(-K_c |\vec{R} - \vec{r}_i|) / |\vec{R} - \vec{r}_i|$ - потенциал взаимодействия пробного электрона с атомными электронами, участвующими в образовании газа Ферми, \vec{P} и \vec{P}' - импульсы пробного электрона до и после столкновения, \vec{p}_0 и \vec{p}_n - импульсы атомных электронов до и после столкновения, \vec{R} - радиус-вектор пробного электрона, \vec{r}_i - атомных электронов. Примем, что волновые функции пробного электрона - плоские волны с импульсами \vec{P} и \vec{P}' , причем первая плоская волна нормирована на единичную плотность потока, вторая - на δ^3 -функцию Дирака от $\vec{P}/2\pi\hbar$. Волновые функции атомных электронов, образующих газ Ферми, до и после столкновения - плоские волны, нормированные на 1 в объеме металла Ω . В этом случае вероятность W_{0n} имеет смысл сечения столкновения. Интегрирование матричного элемента по $d\vec{R}$ дает $4\pi \cdot \exp(-iqr) / (q^2 + K_c^2)$, здесь $\vec{q} = (\vec{P} - \vec{P}')/\hbar$. Интегрирование же выражения

$\exp(i\vec{k}_n \vec{r}_i - i(\vec{k}_0 + \vec{q}) \vec{r}_i) / \Omega$ по $d\vec{r}_i$, приводит к символу Кроннекера $\delta_{\vec{k}_p}(\vec{k}_n - \vec{k}_0 - \vec{q})$, равному 1, если равно 0 выражение в скобках, и 0, - в противоположном случае. Для получения окончательного выражения для двойного дифференциального сечения необходимо усреднить (1) по всем начальным состояниям газа Ферми в предположении, что все электроны газа имеют среднюю кинетическую энергию, равную E_f , а $\Omega \rightarrow \infty$. В результате (1) принимает вид:

$$\frac{d^2\sigma}{d\epsilon ds} = \frac{2\pi m e^4 N}{(E + 2 \cdot E_f) v_f} \cdot \frac{1}{(s^2 + s_c^2)^2} \quad (2)$$

Здесь $s = \hbar \cdot q$, $s_c = \hbar \cdot K_c$, ϵ - потерянная пробным электроном энергия; кроме того, учтено, что $k_0 = mv_f / \hbar$. Выражение практически точно совпадает с аналогичным сечением классической теории бинарных соударений с заменой S^2 на $S^2 + S_c^2$ и E на $E + 2 \cdot E_f$. Интегрирование (2) по всем возможным потерям импульса от $S_1 = (2m(E_f + \epsilon))^{1/2} + (2mE_f)^{1/2}$ до $S_2 = (2m(E_f + \epsilon))^{1/2} - (2mE_f)^{1/2}$ и энергиям от E_f до E приводит к следующему выражению для сечения:

$$\sigma = \frac{\pi e^4 N}{2(E + 2E_f) E_{pl}} \cdot \left\{ \arctg(\alpha) - \arctg(\beta) + \frac{a}{E_{pl}} \left(E \arctg\left(\frac{1}{\alpha}\right) - E_f \arctg\left(\frac{1}{\beta}\right) \right) \right\}, \quad (3)$$

где $E_{pl} = \hbar \omega_{pl}$, $a = 4E_f / E_{pl}$, $\alpha = 1/a + E / E_{pl}$, $\beta = 1/a + E_f / E_{pl}$. Для непрерывных потерь имеем:

$$\frac{dE}{dx_2} = \frac{\pi e^4 N}{(E + 2E_f)} \cdot \left(FE\left(\frac{a \cdot E}{E_{pl}}\right) - FE\left(\frac{a \cdot E_f}{E_{pl}}\right) \right), \quad (4)$$

$$FE(x) = \frac{x}{4a} \arctg\left(\frac{a}{1+x}\right) + 0.5 \ln((x+1)^2 + a^2) + \frac{a-2}{2a} \arctg\left(\frac{1+x}{a}\right) - 0.25x$$

$$\text{при } E \gg E_{pl} \text{ (для Al } a=2), \frac{dE}{dx} \approx \frac{\pi e^4 N}{E} \ln(0.354 \cdot \frac{E}{E_f}).$$

Рассчитанные значения $\lambda_{e-h} = (\sigma \cdot N_a)^{-1}$, $dE/dx \cdot N_a$ (где N_a - концентрация атомов) для алюминия приведены на рис. 1 и 2. Можно отметить хорошее соответствие рассчитанных значений λ_{e-h} экспериментальным данным и расчетам [2].

С п и с о к л и т е р а т у р ы

- [1] L i n d h a r d J. // Kgl. Danske Videnskab Selskab, Mat. Fys. Medd. 1954. V. 28. P. 3
 [2] A s n b y J.C., T u n g C.J., R i t s h i e R.H. // Surf. Sci. 1978. V. 81. P. 386.

- [3] C a i l e r M., G a n a c h a u d J.P. // Surf. Sci. 1985. V. 154. P. 524.
- [4] D i n g Z.J., S h i m i z u R. // Surf. Sci. 1988. V. 197. P. 539.
- [5] L e e K.Y., C h o G.S., C h o i D.I. // J. Appl. Phys. 1990. V. 67. P. 7560.
- [6] V r i e n s // Proc. Phys. Soc. 1966, V. 189A. P. 13.
- [7] А н и м а л у А. Квантовая теория кристаллических тел. М.: Мир, 1981. 574 с.
- [8] C a l l c o t t T.A., A r a k a w a E.T. // Phys. Rev. B. 1975. V. 11. P. 2750.
- [9] H u e n T., W o o t e n F. // Sol. Stat. Commun. 1971. V. 9. P. 871.

Институт физики Земли
им. О.Ю. Шмидта
РАН, Москва

Поступило в Редакцию
11 марта 1992 г.
В окончательной редак-
ции 6 июля 1992 г.