

ФЕДЕРАЛЬНОЕ АГЕНТСТВО ПО ОБРАЗОВАНИЮ  
МОСКОВСКИЙ ИНЖЕНЕРНО-ФИЗИЧЕСКИЙ ИНСТИТУТ  
(ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ)

---

В.А. Курнаев, Ю.С. Протасов, И.В. Цветков

# ВВЕДЕНИЕ В ПУЧКОВУЮ ЭЛЕКТРОНИКУ

Под редакцией В.А. Курнаева

*Рекомендовано УМО «Ядерные физика и технологии»  
в качестве учебного пособия  
для студентов высших учебных заведений*

Москва 2008

УДК 537.5(075)+539.2(075)+533.124(075)  
ББК 22.333я7+22.37я7  
К 93

*Курнаев В.А., Протасов Ю.С., Цветков И.В. Введение в пучковую электронику: Учебное пособие / Под ред. В.А. Курнаева. – М.: МИФИ, 2008. – 452 с.*

Пучковая электроника – активно развивающееся в настоящее время научное направление, играющее огромную роль в физике горячей и газоразрядной плазмы, термоядерного синтеза, плазменных технологиях.

В пособии даны основы пучковой электроники, которые базируются на основах физики твердого тела, закономерностей эмиссии заряженных частиц, на описании способов формирования потоков заряженных частиц, и общие сведения о пучковой диагностике.

Книга рассчитана на студентов старших курсов физических и физико-технических специальностей высших учебных заведений, в программу обучения которых включены разделы эмиссионной электроники.

Пособие подготовлено в рамках Инновационной образовательной программы МИФИ.

Рецензент д-р физ.-мат. наук, проф. *А.В. Нестерович*

**ISBN 978-5-7262-1124-4**

© *Московский инженерно-физический институт (государственный университет), 2008*

Редактор *М.В. Макарова*  
Оригинал-макет изготовлен *С.В. Тялиной*

Подписано в печать 11.12.2008. Формат 60×84 1/16.  
Уч.-изд. л. 28,25. Печ. л. 28,25. Тираж 150 экз. Изд. № 1/39. Заказ №

---

*Московский инженерно-физический институт (государственный университет),  
115409, Москва, Каширское ш., 31*

*Типография издательства «Тривант», г. Троицк Московской области*

## ОГЛАВЛЕНИЕ

<b>Предисловие</b> .....	4
<b>Глава 1. ЭЛЕКТРОННЫЕ СВОЙСТВА КОНДЕНСИРОВАННЫХ СРЕД</b> .....	8
1.1. Электронное строение и структура твердых тел.....	8
1.2. Колебания в твердом теле и квазичастицы.....	37
1.3. Дефекты кристаллической структуры. Аморфные тела.....	65
1.4. Процессы переноса. Транспортные свойства твердых тел.....	84
1.5. Быстрые частицы в твердом теле.....	111
1.6. Диэлектрические, оптические и магнитные свойства твердых тел.....	142
1.7. Свойства границы твердого тела. Контактные явления.....	165
<b>Глава 2. ЭМИССИЯ ЗАРЯЖЕННЫХ ЧАСТИЦ С ПОВЕРХНОСТИ ТВЕРДЫХ ТЕЛ</b> .....	186
2.1. Термоэлектронная эмиссия.....	186
2.2. Автоэлектронная (полевая) эмиссия металлов.....	209
2.3. Фотоэлектронная эмиссия металлов.....	222
2.4. Вторичная электронная эмиссия и методы ее исследования.....	235
2.5. Вторичная ионно-электронная эмиссия.....	250
2.6. Поверхностная ионизация.....	254
2.7. Вторичные потоки частиц при взаимодействии пучков ионов с поверхностью твердого тела.....	260
<b>Глава 3. ФОРМИРОВАНИЕ ПОТОКОВ ЗАРЯЖЕННЫХ ЧАСТИЦ</b> .....	299
3.1. Движение заряженных частиц в однородном электрическом и магнитном полях.....	299
3.2. Отклонение и фокусировка заряженных частиц в постоянном электрическом поле.....	310
3.3. Элементы электронной оптики.....	317
3.4. Магнитные линзы.....	332
3.5. Ограничение тока объемным зарядом.....	341
3.6. Формирование потоков заряженных частиц большой плотности....	349
3.7. Плазменные источники пучков частиц.....	363
3.8. Плазменные ускорители.....	399
3.9. Основные характеристики стационарных плазменных источников ионов.....	409
3.10. Получение пучков медленных ионов, рекуператоры энергии заряженных частиц.....	432
3.11. Плазменные источники электронов.....	438
3.12. Компенсация объемного заряда ионных пучков.....	441
3.13. Формирование импульсных пучков заряженных частиц.....	445
<b>Список литературы</b> .....	447
<i>Приложение 1.</i> Данные по работе выхода поверхностей чистых материалов и материалов с покрытиями.....	449
<i>Приложение 2.</i> Значение параметра $Q$ для вычисления коэффициента распыления по формуле Бодански (2.16а).....	452

## ПРЕДИСЛОВИЕ

---

Издание на кафедре физики плазмы МИФИ в серии «Учебная книга инженера-физика» учебного пособия с названием «Введение в пучковую электронику» имеет свои мотивы, которые и предопределили специфику его содержания.

Во-первых, пучки частиц являются неотъемлемой частью тех физико-технических приложений, с которыми сталкиваются выпускники кафедры физики плазмы МИФИ. Это и нагрев термоядерной плазмы при инжекции в плазму быстрых нейтралов, и создание пучков при корпускулярной диагностике плазмы. Электронные пучки формируются в устройствах для нагрева плазмы с помощью ВЧ и микроволнового излучения таких как клистроны и гиротроны. И, во-вторых, именно с помощью пучков частиц и направленных потоков плазмы осуществляется моделирование взаимодействия термоядерной плазмы и ее компонент с обращенными к ней элементами плазменных установок. Проблема выбора материалов для установок управляемого термоядерного синтеза в настоящее время является одной из центральных при создании реактора управляемого термоядерного синтеза (УТС) с магнитным удержанием плазмы. Это предполагает последовательное проектирование и сооружение нескольких больших установок: исследовательского реактора ИТЭР, совместное сооружение которого мировым сообществом недавно началось во Франции; демонстрационного энергетического реактора ДЕМО, в котором нагрузки на стенки будут значительно больше, чем в ИТЭР; и, наконец, промышленной термоядерной электростанции ПТЭ. За многолетнюю историю изучения особенностей взаимодействия с твердым телом атомных частиц с характерными для термоядерной плазмы энергиями именно установки с ионными пучками позволили определить основные закономерности элементарных процессов, сопровождающих взаимодействие плазмы с материалами: отражение частиц [1], их внедрение и последующий выход в камеру установки [2], распыление материалов под действием ионов [3], особенности трансформации поверхности твердого тела под их влиянием [4], а также других процессов, полное изучение которых далеко еще от завершения [5 – 7]. Кроме того, пучки заряженных частиц широко используются для анализа результатов воздействия плазмы на материалы. Это и резерфордов-

ское обратное рассеяние частиц мэвных энергий, и метод ядерных реакций, и рассеяние ионов средних (килоэлектрон-вольты – десятки килоэлектрон-вольт) и низких (менее одного килоэлектрон-вольта) энергий. Ионные пучки используются также для элементного анализа поверхности при ее распылении (вторично-ионная масс-спектроскопия), при возбуждении в поверхности характеристического излучения и в других методах. А электронные пучки используются в разного рода электронных микроскопах (просвечивающих, отражательных), при реализации метода оже-электронной спектроскопии и в других методах [8].

При этом в набор сведений и знаний, которыми должен обладать выпускник МИФИ, специализирующийся в данной области, входит понимание особенностей твердого тела, лежащих в основе процессов, сопровождающих эмиссию заряженных частиц из твердого тела при генерации пучков, и его зондирование пучками частиц. Обязательными для изучения являются законы, определяющие выход заряженных частиц с поверхности твердого тела – эмиссионные процессы. Кроме того, важно знать особенности генерации ионов и электронов в газовых разрядах, использующихся в плазменных источниках заряженных частиц, и, наконец, особенности формирования и распространения пучков заряженных частиц и быстрых нейтральных атомов.

Выпущенное много лет назад профессором кафедры физики плазмы МИФИ С.К. Димитровым пособие по методам генерации, транспортировки и торможения пучков [9] стало библиографической редкостью и, к сожалению, не было переиздано в связи с трагической гибелью автора.

Первая глава данного пособия содержит описание основных свойств твердого тела, важных как с точки зрения эмиссии из него электронов, так и при изучении взаимодействия с ним основных компонент плазмы – электронов, ионов и электромагнитного излучения, а также пучков частиц и излучения, используемых при анализе. Так как эти процессы неразрывно связаны с основополагающими свойствами твердых тел, то в первую главу включено краткое описание всех их основных свойств. Приведенные сведения о свойствах твердых тел, закономерностях, которым они подчиняются, и краткий теоретический базис, позволяющий на единой основе воспринять особенности процессов, происходящих в твердом теле,

с одной стороны, являются введением к последующим главам, а с другой стороны, представляют достаточно самосогласованный материал, который фактически является введением в физику твердого тела. Поэтому в зависимости от задачи, стоящей перед студентом, тщательное изучение первой главы может быть рекомендовано для тех из них, кто решил заниматься взаимодействием плазмы с поверхностью и основанными на этом технологиями. Для остальных она может служить дополнительным пособием по курсу физики твердого тела. При этом, чтобы не перегружать читателя, некоторые разделы, описывающие особенности поведения твердого тела и его специфические свойства, набраны мелким шрифтом.

Вторую и третью главы с большим основанием можно отнести собственно к введению в пучковую электронику. Слово «введение» в данном случае вполне уместно, так как в пособии рассматриваются только самые общие закономерности экстракции и формирования пучков частиц. Подбор материала и примеров ориентирован на то, чтобы быть возможно более полезным студентам и аспирантам кафедры физики плазмы, исходя из сложившихся к настоящему времени научных приоритетов как в лабораториях кафедры, так и ее филиалов, за исключением, пожалуй, пучковых драйверов для управляемого инерционного синтеза. Данное направление имеет свою специфику, связанную с особенностями эмиссии и распространения импульсных мегаамперных потоков заряженных частиц или пучков высокой энергии, которыми занимаются «ускорительщики».

Конкретно, вторая глава содержит описание разного рода эмиссий заряженных частиц с поверхности твердого тела как основы генерации пучков заряженных частиц: термоэлектронную эмиссию, полевою (автоэлектронную) эмиссию, вторичную эмиссию электронов под действием электронов и ионов. Кроме того, во второй главе кратко рассмотрены закономерности эмиссии из твердого тела заряженных и нейтральных атомов как твердого тела, так и испытывавших с ним взаимодействие частиц первичного пучка при попадании последних на поверхность. Данная глава затрагивает вопросы физической электроники, систематическое изложение значительной части которых можно также найти в разных учебных и справочных пособиях [10,11].

Третья глава посвящена описанию особенностей формирования потоков заряженных частиц при их эмиссии из твердого тела или других источников. В ней также рассматриваются основы расчета и примеры реализации элементов электронной и ионной оптики. В этой главе подробно перечислены основные типы газовых разрядов, используемых в плазменных источниках ионов, а также сами плазменные источники как ионов, так и электронов. При этом рассмотрение ограничено в основном стационарными пучками средних энергий, как наиболее часто встречающимися при исследованиях по физике плазмы и УТС с магнитным удержанием плазмы. Более подробно физика большей части используемых в плазменных источниках заряженных частиц газовых разрядов рассмотрена в [12], а физика и технология разных ионных источников в [13]. Вопросы формирования интенсивных ионных пучков описаны в [14]. Физика и техника плазменных ускорителей, как, впрочем, и физика смежных вопросов физики плазмы и ее взаимодействия с веществом с интересным и авторским видением проблем изложена в книге А.И. Морозова [15]. Там же можно найти описание физических основ не отраженных в данном пособии вопросов плазменной оптики, связанных с применением плазменных линз. Мощным импульсным ионным пучкам и особенностям их взаимодействия с веществом посвящены монографии [16 – 17], недавно вышедший учебник [18], а импульсным пучкам электронов – обзорная статья [19].

Объединение в одном пособии разделов, основанных на достаточно разном физическом базисе, создает определенные трудности в его освоении, и авторский коллектив будет признателен за все критические замечания в свой адрес.

*В.А. Курнаев*

# Глава 1. ЭЛЕКТРОННЫЕ СВОЙСТВА КОНДЕНСИРОВАННЫХ СРЕД

## 1.1. Электронное строение и структура твердых тел

### 1.1.1. Об электронной зонной теории твердого тела

#### Модель Кронига – Пенни

В твердых телах, где соседние ядра находятся на расстояниях порядка размеров электронных орбиталей в изолированных атомах, существенную роль играет взаимное влияние атомов. Ряд особенностей поведения электронов в кристаллах следует из модели Кронига – Пенни. Рассмотрим волновую функцию электрона в одномерной периодической системе

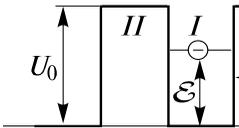


Рис. 1.1. Потенциальный барьер

прямоугольных потенциальных ям, причем энергия  $E$  электрона меньше высоты  $U_0$  потенциального барьера (рис. 1.1). Решение имеет вид

$$\psi_1 = A_1 \exp(ik_1x) + B_1 \exp(-ik_1x), \quad k_1 = \sqrt{2mE}/\hbar,$$

$$\psi_2 = A_2 \exp(k_2x) + B_2 \exp(-k_2x), \quad k_2 = \sqrt{2m(U_0 - E)}/\hbar. \quad (1.1)$$

Предполагая, что электрон может двигаться внутри кристалла почти как свободный с известным импульсом  $p$  и учитывая, что его волновая функция должна быть модулирована (поскольку модулирован потенциальный рельеф), представим решение в виде *волны Блоха*:

$$\psi = U(x) \exp(ikx), \quad (1.2)$$

где  $k = p/\hbar$  – волновой вектор;  $U(x)$  – периодическая функция координат с периодом, равным постоянной решетки  $a = b + c$  (рис. 1.2). Для нахождения коэффициентов (1.1) используют условия непрерывности  $U$  и  $\partial U/\partial x$  на границах и периодичность  $U(x)$ , т.е. условия

$$U_1(x=0) = U_2(x=0), \quad (dU_2/dx)_{x \rightarrow 0} = (dU_1/dx)_{x \rightarrow 0},$$

$$U_2(x=c) = U_1(x=-b), \quad (dU_2/dx)_{x=c} = (dU_1/dx)_{x=-b},$$

$U_1$  находят из (1.2) по  $\psi = \psi_1$ ,  $U_2$  – по  $\psi_2$ .

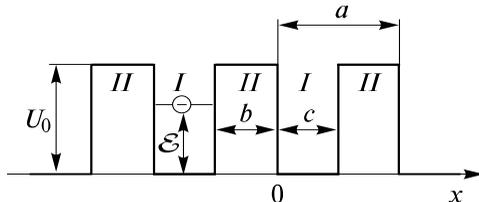


Рис. 1.2. Потенциал в модели Кронига – Пенни

Подставив в (1.2) отношения (1.1), получают однородную систему четырех уравнений относительно четырех коэффициентов, совместную при условии равенства нулю ее детерминанта. Эти условия после тождественных преобразований имеют вид

$$\left[ \frac{(k_2^2 - k_1^2)}{(2k_1k_2)} \right] \text{sh}(k_2b) \sin(k_1c) + \text{ch}(k_2b) \cos(k_1c) = \cos k(b+c), \quad (1.3)$$

и, как ранее, связывают задаваемые величины  $k_1$ ,  $k_2$  и  $k$ , т.е. задают спектр разрешенных значений энергии  $E$  в зависимости от волнового числа  $k$  при данных  $U_0$ ,  $b$  и  $c$ . Для упрощения анализа выражение (1.3) преобразуем, полагая  $b \rightarrow 0$ ,  $U \rightarrow \infty$  при сохранении величины  $bU_0$ , определяющей прозрачность прямоугольного потенциального барьера; тогда

$$k_2 = (2mU_0)^{1/2} / \hbar, \quad a = c, \quad \text{sh}(k_2b) = k_2b, \quad \text{ch}(k_2b) = 1$$

и аналог (1.3) принимает вид

$$P \sin(k_1a) / (k_1a) + \cos(k_1a) = \cos(ka), \quad (1.4)$$

где  $P = mabU_0 / \hbar^2$  – величина, характеризующая непрозрачность потенциальных барьеров.

Из (1.4) можно получить зависимость  $E = E(k)$ . График, соответствующий левой части (1.4), представлен на рис. 1.3. Поскольку правая часть (1.4) по модулю не превышает единицы, решения существуют только для таких значений  $E$ , при которых функция на рис. 1.3 лежит в пределах от  $-1$  до  $1$ . Для  $k_1 = 0$  ордината равна  $1 + P$ , а когда  $k_1 = n\pi/a$  ( $n = \pm 1, \pm 2, \dots$ ) ордината равна  $\pm 1$  независимо от значения  $P$ . Последнее влияет на ширину запрещенных

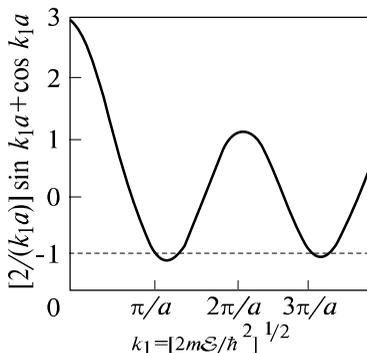


Рис. 1.3. К анализу уравнения (1.4)

интервалов  $k_1$ , для которых решения (1.4) не существуют. Пределу полностью свободных электронов соответствует  $P = 0$  (т.е. потенциальные барьеры отсутствуют, энергетический спектр не содержит запрещенных зон), пределу сильно связанных электронов —  $P \rightarrow \infty$  (атомы далеки друг от друга, и каждый имеет дискретный спектр энергии).

В отличие от дискретных спектров, характерных для потенциальных ям конечных размеров, в случае бесконечного периодического потенциального рельефа (1.3) или (1.4) определяют непрерывный спектр энергии (рис. 1.4), состоящий из разрешенных и запрещенных зон (в последних  $E$  не соответствует (1.3), и такие состояния не реализуются); это соответствует расщеплению каждого из уровней одиночной потенциальной ямы на  $N$  уровней (в результате взаимного влияния  $N$  ям, см. ранее) и стремлению  $N$  к бесконечности, вследствие чего густо расположенные многочисленны уровни можно считать континуумом.

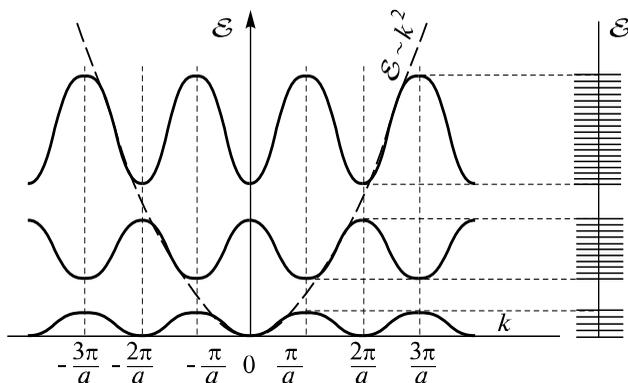


Рис. 1.4. Зависимость  $E(k)$  для электронов в одномерной периодической структуре. Штриховая линия — зависимость  $E(k)$  для свободного электрона. При  $k = \hbar \pi/a$  функция  $E(k)$  претерпевает разрыв, что означает наличие запрещенных зон

Из анализа (1.4) следует также, что кривая  $E = E(k)$  имеет разрывы при значениях  $k$ , кратных  $\pi/a$ ; это условие соответствует целому числу длин волны де Бройля, укладывающихся на длине постоянной решетки:  $n\lambda_B/2 = a$  ( $n=1, 2, 3, \dots$ ), что совпадает с формулой Вульфа – Брэгга, описывающей брэгговское отражение лучей от плоскостей кристаллической решетки; такая волна не может распространяться в кристалле из-за отражения.

Области значений  $k$  между точками брэгговского отражения называют *зонами Бриллюэна*. Для рассмотренной одномерной цепочки атомов первая зона Бриллюэна заключена в пределах  $-\pi/a < k < \pi/a$ , вторая в пределах  $\pi/a < k < 3\pi/a$  и  $-2\pi/a < k < -\pi/a$  и т.д. (*представление расширенных зон Бриллюэна*, рис. 1.5, а).

Из (1.4) видно, что  $E$  является периодической функцией от  $k$  с периодом  $2\pi/a$ , т.е. зависимость  $E(k)$  неоднозначна, а форма кривых зависимости  $E(k)$  для первой зоны Бриллюэна полностью повторяется при сдвиге на  $n2\pi/a$  (рис. 1.5, б – *представление повторяющихся зон*), т.е. первая зона Бриллюэна содержит всю информацию о зависимости  $E = E(k)$ . Это позволяет выразить энергию электрона, находящегося в любой зоне Бриллюэна, через значение  $k$ , лежащее в пределах первой зоны.

С ростом энергии  $E$  электрона ширина разрешенных зон увеличивается, а запрещенных уменьшается. Это соответствует более сильному расщеплению верхних, наружных, состояний электронов.

Прежде чем переходить к реальному трехмерному случаю, полезно рассмотреть еще одну гипотетическую двумерную решетку, например гексагональную.

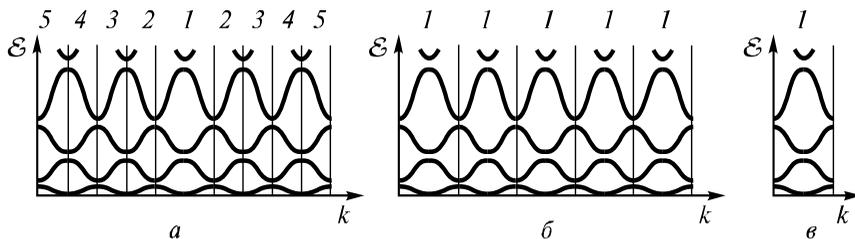


Рис. 1.5. Различные варианты представления зонной структуры: а – представление расширенных зон Бриллюэна, б – повторяющихся, в – приведенных (цифры – номера зон)

Границы зоны Бриллюэна (в представлении расширенных зон), соответствующие условию полного брэгговского отражения в  $(k_x, k_y)$ -пространстве, показаны на рис. 1.6.

На рис. 1.7 изображена параболическая зависимость  $E = k^2/(2m)$  для свободных электронов.

Рассмотрение двумерного аналога модели Кронига – Пенни дает «сглаживание» резких «складок» на поверхностях зависимости  $E = E(k)$ , приведенной к первой зоне Бриллюэна (рис. 1.8), что может приводить, в частности, к появлению запрещенных зон, как и в одномерной модели. Однако возможным становится и такой случай, когда запрещенная зона для движения в одном направлении не совпадает с запрещенной зоной для движения в другом, в результате в суммарном энергетическом спектре запрещенная зона пропадает из-за перекрытия двух разрешенных зон.

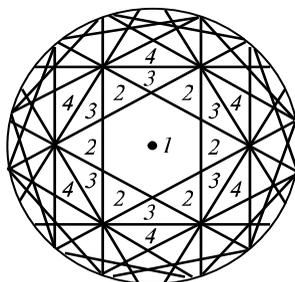


Рис. 1.6. Зоны Бриллюэна для двумерной гексагонной решетки

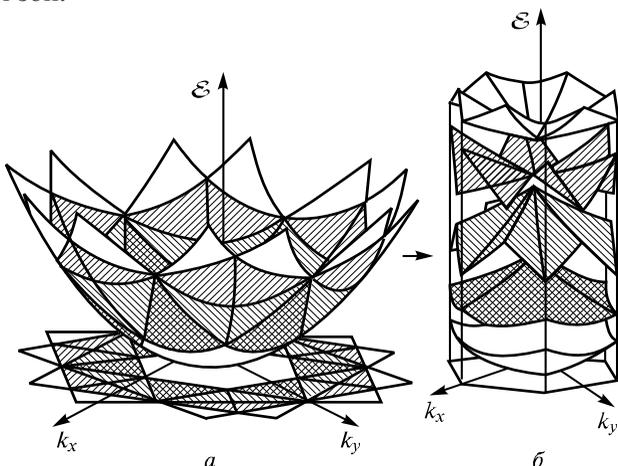


Рис. 1.7. Параболоид энергии для свободного электрона ( $E \sim k^2$ ) над двумерной гексагонной решеткой в  $k$ -пространстве (а); приведение параболоида к первой зоне Бриллюэна (б). Параболоид и  $k$ -плоскость разделены на зоны Бриллюэна в соответствии с рис. 1.6

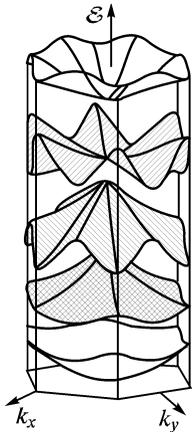


Рис. 1.8. Дисперсионная зависимость для двумерной гексагональной решетки

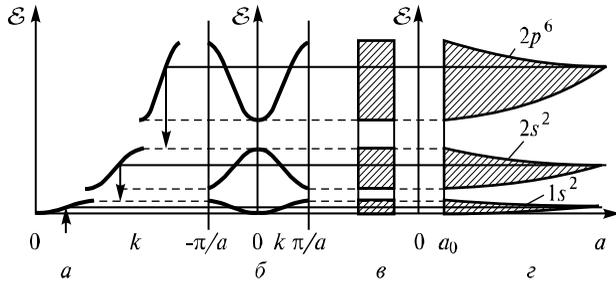


Рис. 1.9. Дискретные уровни изолированного атома и зоны Бриллюэна в кристалле: *a* – дисперсионная зависимость в приближении расширенных зон; *б* – приведенная к первой зоне; *в* – энергетический спектр разрешенных и запрещенных зон; *г* – уширение уровней при сближении атомов

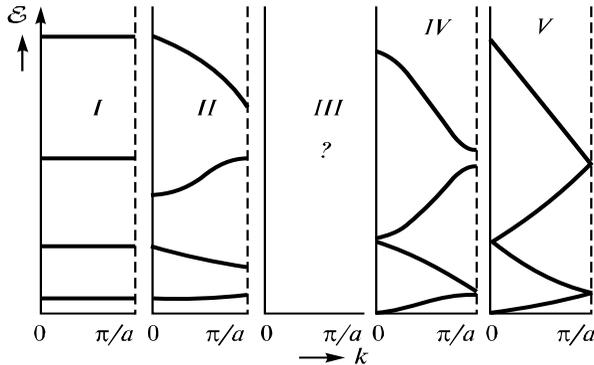


Рис. 1.10. Иерархия дисперсионных зависимостей: *I* – свободные атомы; *II* – сильная связь; *III* – реальная ситуация; *IV* – почти свободные электроны; *V* – свободные электроны

Так как энергетические зоны можно представить как результат уширения уровней при сближении атомов (рис. 1.9) и имеется соответствие между дискретными состояниями изолированного атома и зонами Бриллюэна в твердом теле (рис. 1.10), считают, что одна зона происходит от  $1s$ -состояний, одна – от  $2s$ -, три – от  $2p$ -, одна – от  $3s$ -, пять – от  $3d$  и т.д.

## *Приближения сильной связи и почти свободных электронов*

Среди методов определения электронной структуры наиболее простыми являются методы, основанные на представлении периодического поля кристалла как малого возмущения. Если искажение атомных орбиталей при образовании кристалла не очень велико, то в реальных расчетах может применяться приближение сильной связи, в котором как исходные используются волновые функции изолированных атомов, а взаимодействие атомов в кристалле рассматривается как возмущение. В варианте этого приближения применяют в качестве волновых функций линейные комбинации атомных  $s$ -,  $p$ -,  $d$ -орбиталей (*метод ЛКАО*).

Противоположным предельным приближением, справедливым при большом перекрытии волновых функций, является метод *почти свободных электронов* (ПСЭ), где предполагается, что периодический потенциал создает малое возмущение соответствующих свободным электронам волновых функций, а потому именно они принимаются за нулевое приближение.

### 1.1.2. Движение электронов под действием внешних сил в кристалле

На основе дисперсионных зависимостей описаны характеристики движения электронов в твердом теле: динамические (скорость, эффективная масса, импульс) и статические (изоэнергетические поверхности, плотность состояний в пространстве энергии), определяющие транспортные свойства твердых тел.

Движение электрона в кристаллах, где на его состояние помимо внешнего поля существенно влияют взаимодействия с другими частицами, отличается от движения свободного электрона. Однако для описания поведения электрона в твердом теле уравнение движения удобно представить так же, как и для свободного электрона, т.е. в виде второго закона Ньютона.

При движении в силовом поле  $\mathbf{F}$  скорость изменения энергии частицы

$$dE/dt = \mathbf{F}\mathbf{v}_{\text{гр}}, \quad (1.5)$$

где  $\mathbf{v}_{\text{гр}}$  – скорость частицы, соответствующая групповой скорости волнового пакета:

$$\mathbf{v}_{\text{гр}} = \nabla_k \omega \quad (1.6)$$

( $\nabla_k$  – набла-вектор в  $k$ -пространстве;  $\omega = E/\hbar$  – круговая частота колебаний). С учетом (1.5), (1.6) ускорение частицы

$$\begin{aligned} \mathbf{v}_{\text{гр}}/dt &= d(\nabla_k E/\hbar)/dt = (1/\hbar) \nabla_k dE/dt = (1/\hbar) \nabla_k \mathbf{F} \mathbf{v}_{\text{гр}} = \\ &= (1/\hbar^2) \nabla_k (\mathbf{F} \nabla_k E) = (1/\hbar^2) \sum_i \mathbf{e}_i \partial \left( \sum_l F_j \partial E / \partial k_j \right) / \partial k_i = \\ &= \sum_i \mathbf{e}_i \sum_l F_j \partial^2 E / (\partial k_j \partial k_i) \end{aligned}$$

Таким образом, вектор ускорения имеет компоненты

$$a = \sum_l F_j \left( \partial^2 E / (\partial k_j \partial k_i) \right) / \hbar^2. \quad (1.7)$$

Сравнение (1.7) со вторым законом Ньютона показывает, что тензор с компонентами

$$[m_y] \hbar^2 / \left[ \partial^2 E / (\partial k_j \partial k_i) \right]$$

имеет размерность массы; его называют *тензором эффективной массы* для электрона в периодическом поле (рис. 1.11). В твердых телах с сильной анизотропией все компоненты этого тензора отличны от нуля.

Так, в Ge и Si зона проводимости (рис. 1.12) описывается двумя значениями масс  $m_{e\perp}^*$  и  $m_{e\parallel}^*$ :

$$E(k) = \hbar^2 / 2 \left[ (k_x^2 + k_y^2) / m_{e\perp}^* + k_z^2 / m_{e\parallel}^* \right].$$

Это уравнение эллипсоида вращения с большой полуосью, расположенной в Ge вдоль направления [111] и в Si вдоль [100]. Малая полуось эллипсоида располагается в произвольном направлении в перпендикулярной плоскости, например [001] и [010] в Si и [110] и [112] в Ge.

В ряде случаев (например, для кристаллов с кубической симметрией) обоснованно приближение изотропного твердого тела, для которого  $m_{ij} = 0$  при  $i \neq j$ , а диагональные компоненты  $m_{ij}$

равны; тогда электрон имеет скалярную эффективную массу  $m_e^* = \hbar^2 / (\partial^2 E / \partial k^2)$  ( $m_e^*$  учитывает влияние сил взаимодействия электрона с кристаллической решеткой на характер его движения, но не является мерой его инерции). Введение понятия эффективной массы – прием, который позволяет решать задачи о движении электрона в твердом теле с помощью формул для свободного движения.

### Понятие о дырках

Для электронов в кристаллах сила  $\mathbf{F}$  имеет электромагнитную природу. Это позволяет при рассмотрении состояний электронов у потолка разрешенной зоны ( $m_e^* < 0$ ) вместо отрицательной  $m_e^*$  ввести понятие дырки – квазичастицы, имеющей положительный заряд и массу, равную  $|m_e^*|$ . Удобство такого подхода состоит в том, что в области тепловых скоростей, когда  $m_e^* = \text{const}$ , дырки движутся аналогично свободным частицам, что облегчает анализ.

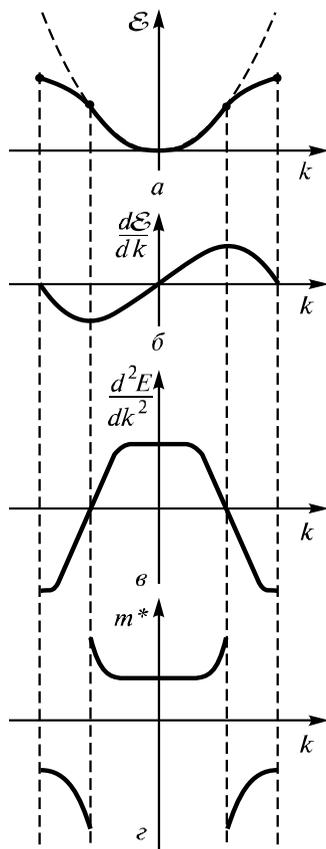


Рис. 1.11. Зависимость от волнового числа:  $a$  – энергии;  $b$  – скорости ( $\sim dE/dk$ );  $c$  –  $d^2E/dk^2$ ;  $d$  – эффективной массы электронов ( $\sim dk^2/d^2E$ )

Таблица 1.1

Относительные массы частиц в Ge и Si

Полупроводник	$m_{  }^*/m_e^*$	$m_{\perp}^*/m_e^*$	$m_{h1}^*/m_e^*$	$m_{h2}^*/m_e^*$	$m_{h3}^*/m_e^*$
Ge	1,58	0,08	0,33	0,042	0,077
Si	0,91	0,19	0,49	0,16	0,245

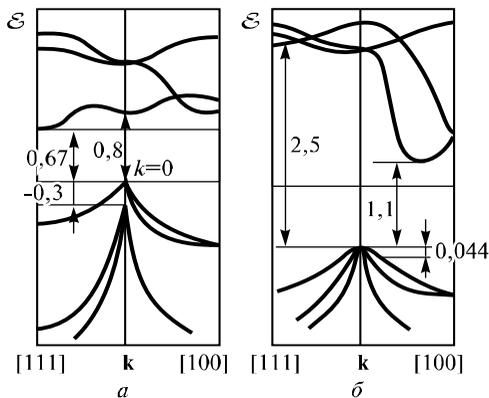


Рис. 1.12. Зависимость  $E(\mathbf{k})$  для трех валентных зон и нескольких первых зон проводимости Ge (а) и Si (б)

Эффективные массы электронов и дырок в общем случае не совпадают друг с другом; в реальных кристаллах возможно наличие ряда зон с экстремумами при близких энергиях (см. рис. 1.12), т.е. одновременно могут существовать «тяжелые» и «легкие» электроны и дырки. Так, валентная зона Ge и Si состоит из трех подзон с тремя сортами дырок (табл. 1.1).

### Изоэнергетические поверхности

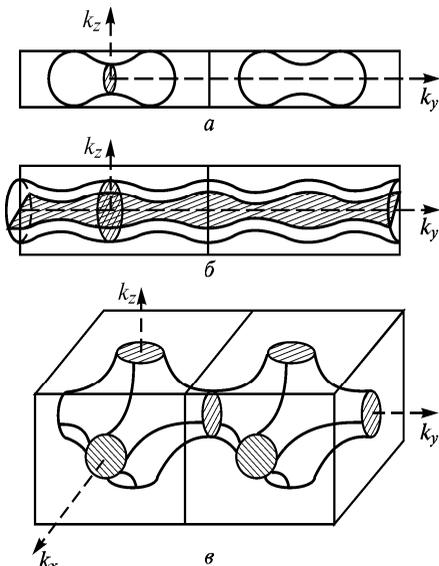


Рис. 1.13. Примеры изоэнергетических поверхностей: а – замкнутая; б – открытая в направлении  $k_y$ ; в – открытая в направлениях  $k_x, k_y, k_z$

Значения импульса (волновых векторов), соответствующие одному значению энергии, могут быть найдены по зависимостям  $E = E(k)$ . Так, для двумерной модели решетки они определяются проекцией линии уровня для поверхности  $E = E(k_x, k_y)$ , эта линия представляет собой замкнутую кривую в пространстве импульсов ( $k_x, k_y$ ), имеющую симметрию, соответствующую симметрии обратной решетки (т.е. зоны Бриллюэна). В трехмерном случае состояния с заданным

значением энергии образуют изоэнергетические поверхности в пространстве (рис. 1.13).

Наибольшую роль играют поверхности с энергией, равной энергии Ферми  $E_F$  – *поверхности Ферми* (рис. 1.14, 1.15, электроны с  $E = E_F$  определяют многие макроскопические свойства кристаллов). Для свободной частицы ( $E = k^2/\sqrt{2m}$ ) эти сферы  $k^2 = k_x^2 + k_y^2 + k_z^2 = E_F/\sqrt{2m} = \text{const}$ , для частицы в кристаллической решетке такие сферы искажаются в большей или меньшей степени (см. рис. 1.14, в основном за счет того, что границы зон Бриллюэна пересекаются изоэнергетическими поверхностями под прямыми углами). Сложный вид приобретают изоэнергетические поверхности, выходящие за пределы первой зоны Бриллюэна, после их приведения к первой зоне (рис. 1.16).

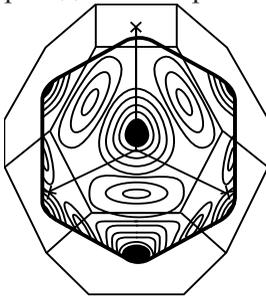


Рис. 1.14. Поверхность Ферми и границы зоны Бриллюэна для меди

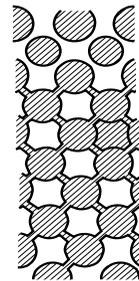


Рис. 1.15. Сечение поверхности Ферми

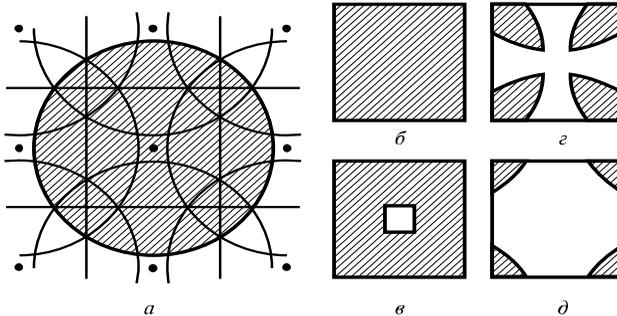


Рис. 1.16. Приведение сферы к первой зоне Бриллюэна: *a* – сфера в представлении повторяющихся зон; *б* – *в* – *д* – приведение к первой зоне от второй, третьей и четвертой зон Бриллюэна соответственно

Так, поверхность Ферми алюминия в представлении расширенных зон близка к сферической. Эта поверхность, однако, захватывает четыре зоны Бриллюэна и после отображения в первую зону образует составленную из отдельных изолированных участков многосвязную сложную поверхность.

### *Плотность состояний*

В пространстве импульсов (которому соответствует  $k$ -пространство в представлении расширенных зон) число состояний определяется волновыми свойствами электрона, приводящими к конечному размеру электрона в  $k$ -пространстве: число состояний – удвоенное число элементарных объемов  $\hbar^3$ . Для двумерной системы

$$d\zeta = (2/h^2) dp_x dp_y = [2/(2\pi)^2] dk_x dk_y$$

(фактор 2 учитывает два направления спина). Таким образом, плотность состояний равномерно распределена по  $k$ -пространству. Для нахождения распределения частиц по энергии

$$dN/dE = f(E) d\zeta/dE$$

при известной функции распределения  $f(E)$  необходима плотность распределения не по импульсам, а по энергии  $g(E) = d\zeta/dE$ :

$$g(E) dE = (d\zeta/dE) dE = \left[ 2/(2\pi)^3 \int_{(E=\text{const})} 1/(\nabla_k E(k)) dF(E) dE \right] dE,$$

где  $\nabla_k E$  – градиент в трехмерном  $k$ -пространстве;  $F(E)$  – площадь изоэнергетической поверхности.

Такое интегрирование проводится для каждой энергетической полосы; там, где полосы перекрываются (т.е. одной энергии соответствуют разные значения  $k$ ), плотности состояний складываются (рис. 1.17). Для энергий из «запрещенных зон», которым не соответствует ни одно разрешенное состояние, плотность состояний обращается в нуль (рис. 1.18).

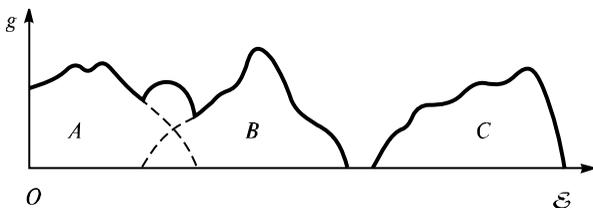


Рис. 1.17. К определению  $g(E)$  по дисперсионной зависимости

В пределах каждой зоны Бриллюэна в каждой ветви дисперсионной зависимости имеется  $2N$  состояний (где  $N$  – число атомов в теле), причем очевидна нормировка  $g$ :

$$\int_{E_1}^{E_2} g dE = 2N.$$

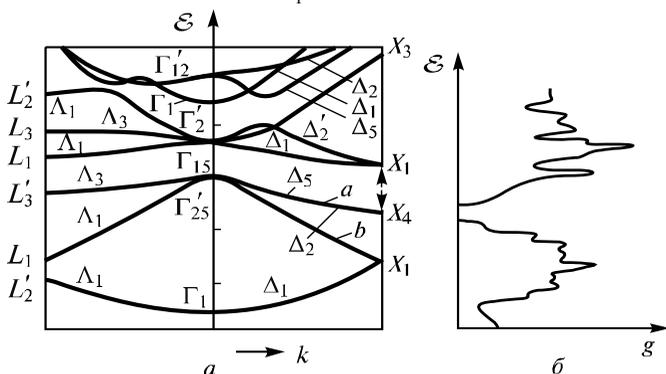


Рис. 1.18. Дисперсионное соотношение для Si (a) и соответствующая ему зависимость плотности состояний от энергии (б)

Если вблизи границы зоны эффективную массу  $m^*$  считать постоянной (функция  $E = E(k)$  близка к параболе), то плотность состояний такая же, как и у свободных частиц, но с массой, равной  $m^*$ :

$$g = \left(4\pi/h^3\right) (2m^*)^{3/2} E_k^{1/2},$$

где  $E_k$  – кинетическая энергия,  $E_k = p / (2m^*)$ ; для электронов у дна зоны с эффективной массой  $m_e$  полная энергия  $E = E_1 + p/(2m_e)$ , для дырок вблизи верха зоны проводимости (с массой  $m^*$ )

$$E = E_2 = -\left|p^2 / (2m^*)\right|,$$

т.е. у краев энергетической зоны зависимость  $g = g(E)$  имеет параболический вид (см. рис. 1.18).

Несмотря на сложность дисперсионных зависимостей  $E = E(k)$  или  $\omega = \omega(k)$  для реальных твердых тел, по ним можно оценить ряд количественных характеристик. Таким образом, из дисперсионных зависимостей получают: скорость и эффективную массу электрона при заданном значении  $k$ ; плотность состояний; распределение электронов по энергии.

### 1.1.3. Электронные свойства реальных твердых тел

#### *Металлы, диэлектрики и полупроводники*

Различия в зонной структуре существенно влияют на свойства кристаллов, в первую очередь на электропроводность, которая изменяется в пределах десятков порядков величины (табл. 1.3.1).

Таблица 1.2

Удельная электропроводность (См/м) при  $T = 300$  К

Вид твердого тела	Значение
<i>Металл</i> Медь	$10^6$
<i>Полупроводники</i> Чистый антимонид индия, кремний для транзисторов Чистый германий	$10^2$ $10^{-2}$
<i>Диэлектрики</i> Чистый сульфид кадмия Полиэтилен Парафин	$10^{-6}$ $10^{-10}$ $10^{-14}$

С точки зрения зонной теории принципиальное отличие неметаллов заключается в наличии у первых не целиком заполненных зон, т.е. уровень Ферми находится в пределах разрешенной зоны (рис. 1.19).

Среди металлов по типу заполнения зон выделяют два класса веществ. В первом из них верхняя занятая электронами зона заполнена лишь частично (рис. 1.19, а). Типичными представителями

таких веществ являются щелочные металлы, например в атоме Na десять внутренних электронов образуют замкнутые  $1s^2$ -,  $2s^2$ -,  $2p^6$ -оболочки, в твердом теле они соответствуют узким, целиком заполненным зонам (пяти зонам Бриллюэна). Расположенный в следующей, шестой, зоне валентный электрон находится в  $3s$ -состоянии. При объединении  $N$  атомов Na в кристалл в  $3s$ -зоне имеется  $2N(2l+1) = 2N$  состояний ( $l=0$  – орбитальное квантовое число), а присутствует лишь  $N$  электронов, что и определяет металлические свойства натрия.

К другому классу относят вещества, у которых верхняя зона, соответствующая целиком заполненным оболочкам в атомах, перекрывается со следующей (свободной в атомах) зоной, образуя единую разрешенную (рис. 1.20, 1.21).

Диэлектрики и полупроводники характеризуются тем, что при  $T=0$  у них каждая зона либо заполнена ( $f_F = 1$ ), либо свободна ( $f_F = 0$ ), т.е. уровень Ферми попадает в запрещенную зону (рис. 1.19, б, в; 1.22). Различие между диэлектриками и полупроводниками достаточно условно и не имеет принципиального характера. Полупроводниками считаются неметаллические твердые тела, в которых ширина запрещенной зоны

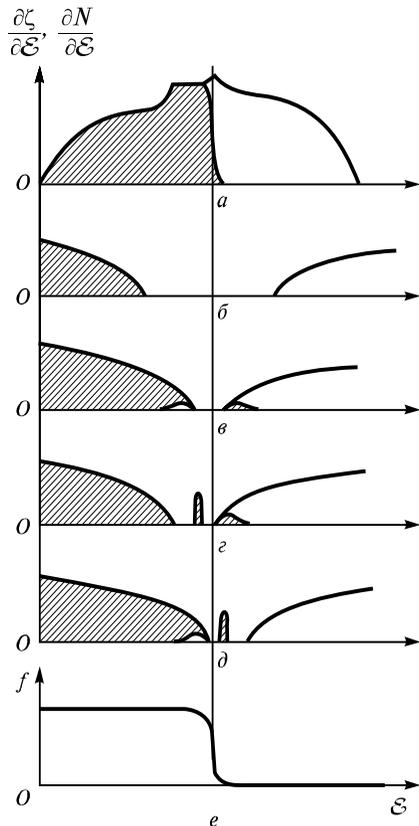


Рис. 1.19. Плотность состояний и распределение электронов (заштрихованная часть) по энергии: а – металл; б – диэлектрик; в – собственный полупроводник; г – донорный полупроводник; д – акцепторный полупроводник; е – распределение Ферми – Дирака

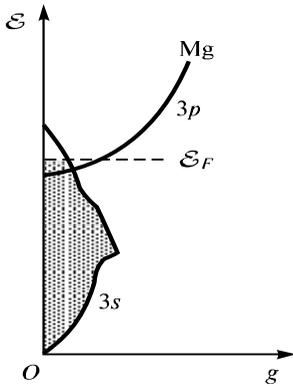


Рис. 1.20. Плотность состояний у Mg

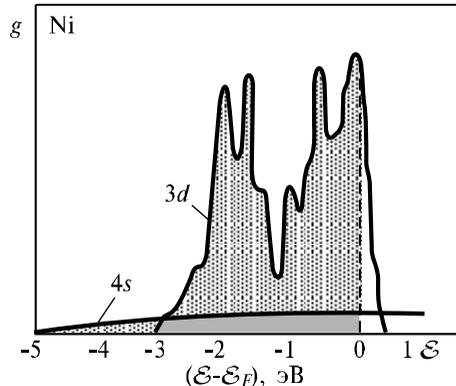


Рис. 1.21. Плотность состояний у Ni

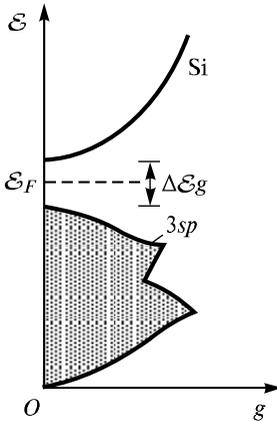


Рис. 1.22. Плотность состояний у Si

$\Delta E_g < 2...2,5$  эВ и может быть создана высокая концентрация локализованных состояний дефектов структуры в запрещенной зоне возле какого-либо ее края. Неметаллы с  $\Delta E_g < 3...10$  эВ и уровнями дефектов в запрещенной зоне, далекими от ее границы, являются диэлектриками.

### Распределение электронов по энергиям

Концентрация электронов в зоне проводимости металла ( $n_e \sim 10^{28} \text{ м}^{-3}$ ) соизмерима с плотностью разрешенных квантовых состояний, но все же меньше ее. Значение  $f(E)$  меняется от единицы до нуля на  $\Delta E = k_B T \ll E_F$  ( $k_B T = 0,01...0,1$  эВ,  $E_F = 3...5$  эВ), т.е. при  $E < 0,91E_F$  распределение электронов по энергиям соответствует распределению разрешенных состояний, а при  $E > E_F - F \ll 1$  (рис. 1.23).

В собственных полупроводниках и диэлектриках при  $T = 0$  К целиком заполнена валентная зона и полностью свободна зона проводимости, что соответствует расположению энергии Ферми в запрещенной зоне и при  $T > 0$  К. При этом у границы запрещенной зоны в зоне проводимости появляется некоторое количество электронов, равное в соответствии с распределением Ферми и функцией плотности состояний для квазисвободных электронов

$$\begin{aligned}
 n_e &= \int_{E_c}^{E_2} d\zeta/dE f_F(E) dE = \\
 &= \int_{E_c}^{E_2} (4\pi/h^3)(2m_e^*)^{3/2} \times \\
 &\quad \times (E - E_c)^{1/2} \times \\
 &\quad \times \{1/\exp[(E - E_F)/(k_B T)] + 1\},
 \end{aligned} \quad (1.8)$$

где  $E_2$  – верхняя граница зоны проводимости.

Поскольку  $k_B T \ll E_2 - E_c$ , верхний предел может быть заменен на  $\infty$  (вклад в интеграл участка от  $E_2$  до  $\infty$  мал). Интеграл (1.8) (*интеграл Ферми*) не выражается через элементарные функции; чтобы получить простое выражение, пренебрегают единицей в знаменателе, т.е. переходят к распределению Максвелла. Интегрируя, получают число электронов в зоне проводимости

$$n_e = N_c \exp[-(E_c - E_F)/(k_B T)], \quad (1.9)$$

где  $N_c$  – эффективная плотность состояний в зоне проводимости,

$$N_c = 2(2\pi m_e^* k_B T / h^2)^{3/2}. \quad (1.10)$$

Для валентной зоны число дырок определяют аналогично:

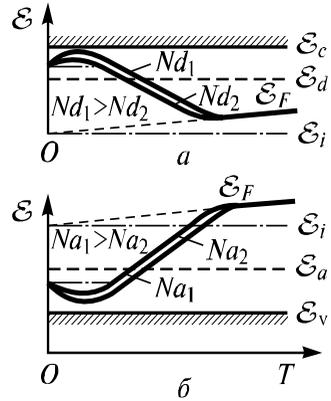


Рис. 1.23. Температурная зависимость уровня Ферми в полупроводнике: *a* – с одним типом донорной примеси; *б* – с одним типом акцепторной примеси для двух различных концентраций (*штриховой линией* показан ход зависимости уровня Ферми в нелегированном полупроводнике)

$$\begin{aligned}
n_h &= \int_{E_1}^{E_V} (d\zeta/dE[1 - f_F(E)])dE = \int_{E_1}^{E_V} (4\pi/h^3)(2m_h^*)^{3/2} (E_V - E)^{1/2} \times \\
&\quad \times [1 - 1/(\exp[(E - E_F)/(k_B T)] + 1)]dE \cong \\
&\cong \int_{E_1}^{E_V} (4\pi/h^3)(2m_h^*)^{3/2} (E_V - E)^{1/2} \exp[-(E_F - E)/(k_B T)]dE.
\end{aligned}$$

Окончательно

$$n_h = N_V \exp[-(E_F - E_V)/(k_B T)], \quad (1.11)$$

где  $N_V$  – эффективная плотность состояний в валентной зоне,

$$N_V = 2 \left( 2\pi m_h^* k_B T / h^2 \right)^{3/2}. \quad (1.12)$$

Вследствие квазинейтральности кристалла  $n_e = n_h$ , откуда с учетом (1.9) – (1.12)

$$E_F = (E_C + E_V)/2 + (3/4)k_B T \ln(m_h^*/m_e^*). \quad (1.13)$$

При  $T = 0$  К из (1.13) следует, что уровень Ферми расположен посередине запрещенной зоны; с ростом температуры он, как правило, несколько смещается вверх (так как обычно  $m_h^* > m_e^*$ ). Подстановка (1.13) в (1.9) дает число электронов в зоне проводимости и дырок в валентной зоне беспримесного полупроводника или диэлектрика

$$n_e = n_h = (N_c N_V)^{1/2} \exp[-\Delta E_g / 2(k_B T)].$$

При наличии в полупроводнике некоторой концентрации  $N_d$  донорной примеси (см. рис. 1.19, *з*, примеси со слабосвязанными электронами) в запрещенной зоне на малом расстоянии  $\Delta E_d \ll \Delta E_g$  от дна зоны проводимости образуется уровень, при  $T = 0$  К заполненный электронами, а уровень Ферми расположен посередине между донорным уровнем и дном зоны проводимости (рис. 1.23, *а*). С ростом температуры концентрация свободных электронов растет по закону

$$n_e = (N_d N_c)^{1/2} \exp[-\Delta E_d / 2(k_B T)]. \quad (1.14)$$

При дальнейшем повышении температуры до  $T = T_1$  (рис. 1.24) происходит полная ионизация донорной примеси, и  $n_e = N_d$ . Если концентрация примеси значительна, а  $\Delta E_d \ll \Delta E_g$ , то процессы возбуждения электронов валентной зоны сказываются только при высоких температурах  $T > T_2 \gg T_1$ , и при  $T_1 < T < T_2$  число электронов постоянно. При  $T \gg T_2$  наличие примеси сказывается слабо на  $n_e$ , и  $n_e$  можно вычислять по (1.13). При нагреве  $E_F$  сначала смещается ко дну зоны проводимости, а затем отходит от него, стремясь к положению  $E_F$  для собственного полупроводника (см. рис. 1.23, а).

В полупроводниках с акцепторной примесью незаполненный уровень находится на малом расстоянии  $\Delta E_a \ll \Delta E_g$  от верха валентной зоны. Рассмотрение поведения дырок приводит к аналогичным результатам: концентрация дырок при невысоких температурах ( $T \ll \Delta E_a / (2k_B)$ )

$$n_h = (N_c N_a)^{1/2} \exp[-\Delta E_a / (2k_B T)],$$

при более высоких температурах меняется в соответствии с рис. 1.23, б, а поведение уровня Ферми – как в случае с однородной примесью (с точностью до симметричного отображения относительно середины запрещенной зоны).

### Квазиуровни Ферми

Понятие уровня Ферми справедливо для электронного газа, находящегося в тепловом равновесии с кристаллической решеткой. Однако энергетический спектр электронов может быть изменен под действием внешних возбуждающих факторов (таких, как облуче-

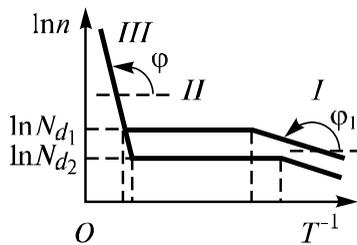


Рис. 1.24. Зависимость концентрации электронов в зоне проводимости от  $1/T$  для различных концентраций донорной примеси,  $N_{d1} > N_{d2}$ : *I* – область возрастания примесной электропроводности; *II* – область полной ионизации примеси; *III* – область собственной электропроводности

ние светом, рентгеновское излучение, сильное электрическое поле, инжекция носителей заряда через границу кристалла, бомбардировка заряженными частицами) – концентрация становится выше равновесной из-за избыточных носителей заряда, называемых *неравновесными носителями*, причем энергия их может оказаться много большей средней тепловой энергии (рис. 1.25).



Рис. 1.25. Квазиуровни Ферми

( $\tau \sim 10^{-10}$  с) выравнивают свою энергию с энергией равновесных носителей заряда и подчиняются статистике, свойственной данному телу. Неравновесными они остаются лишь с точки зрения избыточной концентрации. Для нахождения общей концентрации носителей заряда в теле при наличии нетеплового возбуждения можно пользоваться формулами (1.9) и (1.10), однако уровень Ферми должен быть заменен квазиуровнями

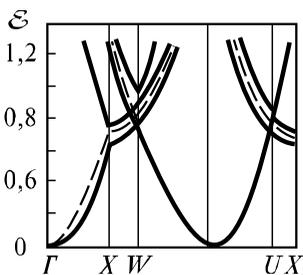


Рис. 1.26. Дисперсионное соотношение для Al (штриховой линией показана дисперсионная зависимость для газа свободных электронов)

В процессе столкновений с атомами решетки неравновесные носители заряда за малый промежуток времени

должен быть заменен квазиуровнями Ферми, значения которых для электронов и дырок различны. В случае избыточной концентрации квазиуровень Ферми для электронов выше равновесного уровня Ферми, для дырок – ниже (рис. 1.26). Чем выше концентрация неравновесных носителей заряда, тем дальше отстоят квазиуровни от уровня Ферми.

Полная концентрация электронов и дырок  $n$  и  $p'$  связана с равновесной концентрацией  $n$  и  $p$  выражениями

$$n'_e = n_e \exp\left[\frac{(E_{Fe}^* - E_F)}{(k_B T)}\right],$$

$$n'_h = n_h \exp\left[\frac{(E_F - E_{Fh}^*)}{(k_B T)}\right],$$

где  $E_{Fe}^*$  и  $E_{Fh}^*$  – квазиуровни Ферми для электронов и дырок.

Для неравновесного полупроводника не выполняется закон действующих масс:  $n'_e n'_h (n_e n_h) = \exp\left[\frac{(E_{Fe}^* - E_{Fh}^*)}{(k_B T)}\right]$ .

### Электронные свойства простых металлов

Простые металлы (см. табл. 1.2) имеют валентные электроны, относительно слабо связанные с атомами, т.е. для этих веществ применимо приближение почти свободных электронов (см. рис. 1.25). Эффективная масса электронов практически совпадает с массой свободного электрона. Поверхность Ферми и другие изоэнергетические поверхности для них в первом приближении описываются сферой в  $k$ -пространстве с радиусом  $k_F$ , который определяется так, чтобы все имеющиеся валентные электроны поместились внутри сферы. Например, если в единице объема имеется  $N$  электронов, то  $(4/3)\pi k_F^3 / (2\pi)^3 = N$ , откуда

$$k_F = (3\pi^2 N)^{1/3}.$$

Концентрация электронов определяется концентрацией атомов (которую можно найти по плотности кристалла) и числом  $Z'$  валентных электронов. Существенно, что  $Z'$  – целое число и определено однозначно для каждого элемента. Скорость электрона  $v_F = \hbar k_F / m^*$  (по порядку величины  $v_F \approx 10^{-2} c$ ,  $v_F \approx 10^3 v_s$ ). Кинетическая энергия электронов на поверхности Ферми  $K_F = \hbar^2 k_F^2 / (2m^*)$ , а средняя кинетическая энергия электронов

$$\langle K \rangle = \left( \int_0^{k_F} [\hbar^2 k^2 / (2m^*)] 4\pi k^2 dk \right) / \int_0^{k_F} 4\pi k^2 dk = (3/5) K_F.$$

В представлении повторяющихся зон изоэнергетические поверхности (в частности, поверхности Ферми) для простых металлов весьма близки к сферам, отличия от сферичности возникают лишь вблизи границ зон Бриллюэна.

В зависимости от значения  $k_F$  поверхность Ферми может занимать положение в первой зоне Бриллюэна или в большей или меньшей степени располагаться в других зонах. Так, для Cu по-

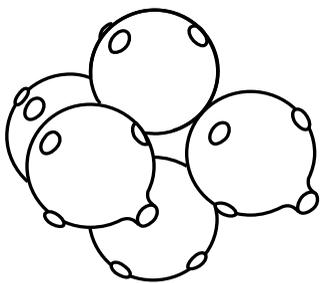


Рис. 1.27. Поверхность Ферми для Si в представлении повторяющихся зон

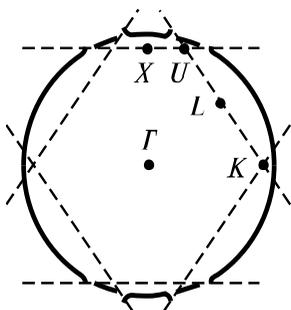


Рис. 1.28. Сечение поверхности Ферми для Al (штриховыми линиями показаны сечения границ зон Бриллюэна). Поверхность Ферми близка к сферической и располагается во 2, 3 и 4-й зонах Бриллюэна

верхность Ферми целиком находится в первой зоне Бриллюэна и возмущения сферичности имеются лишь там, где эта поверхность подходит к границам зоны: там образуются «перешейки», так что сферы Ферми соединены (рис. 1.27). Для Al  $k_F$  больше радиальных размеров первой зоны Бриллюэна, и близкая к сферической поверхность Ферми располагается во 2, 3 и 4-й зонах Бриллюэна (рис. 1.28). В представлении повторяющихся зон такие поверхности приблизительно представляли бы собой взаимно пересекающиеся сферы, получающиеся при увеличении размеров сфер с сохранением межцентровых расстояний. Если перевести такую поверхность в первую зону Бриллюэна (представление приведенных зон), то получается весьма сложная многосвязная поверхность – «монстр» (рис. 1.29).

Энергия связи простых металлов и полупроводников IV группы представлена табл. 1.3.

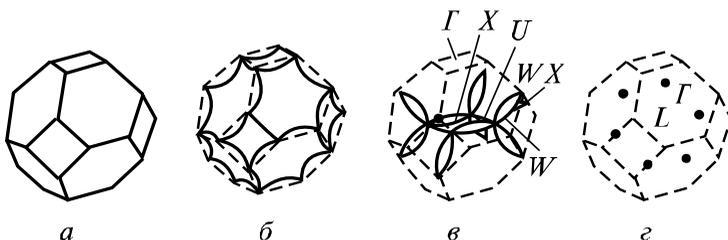


Рис. 1.29. Поверхность Ферми («монстр») для Al: границы первой зоны Бриллюэна (а) и приведение 2-й (б), 3-й (в) и 4-й (г) зон Бриллюэна

Таблица 1.3

**Энергия связи  $E_s$  (эВ) простых металлов  
(а также полупроводников IV группы)**

2 ( $z'=2$ )	3 ( $z'=3$ )	4 ( $z'=4$ )	5 ( $z'=5$ )	9 ( $z'=1$ )	10 ( $z'=2$ )
				Li	
				1,63	
Be	B	C		Na	
3,32	5,77	7,37		1,11	
Mg	Al	Si		K	Ca
1,59	3,39	4,63		0,934	1,84
Zn	Ga	Ge	As	Rb	Sr
1,35	2,81	3,85	2,96	0,852	1,72
Cd	In	Sn	Sb	Cs	Ba
1,16	2,52	3,14	2,75	0,804	1,90
Ng	Ti	Pb	Bi		
0,67	1,88	2,03	2,18		

**Электронное строение переходных металлов**

Общая отличительная черта переходных металлов – значительное влияние внутренних  $d$ - или  $f$ -оболочек на электронные свойства.

В  $d$ -переходных металлах имеется пять узких зон, соответствующих  $d$ -состояниям, которые пересекают зоны почти свободных  $s$ -электронов,  $d$ -состояния удобно рассматривать как линии атомарных  $d$ -уровней на фоне сплошного спектра газа свободных валентных  $s$ -электронов, тем более что волновые функции  $d$ -состояний кристалла оказываются близки к волновым функциям  $d$ -состояний атомов.

Большое число  $d$ -зон приводит к существенному изменению плотности состояний вблизи  $E_F$  (рис. 1.30), что важно для целого ряда физических свойств. Плотности состояний на уровне Ферми изображены на рис. 1.31.

Приближенно плотность состояний переходных металлов представляют в виде суммы двух вкладов (модель Фриделя, см. рис. 1.30). Первый – это плотность состояний  $d$ -типа, расположенная вблизи энергии  $E_d$  в пределах области с шириной  $W_d$ :  $g_d(E) = 10/W_d$  при  $(E_d - W_d/2) < E < (E_d + W_d/2)$ . Кроме того,

имеется плотность состояний почти свободных  $s$ -электронов:  $g_s(E) = [2/(3\pi)](2m_s^*r_0^2/\hbar^2)^{3/2} E^{1/2}$ . Эффективная масса  $m_s^*$  равна  $m/[1 + 5r_d^3/(\pi r_0^3)]$ . Параметры модели Фриделя приведены в табл. 1.4.

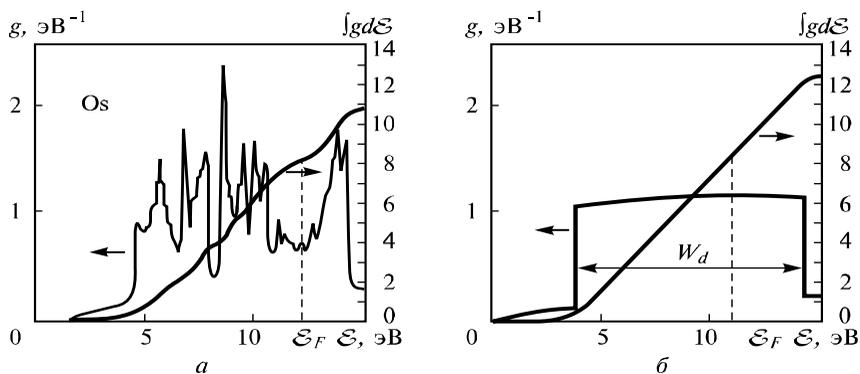


Рис. 1.30. Плотность состояний переходного металла (а) и модель Фриделя (б)

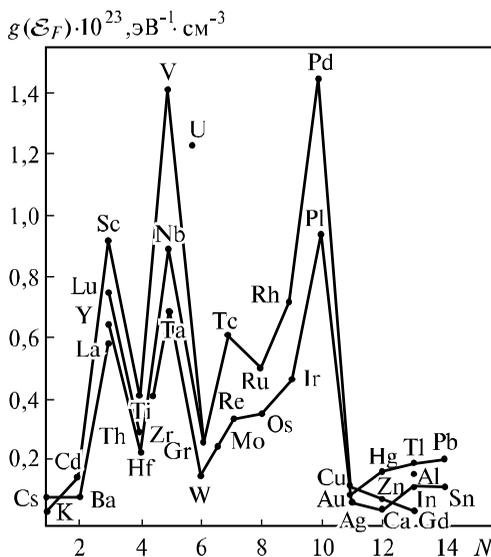


Рис. 1.31. Плотность состояний на уровне Ферми. По оси абсцисс отложено число валентных электронов на атом

Таблица 1.4

Параметры модели Фриделя для переходных металлов:  
ширина  $d$ -зоны  $W_d$ , ее средняя энергия  $E_d$  (эВ),

$$\text{число } s\text{-электронов на один атом } N_s = \int_0^E g_s dE$$

Параметры	Sc	Ti	V	Cr	Mn	Fe	Co	Ni	Cu
$W_d$	5,13	6,08	6,77	6,56	5,60	4,82	4,35	3,78	2,80
$E_d$	7,05	7,76	8,13	8,01	7,91	7,64	7,36	6,91	5,90
$N_s$	0,46	0,58	0,69	0,76	0,82	0,84	0,84	0,81	1,00
Параметры	Y	Zr	Nb	Mo	Tc	Ru	Rh	Pd	Ag
$W_d$	6,59	8,37	9,72	9,98	9,42	8,44	6,89	5,40	3,63
$E_d$	6,75	7,17	7,29	7,12	6,67	6,02	5,08	4,52	2,49
$N_s$	0,39	0,47	0,57	0,67	0,72	0,73	0,66	0,59	1,00
Параметры	Lu	Hf	Ta	W	Re	Os	Ir	Pt	Au
$W_d$	7,81	9,56	11,12	11,44	11,02	10,31	8,71	7,00	5,28
$E_d$	8,44	9,12	9,50	9,45	8,99	8,38	7,35	6,51	5,18
$N_s$	0,54	0,67	0,82	0,96	1,04	1,09	1,02	0,94	1,00

### Электронное строение ковалентных кристаллов

При описании строения ковалентных кристаллов применимы приближение сильной связи и метод ЛКАО. В этом случае происходит удаление формы изоэнергетических поверхностей от сферической и приближение ее к границам зон Бриллюэна (см. рис. 1.28 и 1.32). Поверхность Ферми заменяется участками плоскостей брэгговского отражения, в пределе граница свободных и занятых состояний совпадает с границами зон Бриллюэна, так что при  $T = 0$  К одни зоны целиком заполнены электронами, а другие – свободны, т.е. такие кристаллы ведут себя как диэлектрики или полупроводники.

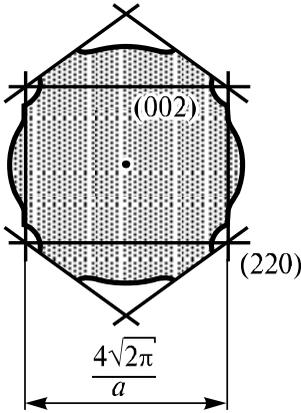


Рис. 1.32. Сечение поверхности Ферми при увеличенном псевдопотенциале (ср. с рис. 1.28). Граница занятого электронами объема в  $k$ -пространстве частично проходит по плоскостям границ зон Бриллюэна

Для ковалентных кристаллов со структурой алмаза с увеличением атомного номера растет расстояние между атомами и повышается степень металличности – уменьшается ширина запрещенной зоны  $\Delta E_g \sim a^{-2}$ .

Зонная структура при этом качественно не меняется (рис. 1.33). Кристаллы с ионной составляющей связи, изоэлектронные с Si, имеют качественно подобные со спектром Si электронные спектры, которые регулярным образом меняются при изменении степени ионности и степени металличности. В частности,  $\Delta E_g$  приближенно описывается соотношением

$$\Delta E_g = 1,2(V_2^2 + V_3^2)^{1/2} (1 - \alpha_m).$$

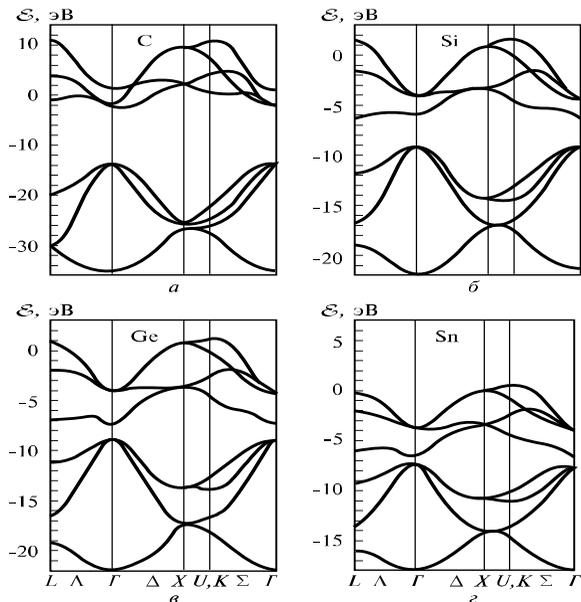


Рис. 1.33. Дисперсионные соотношения C (а), Si (б), Ge (в), Sn (г)

Ковалентные связи могут образовывать также плоские структуры, такие, как в графите, где *sp*-гибридизованные орбитали связывают атомы углерода в плоскую решетку с расстоянием между атомами всего 0,142 нм. Четвертые валентные *p*-электроны образуют относительно слабые (расстояние 0,34 нм) связи между плоскостями. Это объясняет, с одной стороны, тугоплавкость графита, а с другой – малую сопротивляемость сдвигу плоскостей. Электронные состояния, связывающие плоскости между собой, заполнены только наполовину, поэтому графит имеет проводимость металлического типа и является полуметаллом (проводимость его невелика, так как число состояний у  $E_F$  относительно мало).

Для полупроводников с малой степенью металличности и ионности (Si, SiC, BP, GaP и др.) минимум зоны проводимости находится в одной точке зоны Бриллюэна (точке  $X$ ), а максимум валентной зоны – в другой (в точке  $\Gamma$ ) (*непрямозонные полупроводники*).

#### *Электронное строение кристаллов с замкнутыми электронными оболочками (ионных и молекулярных кристаллов)*

К кристаллам с замкнутыми электронными оболочками относятся, в-первых, кристаллы инертных газов и, во-вторых, ионные кристаллы, в которых замкнутые оболочки образуются в результате перехода электронов от катионов к анионам.

Энергетические зоны кристаллов инертных газов хорошо описываются в терминах приближения сильной связи, т.е. они представляют собой несколько уширенные атомные уровни, а  $\Delta E_g$  близка к энергии ионизации атомов;  $\Delta E_g$  пропорциональна  $a^{-2}$ . Атомным возбужденным состояниям соответствуют сильно связанные экситонные состояния (*экситоны Френкеля*, подробнее см. разд. 1.2.2). Эти же особенности отличают и другие молекулярные кристаллы, связанные силами Ван-дер-Ваальса.

Замкнутые оболочки «прочные»; они препятствуют сближению ядер и поэтому определяют межъядерные расстояния в ионных кристаллах в первом приближении как просто сумму ионных радиусов аниона и катиона. В ионных кристаллах кулоновское взаимодействие много больше ван-дер-ваальсова взаимодействия в молекулярных кристаллах, и межатомное расстояние в них оказывается несколько меньше. Поэтому возникают заметное перекрытие волновых функций и уширение атомарных уровней в более широкие зоны.

Определяющая электронную проводимость кристалла  $\Delta E_g$  может быть определена по приближенной зависимости

$$\Delta E_g = \eta_g \hbar^2 / (ma^2),$$

где  $a$  – расстояние между ионами;  $\eta_g$  – полуэмпирический коэффициент,  $\eta_g = 9,1$  для одновалентных соединений (заряд иона  $Z = 1$ ),  $5,3$  для  $Z' = 2$  и  $1,6$  для  $Z' = 3$ . Для соединений одно- и двухвалентных ионов ( $\text{CaF}_2$ ,  $\text{Na}_2\text{S}$  и т.п.)  $\eta_g = 2,8$ . Электроны аниона испытывают притяжение катиона, поэтому заряд отрицательного иона уменьшается относительно  $Z'$ , что называют расплыванием заряда, или уменьшением жесткости иона. Так, для одновалентных ионов щелочно-галогидных соединений  $Z^* = 0,51$  (это значение используют для приближенной оценки электростатического поля и его градиента в кристалле).

### Электронная структура аморфных тел

Отсутствие трансляционной симметрии изменяет подходы к описанию электронной структуры аморфных тел. Рассеяние носителей заряда в непериодическом поле столь велико, что (квази) импульс  $\mathbf{k}$  не сохраняется даже приближенно, и потому не имеют смысла дисперсионные соотношения  $E = E(\mathbf{k})$ , неприменимы также понятия зоны Бриллюэна и поверхности Ферми (но остаются понятия плотности состояний  $d\zeta/dE$  и распределения Ферми для электронов).

Важную роль играет понятие пространственной локализации электронных состояний. Для его количественного определения (в модели Андерсона) рассматривается трехмерная решетка с правильно расположенными потенциальными ямами – «атомами», каждый из которых имеет один (основной) уровень энергии  $E_i$  (если эти уровни одинаковы, то получается трехмерный аналог модели Кронига – Пенни, т.е. энергетические состояния расщепляются в полосу шириной  $\Delta E$ ). Чтобы рассмотреть влияние аморфизации, уровни энергии следует считать различными, статистически распределенными по диапазону  $\Delta U$  (рис. 1.34). Если данное электронное

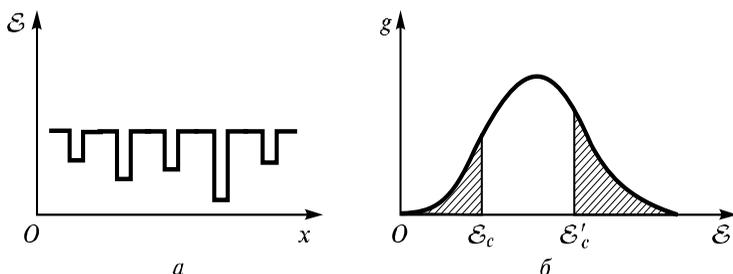


Рис. 1.34. Потенциальный рельеф (а) и плотность состояний (б) в модели Андерсона (заштрихованы локализованные состояния)

состояние локализовано, то область движения электрона  $E = E(t \rightarrow \infty)$  ограничена, и при больших временах  $t \rightarrow t_\infty$  имеется ненулевая вероятность возвращения электрона в потенциальную яму, в которой он находился в момент  $t = 0$  (это реализуется при  $\Delta U/\Delta E > 5$ ). Если состояние делокализовано, то эта вероятность стремится к нулю.

Единичные дефекты в правильном кристалле создают дискретные примесные уровни, и при увеличении их концентрации расстояния между ними в решетке становятся достаточно малыми, чтобы происходило их взаимодействие, приводящее к расщеплению уровней (как у атомов в молекуле). С дальнейшим ростом концентрации дефектов вместо уровней образуются полосы. В случае примесей замещения типа доноров или акцепторов либо относительно небольших искажений структуры кристаллической решетки первыми локализуются состояния с малой кинетической энергией – у краев разрешенных зон, и полосы локализованных состояний простираются в запрещенную зону (рис. 1.35). При наличии примесей с глубокими уровнями, а также с грубым нарушением структуры (например, примеси внедрения и оборванные связи вследствие воздействия потоков частиц высоких энергий) полосы локализованных состояний образуются с расплыванием соответствующих дискретных уровней (рис. 1.36).

Плотность состояний  $g$  в пределах области, соответствовавшей в кристалле запрещенной зоне, может обращаться в нуль либо быть конечной. Энергетическим спектром с  $g = 0$  обладают прозрачные (см. рис. 1.35) некристаллические вещества. В случае  $g \neq 0$  весь энергетический интервал  $E_i < E < E_c$  заполнен, но эта область принципиально отличается от разрешенных зон.

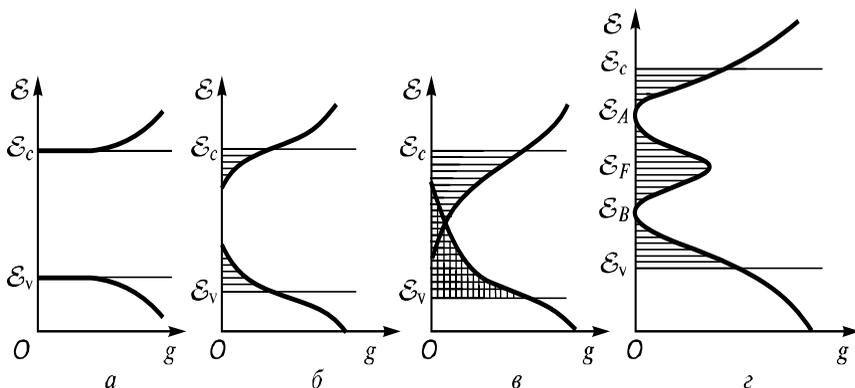


Рис. 1.35. Расплывание зон локализованных состояний с ростом концентрации дефектов (а – г)

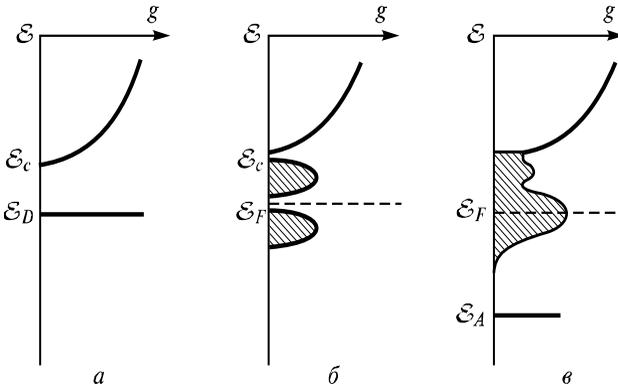


Рис. 1.36. Образование полосы локализованных состояний с ростом концентрации дефектов ( $a - v$ )

Так, электроны, локализованные здесь на дискретных уровнях, могут участвовать в переносе заряда только путем перескоков. При  $T \rightarrow 0$  К вероятность последних стремится к нулю, так что их вклад в электропроводность полностью исчезает, т.е. область  $E_v < E < E_c$  можно называть запрещенной зоной. Термины «зона проводимости» и «валентная зона» также используются в физике некристаллических веществ. При этом их относят к областям энергий, занятым нелокализованными состояниями для электронов и дырок, которые можно считать квазисвободными, как и в правильных кристаллах.

## 1.2. Колебания в твердом теле и квазичастицы

### 1.2.1. Простейшие модели тепловых колебаний

Рассмотрены колебания атомов в решетке, выведены дисперсионные зависимости; как и для электронов в твердом теле, по ним определяют значения скоростей звука, плотности состояний, степень анизотропии распространения колебаний и др. Проанализированы характерные дисперсионные зависимости реальных твердых тел.

#### *Тепловые колебания атомов решетки*

В результате теплового движения частиц происходят небольшие (порядка  $10^{-2}a$ ) смещения атомов из положения равновесия, что

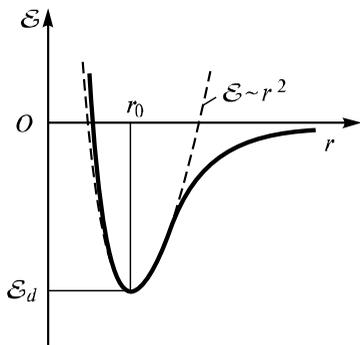


Рис. 1.37. Потенциальная энергия взаимодействия атомов (сплошная линия) и параболическая аппроксимация (штриховая линия)

является нарушением периодичности решетки. В положении равновесия энергия атома минимальна (рис. 1.37), и смещенный атом стремится возвратиться в это положение, что служит причиной колебательных процессов. Атом условно можно представить связанным упругими силами со всеми ближайшими атомами решетки (дальние взаимодействия в начальном приближении можно не учитывать). Последние, в свою очередь, совершают колебательные движения, и получается сложная картина из  $N$  колеблющихся атомов, каждый из которых имеет три колебательные степени свободы ( $3N$ ). Колебательные процессы в кристалле могут быть также представлены в виде движения  $N$  волн (фурье-компонента разложения) с разными частотами (нормальных колебаний), в каждом из которых участвуют все атомы решетки: движение каждого атома в таком представлении определяется суперпозицией всех  $3N$  нормальных колебаний в точке равновесия этого атома.

### Колебания цепочки одинаковых атомов

Основные представления о колебательных процессах в кристаллах можно получить, рассмотрев простую (классическую) модель – одномерную цепочку шаров, связанных упругими силами («пружинами»), рис. 1.38, где сила  $F_j$ , действующая на каждый шар  $j$ , линейно (по закону Гука) зависит от расстояния до ближайших соседей  $j-1$  и  $j+1$

$$F_j = C_x (\Delta_{j+1} - \Delta_j) - C_x (\Delta_j - \Delta_{j-1}) = C_x (\Delta_{j+1} + \Delta_{j-1} - 2\Delta_j), \quad (1.15)$$

где  $\Delta_j = x_j - x_{j0}$  – смещение  $j$ -го шара относительно положения равновесия  $x_{j0}$ ;  $C_x$  – коэффициент упругости. Возможность тако-

го представления связана, во-первых, с тем, что при характерных малых смещениях сила, действующая на атомы, пропорциональна смещению (т.е.  $\partial^2 E / \partial x^2 = \text{const}$ , см. рис. 1.37), а во-вторых, с тем, что ядра, в которых сосредоточена масса атомов, на характерных расстояниях могут рассматриваться как классические частицы. Согласно второму закону Ньютона, возвращающая сила, действующая на  $j$ -й атом,

$$F_j = m d^2 x_j / dt^2 = m d^2 \Delta_j / dt^2. \quad (1.16)$$

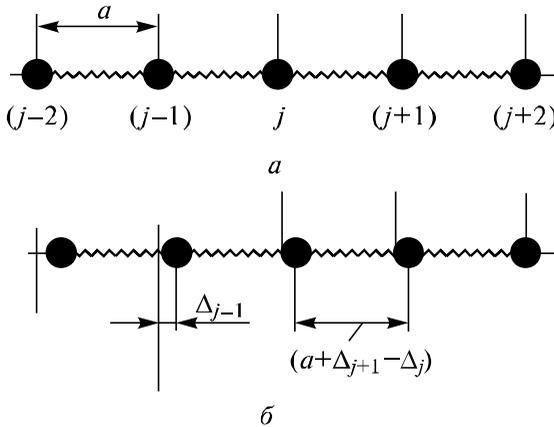


Рис. 1.38. Линейная одноатомная решетка:  $a$  – атомы находятся в положении равновесия;  $b$  – атомы смещены вследствие прохождения продольной волны

Представляя решение в виде плоской волны

$$\Delta_j = A \exp[i(qx_j - \omega t)], \quad (1.17)$$

(где  $q$  – волновое число;  $\omega$  – частота колебаний) и подставляя (1.17) в (1.15) и (1.16), получают связывающее  $q$  и  $\omega$  дисперсионное уравнение, которое описывает спектр и характеристики колебаний, в виде

$$\omega^2 = 4(C_x/m) \sin^2(qa/2), \quad (1.18)$$

где  $a = x_{j,0} - x_{j-1,0}$  – период решетки дисперсионной кривой (рис. 1.39); область малых  $q$  соответствует большим длинам волн,

для них групповая скорость распространения колебаний – скорость звука составляет

$$v_0 = \partial\omega/\partial q = \partial x \left[ (4C_x/m)^{1/2} \sin(qa/2) \right] / \partial q = (C_x/m)^{1/2} a = \omega_{\max} a/2 \quad (1.19)$$

и не зависит от длины волны. Это линейное низкочастотное приближение справедливо для частот примерно до  $10^{12}$  Гц, что перекрывает акустический и ультразвуковой диапазоны частот.

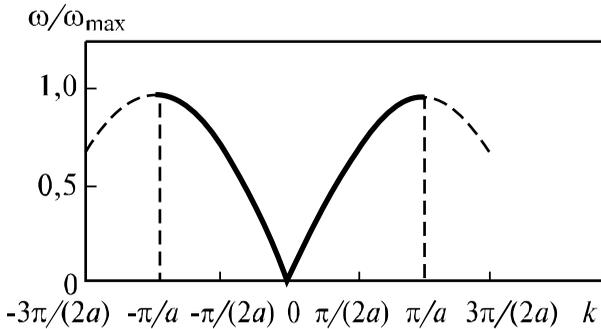


Рис. 1.39. Дисперсионное соотношение для модели линейной одноатомной цепочки

При  $q = +\pi/a$ , или при длине полуволны  $\lambda/2 = a$ , когда соседние атомы движутся в противофазе, групповая скорость  $v_0$ , по (1.19), равна нулю, т.е. волны являются стоячими. Отметим, что для них выполняется условие брэгговского отражения. Диапазон  $q$  от  $-(\pi/a)$  до  $\pi/a$ , который в случае колебаний одномерной цепочки содержит весь спектр колебаний (колебания с  $\lambda/(2a)$  не имеют смысла), соответствует первой зоне Бриллюэна. При  $\omega > \omega_{\max} = 2(C_x/m)^{1/2}$  колебания в одномерном кристалле распространяться не могут (точнее, распространяются с сильным затуханием), т.е. частотный спектр имеет разрешенную и запрещенную зоны. Выше для простоты рассматривались продольные колебания, т.е. смещения были параллельны цепочке; по цепочке могут распространяться также поперечные колебания со смещением, перпендикулярным цепочке, для которых можно повторить все выкладки и получить

аналогичные результаты с той лишь разницей, что другими, не равными  $C_x$ , будут значения коэффициентов  $C_y$  и  $C_z$ , соответствующих смещениям в  $y$ - и  $z$ -направлениях. В результате на дисперсионной зависимости  $\omega = \omega(q)$  появятся еще две ветви (которые в случае  $C_y = C_z$  вырождены, т.е. совпадают).

### *Длинноволновые акустические колебания*

При акустических колебаниях все атомы базиса движутся в одном направлении, а в длинноволновом пределе  $q \rightarrow 0$  амплитуда колебаний слабо меняется от одной элементарной ячейки к другой, т.е. для описания колебаний применимо приближение сплошной среды в терминах теории упругости.

В этом случае уравнения относительно смещения отдельных частиц (при многоатомном базисе – центров тяжести элементарных ячеек с суммарной массой  $M$ )

$$M d^2 x_{ni} / dt^2 = - \sum_{n'i'} \Phi_{ni}^{n'i'} x_{n'i'} \quad (i, i' = 1, 2, 3, \dots)$$

заменяют уравнениями сплошной среды относительно непрерывного (не дискретного) поля смещения:

$$\rho d^2 x_i / dt^2 = \sum_{i'kl} C_{ii'kl} \partial^2 x_{i'} / (\partial r_k \partial r_l), \quad (1.20)$$

где  $\rho$  – плотность среды, а  $C_{ii'kl}$  – тензор упругости (здесь индексами  $i, k, l$  обозначены направления ортов;  $n$  – номер элементарной ячейки; штрихом обозначены параметры соседних с рассматриваемым атомом;  $\Phi_{ni}^{n'i'}$  – константа силы, учитывающая воздействие на атом  $n$ , смещенный в направлении  $i$ , со стороны атома  $n'$ , смещенного в направлении  $i'$ ). Определить направление силы, действующей на смещенный атом, не всегда легко, в частности в случае изотропной среды уравнение (1.20) дает дисперсионные соотношения вида  $\rho \omega_L^2 = (C_{12} + 2C_{44})q^2$ ,  $\rho \omega_T^2 = C_{44}q^2$ , т.е. скорости звука для продольной  $L$  и поперечных  $T$  волн постоянны и равны  $v_L = \sqrt{C_{11}/\rho}$ ,  $v_L = \sqrt{C_{44}/\rho}$ .

### Колебания кристалла разнородных атомов

Аналогично случаю одноатомных кристаллов рассмотрим одномерную модель – модель шаров, соединенных пружинами, но в данном случае чередуются шары с атомами массой  $m$  и  $M$  ( $m < M$ ) (рис. 1.40). Записывая закон Гука и второй закон Ньютона:

$$\begin{aligned} -m\omega^2 \Delta_{2j} &= md^2 \Delta_{2j} / dt^2 = C(\Delta_{2j+1} + \Delta_{2j-1} - 2\Delta_{2j}), \\ -M\omega^2 \Delta_{2j+1} &= Md^2 \Delta_{2j+1} / dt^2 = C(\Delta_{2j+2} + \Delta_{2j} - 2\Delta_{2j+1}), \end{aligned} \quad (1.21)$$

представляя колебания в виде гармонических волн (с различными амплитудами  $A$  и  $B$ ):

$$\begin{aligned} \Delta_{2j} &= A \exp[i(2jq_a - \omega t)], \\ \Delta_{2j+1} &= B \exp[i[(2j+1)aq - \omega t]] \end{aligned}$$

и подставляя (1.20) в (1.21), получают

$$A(2C - m\omega^2) = 2CB \cos(qa), \quad B(2C - M\omega^2) = 2CA \cos(qa). \quad (1.22)$$

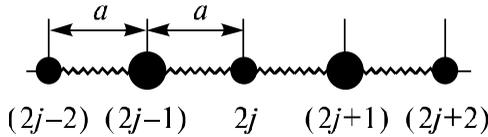


Рис. 1.40. Линейная двухатомная цепочка

Исключив  $A$  и  $B$  из (1.22), получают связь между  $q$  и  $\omega$  (дисперсное соотношение) в виде  $(2C - m\omega^2)(2C - M\omega^2) = 4C^2 \cos^2(qa)$ , откуда

$$\omega^2 = C(1/m + 1/M) + C \left[ (1/m + 1/M)^2 - 4 \sin^2(qa) / (mM) \right]^{1/2}. \quad (1.23)$$

Спектр частот является двузначной функцией  $q$  (рис. 1.41) и разделен на разрешенные и запрещенные зоны. Нижняя ветвь – акустическая – качественно подобна спектру одноатомных кристаллов (см. рис. 1.41), она получается при знаке «-» в (1.23) и связана с тепловыми колебаниями. Из (1.23) следует, что максимальная частота таких колебаний  $\omega_1 = (2C/M)^{1/2}$  явно не зависит от  $m$ , т.е. (рассмотрев отношение амплитуд колебаний  $B/A$ ) из (1.22) можно получить

$$B/A = (2C - m\omega^2) / [2C \cos(qa)] = 2C \cos(qa) / (2C - M\omega^2) \quad (1.24)$$

и при  $q \rightarrow \pi/(2a)$   $B/A \rightarrow \infty$  – при колебаниях легкие атомы неподвижны. В длинноволновом пределе  $q \rightarrow 0$ , частота  $m$  также мала и  $B/A \cong 1$ , т.е. атомы колеблются в фазе, одновременно смещаясь в одном направлении. Верхняя ветвь соответствует знаку «+» и называется *оптической*, поскольку в кристаллах, в которых атомы различных сортов имеют противоположный заряд, такие колебания можно возбудить светом определенной частоты (при любых  $q$  величина  $B/A$

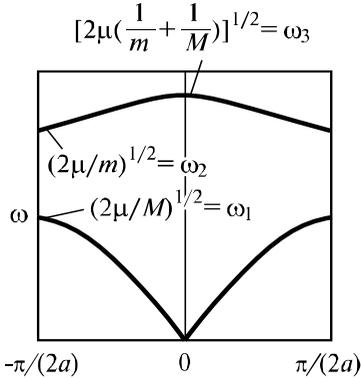


Рис. 1.41. Дисперсионные кривые для продольной волны, распространяющейся в линейной двухатомной решетке

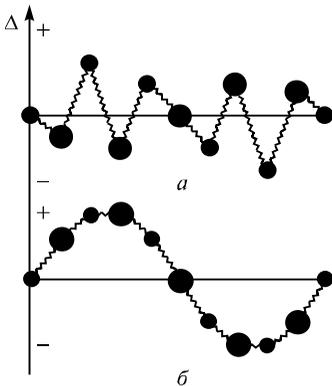


Рис. 1.42. Смещение атомов при распространении поперечной волны вдоль двухатомной линейной цепочки

отрицательна, т.е. соседние атомы колеблются в противоположных направлениях, а именно такое движение возбуждается поперечной электростатической составляющей электромагнитной волны). Для оптических мод с большими длинами волн  $q \rightarrow 0$  угловая частота

$$\omega_{\min} = [2C(1/m + 1/M)]^{1/2},$$

фазовая скорость стремится к бесконечности, групповая – к нулю, а в согласии с (1.24)  $B/A = -m/M$ , т.е. такие моды соответствуют одновременным колебаниям атомов массой  $m$  и  $M$  в противофазе при неподвижном центре масс пары атомов.

При оптических колебаниях с максимально возможным волновым числом  $q = \pm\pi/(2a)$ , когда  $\lambda$  минимальна, а  $m$  убывает и стремится к пределу  $\omega = \omega_2 = (2C/M)^{1/2}$ , величина  $B/A$  стремится к нулю, т.е. тяжелые атомы неподвижны. Групповая скорость  $d\omega/dq$  также стремится к нулю, т.е. волны являются стоячими и испытывают брэгговское отражение.

Различия между смещениями атомов в акустических и оптических колебаниях становятся яснее, если изобразить поперечные смещения (рис. 1.42). Переход от двух- к одноатомному базису при  $m \rightarrow M$  иллюстрируется рис. 1.43.

Для реальных решеток наиболее простой является подобная рассмотр-

ренным ранее модель, в которой ионы представляются материальными точками, связанными «пружинами» (рис.1.44).

Получающиеся на ее основе дисперсионные зависимости, точнее некоторые сечения соответствующих этим зависимостям поверхностей, показаны на рис. 1.45 (для их получения следует аналогично записать уравнения закона Гука для каждой связи и второго закона Ньютона для каждого атома и искать решение в виде волны).

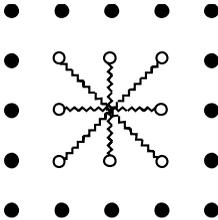


Рис. 1.44. Неоднородная модель колебаний кристалла

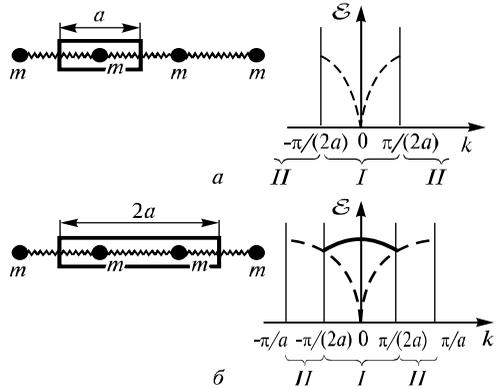


Рис. 1.43. Дисперсионная зависимость для monoатомной линейной цепочки, приведенная к первой зоне Бриллюэна для случаев: *a* – период решетки равен *a* (элементарная ячейка состоит из одного атома); *б* – период решетки равен *2a*

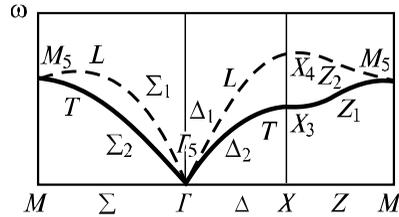


Рис. 1.45. Дисперсионные зависимости для случая, приведенного на рис. 1.44

Анализ трехмерных моделей приводит к качественно подобным результатам, которые могут совпадать с экспериментом; примеры дисперсионных зависимостей  $\omega(g)$  для реальных веществ представлены на рис. 1.46.

Причины различий заключаются в следующем:

модель с пружинами вместо связей, строго говоря, верна только для центральных сил межатомного взаимодействия и неверна, например, для ковалентных кристаллов;

некоторую роль может играть поляризация ионов, появляющаяся при деформации электронной оболочки иона; силы связи действуют не только между ближайшими соседями, в принципе, надо учитывать взаимодействие с достаточно удаленными атомами, например в ковалентных кристаллах смещение только одного атома в решетке приводит к повороту соседних электронных оболочек с почти неизменными углами между связями

(изгибу связей), так что и без изменения положения далеких атомов на них действуют силы (рис. 1.47).

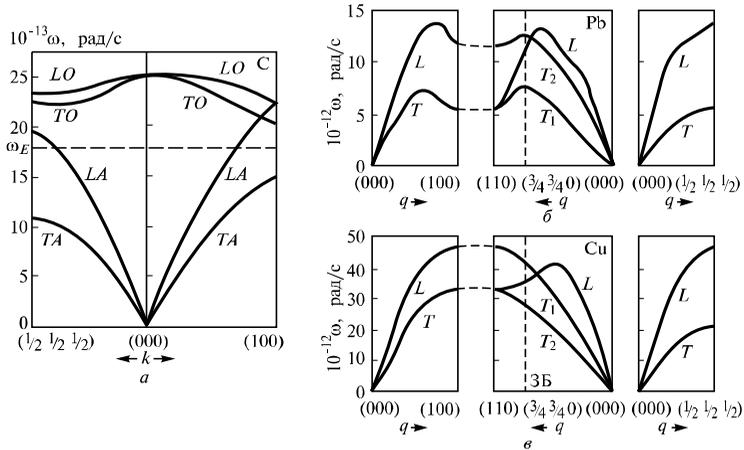


Рис. 1.46. Дисперсионные зависимости  $\omega(\mathbf{k})$ :  
*a* – для алмаза; *б* – для свинца; *в* – для меди

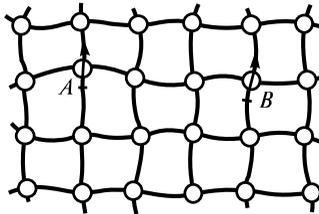


Рис. 1.47. Искажения ковалентной решетки при смещении атома *A* (атом *B* повернут)

### 1.2.2. Квазичастицы в твердом теле

Анализ электронных свойств твердых тел и тепловых колебаний атомов решетки приводит к понятию о квазичастицах – квазисвободных электронах, дырках и фононах; ниже такой подход распространен на ряд других коллективных взаимодействий при введении ряда квазичастиц (плазмоны, поляроны, поляритоны, магноны и др.), что позволяет представить квантово-механические процессы передачи различных возбуждений в твердых телах в терминах инерциального движения и парных или трехчастичных соударений.

## *Концепция квазичастиц*

Система многих частиц, частным случаем которой является кристаллическая решетка, подвергается непрерывному возмущающему действию внешних сил, являющихся проявлением взаимодействия решетки с окружающей средой. Слабовозбужденное состояние кристалла может быть разложено на элементарные возбуждения, распространяющиеся вдоль решетки, причем свойства их подобны свойствам частиц, т.е. им можно приписать энергию и импульс, а изменение возбужденного состояния кристалла описывают как результат столкновения квазичастиц и изменения при этом их параметров (энергии, импульса, спинового момента).

Введение каждой квазичастицы (табл. 1.5) приводит к исключению из рассмотрения какого-либо механизма коллективного взаимодействия; так, введение квазисвободных электронов исключает взаимодействие между электронами и периодическим потенциалом, введение фононов – между колебаниями соседних атомов. При этом характеристики исключенного взаимодействия учитываются в свойствах квазичастиц (в дисперсионных зависимостях  $E = E(\mathbf{k})$ ). Термин «квазичастица» подчеркивает отличие ее от обычных частиц, так как квазичастицы – результат взаимодействия большого числа реальных частиц, и в отсутствие этого взаимодействия они либо не существуют (фононы, магноны), либо превращаются в обычные частицы (например, электроны). У квазичастиц твердого тела импульс может быть определен с точностью до величины, пропорциональной вектору обратной решетки, поэтому для описания их поведения пользуются понятием квазиимпульса.

### *Фононы и их свойства. Равновесный спектр*

Понятие о фононах – квазичастицах, описывающих распространение колебаний решетки, – позволяет представить сложные нелинейные взаимодействия различных мод колебаний решетки в терминах инерциального движения и парных столкновений фононов.

Рассмотрим статистические свойства фононного газа (плотность состояний, функция распределения), введем понятие температуры Дебая, что необходимо для описания тепловых, транспортных и оптических свойств твердых тел.

Таблица 1.5

## Основные квазичастицы твердого тела

Квазичастица	Соответствующая элементарная частица	Учитываемое взаимодействие	Функция распределения
Квазисвободный электрон, дырка	Электрон	Кулоновское взаимодействие электрона с ионами решетки	Ферми – Дирака
Фонон		Взаимодействие тепловых колебаний соседних атомов решетки	Бозе – Энштейна
Экранированный квазисвободный электрон	Электрон	Кулоновское взаимодействие электрона с электронами	Ферми-Диракам
Плазмон	–	Взаимодействие колеблющихся электронов твердого тела	Бозе – Энштейна
Полярон	Электрон	Кулоновское притяжение электроном положительных ионов и отталкивание отрицательных при движении по ионному кристаллу	Бозе – Энштейна
Экситон	–	Кулоновское притяжение электронов и дырок	Бозе – Энштейна
Поляритон	Фонон	Взаимодействие переменного электрического поля с ионами при движении по ионному кристаллу	Бозе – Энштейна
Магنون	–	Взаимодействие ориентаций магнитных моментов соседних атомов	Бозе – Энштейна
Куперовская пара	Два электрона	Притяжение двух электронов за счет обмена виртуальными фононами	Бозе – Энштейна

## ФОНЫ

Как уже указывалось, в кристалле возможны коллективные возбуждения совокупности атомов, представляющие собой  $3N$  различных нормальных колебаний, подчиняющихся соответствующему распределению по частотному спектру. Каждое колебание, распространяющееся в кристалле, обладает энергией и импульсом, поэтому по аналогии с квантованием электромагнитных колебаний введено понятие о квантовых тепловых колебаниях решетки – фононах. Колебательные процессы в кристалле представляют в виде движения фононов, число которых зависит от частоты колебаний.

Можно показать, что энергия нормального колебания в кристалле с частотой  $\omega$  квантована и по аналогии с энергией линейного гармонического осциллятора в квантовой механике подчиняется закону  $E_\omega = (n_\omega + 1/2)\hbar\omega$ , где  $n_\omega = 0, 1, 2, 3, \dots$ ;  $\hbar\omega$  – минимальная порция, квант энергии колебаний (фонон). Таким образом, каждое нормальное колебание содержит  $n_m$  фононов с энергией  $\hbar\omega$ . Слагаемое  $1/2$  учитывает наличие так называемых нулевых колебаний решетки, существующих при температурах вплоть до 0 К и обычно не учитываемых при исследовании тепловых свойств кристалла.

Фононы являются определенной абстракцией при описании колебательных процессов в кристалле, когда реальные колебания представляют в виде потока квазичастиц. Скорость фононов равна скорости распространения колебания, импульс равен  $\hbar\mathbf{q}$ , среднее время жизни порядка  $10^{-12}$  с, распределение по энергиям определяется статистикой Бозе – Эйнштейна.

Введение корпускулярного понятия «фонон» позволяет упростить рассмотрение многих физических процессов. Рассеяние электронов тепловыми колебаниями решетки описывается как столкновение электронов с фононами. При этом выполняются законы сохранения энергии и импульса. Взаимодействие различных колебаний в решетке может быть представлено как рассеяние фононов друг на друге. Одно колебание вызывает изменение упругих свойств среды при смещении атомов, что сказывается на втором колебании. Расчет показывает, что взаимодействие двух волн с частотами  $\omega_1$  и  $\omega_2$  волновыми векторами  $\mathbf{q}_1$  и  $\mathbf{q}_2$  может быть описано как столкновение двух фононов с появлением третьего фонона,

имеющего частоту  $\omega_3$  и импульс  $\hbar\mathbf{q}_3$ , причем  $\omega_3 = \omega_1 + \omega_2$ ,  $\mathbf{q}_3 = \mathbf{q}_1 + \mathbf{q}_2$ .

Многие закономерности динамики решетки становятся весьма наглядными, если представить элементарные колебания как воображаемые квазичастицы – фононы, обладающие определенной энергией (около 0,01 эВ), импульсом (примерно  $\hbar\pi/2a$ ) (точнее, квазиимпульсом), временем жизни ( $\tau = 10$  с). Смысл введения понятия фонона заключается в возможности представления процессов с участием колебаний решетки (транспортные свойства, неупругие взаимодействия электронов, фотонов, атомарных частиц с кристаллом) в терминах движения, возникновения, уничтожения, рассеяния квазичастиц, так что становятся применимы основные понятия из кинетической теории. Рассмотрение колебаний с позиций квантовой механики указывает на квантованность, дискретность возможных значений амплитуд колебаний с энергией  $\hbar\omega$ . Минимально возможная энергия данной моды колебаний равна не нулю, а  $\hbar\omega/2$ , т.е. существует нулевая энергия колебаний (как у электрона в потенциальной яме), суммарная энергия данной моды колебаний составляет  $E = \hbar\omega(n + 1/2)$ . Эта энергия переносится по кристаллу с волновой групповой скоростью  $\partial\omega/\partial\mathbf{q}$ . Переходя к корпускулярному описанию, получаем  $n$  фононов, движущихся со скоростью  $v = \partial\omega/\partial\mathbf{q} = \nabla_{\mathbf{q}}\omega$ , имеющих энергию  $\hbar\omega$  каждый (слагаемым  $1/2$  часто можно пренебречь). Фононы подчиняются статистике Бозе – Эйнштейна, т.е. являются бозонами, подобно фотонам – квантам электромагнитных колебаний. Как и фотоны, фононы имеют спин, равный нулю, число их не сохраняется при взаимодействиях.

При применявшейся выше гармонической аппроксимации (т.е. применимости закона Гука – пропорциональности упругой силы и смещения  $\Delta$ ) колебания полностью независимы друг от друга – фононный газ состоит из невзаимодействующих фононов. Однако, если учесть отличие кривой, описывающей потенциал взаимодействующих атомов, от параболы, особенно заметное при больших амплитудах колебаний, то получим взаимодействие двух колебаний; вместо них может возникать третье, с частотой

$$\omega_3 = \omega_1 + \omega_2$$

и волновым вектором (при условии, что  $\mathbf{q}_1 + \mathbf{q}_2$  не выходит за границы зоны Бриллюэна)

$$\mathbf{q}_3 = \mathbf{q}_1 + \mathbf{q}_2.$$

В терминологии описания столкновений частиц это соответствует сохранению их суммарной энергии

$$\hbar\omega_3 = \hbar\omega_1 + \hbar\omega_2 \quad (1.25)$$

и квазиимпульса

$$\hbar\mathbf{q}_3 = \hbar\mathbf{q}_1 + \hbar\mathbf{q}_2. \quad (1.26)$$

Понятие «квазиимпульс» отражает отличие  $\hbar\mathbf{q}$  от импульса: например, колебания с волновым вектором  $\mathbf{q}$  описывают на границе зоны Бриллюэна стоячие волны, когда никакого импульса не передается.

#### *Процессы переброса Пайерлса*

Фонон-фононные взаимодействия, описываемые формулами (1.25), (1.26), называют *нормальными* ( $N$ -процессы), они имеют место всегда, когда три вектора  $\mathbf{q}_1$ ,  $\mathbf{q}_2$ ,  $\mathbf{q}_3$  лежат в пределах зоны Бриллюэна. Качественное изменение ситуации происходит в случае, когда  $\mathbf{q}_3$  выходит за ее пределы (процессы переброса или  $U$ -процессы). Зона Бриллюэна, будучи элементарной ячейкой обратной решетки, может быть повторена так, что покроеет все  $\mathbf{q}$ -пространство (представление повторяющихся зон). При  $U$ -процессах вектор  $\mathbf{q}_3$ , с необходимостью попадает в точку другой зоны Бриллюэна, которая имеет полностью эквивалентную точку  $\mathbf{q}_3^*$ , и в первой зоне (согласно трансляционной симметрии обратной решетки) положение этой точки  $\mathbf{q}_3^*$  отстоит от  $\mathbf{q}_3$  на вектор трансляции  $\mathbf{G}$ :

$$\mathbf{q}_3^* = \mathbf{q}_3 + \mathbf{G}.$$

При взаимодействии высокоэнергетичных фононов  $\mathbf{q}_1$  и  $\mathbf{q}_2$  образуется фонон с квазиимпульсом

$$\mathbf{q}_3^* = \mathbf{q}_1 + \mathbf{q}_2 + \mathbf{G},$$

т.е. квазиимпульс не сохраняется из-за «переброса» фонона с  $\mathbf{q}_3$  на вектор трансляции  $\mathbf{G}$ . В результате при взаимодействии двух фононов, движущихся, например, вправо, образуется третий, направленный влево (рис. 1.48).

Отсюда следует, что процессы переброса могут иметь место при многофононных процессах (когда уничтожается  $n$  фононов, а порождается  $n'$  фононов), а также при всех других типах многочастичного взаимодействия

(электрон-фононного, нейтрон-фононного – при торможении нейтрона и т.п.), когда один фонон при сохранении квазиимпульса получит значение  $\mathbf{q}$ , выходящее за пределы первой зоны Бриллюэна. При  $U$ -процессах избыточный импульс  $\hbar\mathbf{G}$  передается кристаллу как целому, закон сохранения импульса выполняется. Процессы переброса можно представить себе как рождение (или уничтожение) фонона с одновременным брэгговским отражением, при котором «избыточный» импульс  $\hbar\mathbf{G}$  передается сразу многим атомам решетки.

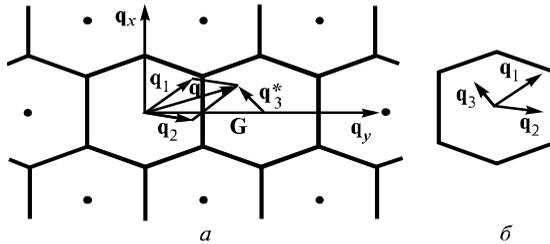


Рис. 1.48. Процесс переброса при фонон-фононном взаимодействии:  $a$  – в представлении повторяющихся зон;  $b$  – после приведения к первой зоне Бриллюэна

Процессы фонон-фононного взаимодействия связаны с ангармонизмом колебаний, т.е. с отличиями формы трехмерной потенциальной ямы для иона от соответствующей закону Гука (в которой потенциал пропорционален квадрату смещения). В анизотропном кристалле параметры фонон-фононного рассеяния носят тензорный характер и определяются фурье-образом тензора ангармонического члена в потенциале иона (ангармонический член характеризует отличие потенциальной ямы от соответствующей закону Гука и является тензорной величиной, так как в разных направлениях это отличие может быть различным). При заданных параметрах двух уничтожающихся и одного рождающегося фононов частота рассеяний пропорциональна числу фононов, при трех уничтожающихся – квадрату числа фононов и т.д.

Зависимость  $E$  от  $\mathbf{q}$  для фононов, подобно дисперсионной зависимости для электронов в кристаллах, определяет многие свойства фононов. Как и в случае электронов, она периодична в  $\mathbf{q}$ -пространстве, и достаточно ограничиться первой зоной Бриллюэна, форма которой совпадает с ячейкой Вигнера – Зейтца в обратном пространстве. Зависимость  $E = E(\mathbf{q})$  также неоднозначна и состоит из ряда ветвей. Число ветвей равно  $3r$  (где  $r$  – число атомов в базисе), каждая из которых задает однозначную функциональную зависимость  $\omega = \omega(\mathbf{q})$ . Поскольку при любом заданном (квазидискретном) значении  $\mathbf{q}$  существует несколько состояний фононов, соответствующих разным ветвям, они имеют разные частоты  $\omega$  и разные константы взаимодействия с другими колебаниями. Поэтому в зависимости от характеристик ветви колебания при таких значениях  $\mathbf{q}$ , когда колебания –

чисто продольные или чисто поперечные, различают продольные (*L*, *Longitudinal*) и поперечные (*T*, *Transversal*), а также акустические (*A*) и оптические (*O*) фононы, т.е. *TA*-, *TO*-, *LA*-, *LO*-фононы.

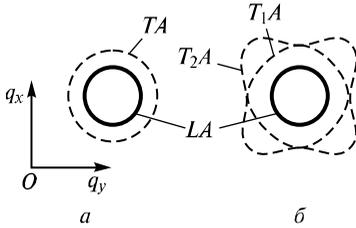


Рис. 1.49. Сечение поверхностей постоянной частоты: *a* – для изотропной среды; *б* – для кристалла

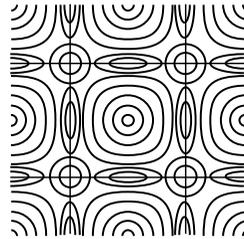


Рис. 1.50. Поверхности постоянной частоты в двумерной квадратной решетке в представлении повторяющихся зон Бриллюэна

Число мод оптических фононов равно  $3(r - 1)$ , оно может быть весьма большим в кристаллах с многоатомным базисом, например органических кристаллах (где имеется много мод внутримолекулярных колебаний). В изотропной среде групповые скорости (скорости фононов) не зависят от направления, так что поверхности равной частоты в *q*-пространстве имеют сферический вид; поскольку продольные колебания имеют большую скорость звука, сферы для продольных фононов при той же энергии больше, чем для поперечных (рис. 1.49, а). В кристалле упругие свойства обычно оказываются анизотропными, и потому форма поверхности постоянной частоты может значительно отличаться от сферической, причем поперечные фононы с различными поляризациями имеют разные изоэнергетические поверхности (кроме некоторых направлений высокой симметрии), рис. 1.49, б. К границам зон Бриллюэна изоэнергетические поверхности (определенные для каждой ветви колебаний отдельно) подходят под прямым углом, причем искажение за счет брэгговского отражения сфер, соответствующих свободным фононам, происходит аналогично искажению электронных изоэнергетических поверхностей (рис. 1.50):

$$\partial N_p / \partial E = f_{BE} \partial \zeta_{ph} / \partial (\hbar\omega) = g(\omega) \left\{ \exp[\hbar\omega / (k_B T)] - 1 \right\} / \hbar,$$

где  $f_{BE}$  – функция распределения Бозе – Эйнштейна;  $\partial \zeta_{ph} / \partial (\hbar\omega) = g(\omega)$  – плотность состояний фононов.

#### Плотность состояний

В решетке конечного размера число различающихся мод колебаний (число различающихся фононов) ограничено. Чтобы понять закономерность распределения этих мод по частотам (или волновым векторам *q*),

вновь рассмотрим линейную цепочку  $N + 1$  атомов длиной  $Na$ . На этой цепочке могут возбудиться только такие колебания (продольные или поперечные), для которых на  $Na$  уложится  $1, 2, 3, \dots, N$  полуволн. Соответствующие волновые числа  $q = \pi/(Na), 2\pi/(Na), \dots, \pi/a$  разделены одинаковыми интервалами  $\Delta q = \pi/(Na) = 2\pi/4$ , которые при  $N \rightarrow \infty$  стремятся к нулю. Число состояний в области от  $\mathbf{q}$  до  $\mathbf{q} + d\mathbf{q}$  равно  $(Na/\pi)/d\mathbf{q}$ , а на единицу длины одномерного кристалла в интервале  $d\mathbf{q}$  распределение  $g(\mathbf{q})$  плотности состояний по модулю  $|\mathbf{q}|$  имеет вид

$$\begin{aligned} (d\zeta/d|\mathbf{q}|)d|\mathbf{q}| &= g(|\mathbf{q}|)d|\mathbf{q}| = 2Ld|\mathbf{q}|/(2\pi L) = d|\mathbf{q}|/\pi, \\ |\mathbf{q}| < \pi/a; g(|\mathbf{q}|)d|\mathbf{q}| &= \Phi, |\mathbf{q}| > \pi/a. \end{aligned}$$

Плотность состояний (на единицу длины и единичный интервал  $|\mathbf{q}|$ ) равномерно распределена по отрезку  $0 < |\mathbf{q}| < \pi/a$ . Аналогичная ситуация имеет место в трехмерном случае: состояния расположены равномерно по зоне Бриллюэна в  $\mathbf{q}$ -пространстве, причем каждому состоянию соответствует объем куба с ребром  $\Delta\mathbf{q} = \pi/(Na) = 2\pi/4$ .

Распределение по частотам

$$g(\omega) = \partial\zeta/\partial\omega = (\partial\zeta/\partial\mathbf{q})/(\partial\omega/\partial\mathbf{q}) = \left[ \mathbf{q}^2 / (2\pi^2) \right] / (\partial\omega/\partial\mathbf{q}), \quad (1.27)$$

т.е. плотность состояний полностью определяется дисперсионными зависимостями  $\omega = \omega(\mathbf{q})$ .

Для зависимости  $\omega$  от  $\mathbf{q}$  в соответствии с (1.18), (1.19)

$$\begin{aligned} \partial\omega/\partial\mathbf{q} &= a\omega_{\max} \cos(qa/2)/2 = (1/2)a\omega_{\max} \sqrt{1 - \sin^2(qa/2)} = \\ &= (1/2)a\omega_{\max} \sqrt{1 - (\omega/\omega_{\max}^2)}. \end{aligned} \quad (1.28)$$

Подставляя (1.28) в (1.27), получают

$$\partial\zeta/\partial\omega = g(\omega) = 2 \arcsin^2 \left( \omega/\omega_{\max}^2 \right) / \left[ \left( \pi^2 a^2 v_0 \sqrt{1 - (\omega/\omega_{\max}^2)} \right) \right]. \quad (1.29)$$

При  $\omega/\omega_{\max} < 1$  значение  $g(\omega)$  пропорционально  $\omega^2$ . До сих пор учитывалась только одна ветвь колебаний, однако даже в одноатомных кристаллах имеется одна ветвь продольных и две ветви поперечных колебаний. Соответствующие разным ветвям плотности состояний должны быть сложены. Такое описание плотности состояния известно как *модель Дебая*.

Окончательно для малых частот  $\omega/\omega_{\max}$  из (1.29) в пренебрежении отличиями скоростей продольных и поперечных колебаний  $v_L = v_T = v_T = v_0$  в модели Дебая получают

$$\partial \zeta / \partial \omega = g(\omega) = 3\omega^2 / (2\pi^2 v_0^3). \quad (1.30)$$

Зависимости  $g(\omega)$  в реальных кристаллах заметно отличаются от закона (1.30): они являются суммой вкладов от целого ряда ветвей колебаний, если достаточно мала ширина частотного интервала, где ветвь дает вклад в  $g(\omega)$ , т.е. колебательная ветвь почти горизонтальна (например, оптическая). В этом случае можно пренебречь разницей в частоте и считать вклад данной полосы дельта-функцией частоты при  $\omega = \omega_E$  (рис. 1.51). Такое простейшее приближение называют *моделью Эйнштейна*. При частотах, где  $\partial E / \partial \omega = 0$ , на функции  $g = g(\omega)$  имеются резкие перегибы (*особенности Ван Хова*), там велик знаменатель в (1.26), или, другими словами, малому интервалу  $m$  соответствуют большие объемы  $q$ -пространства.

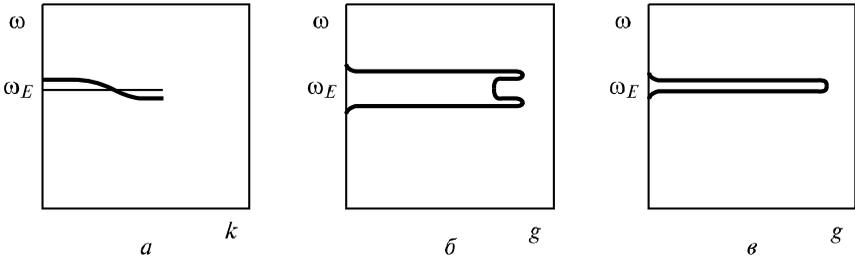


Рис. 1.51. Дисперсионное соотношение для оптической ветви колебаний (а), соответствующая плотность состояний (б) и модель Эйнштейна (в)

Суммарное число состояний на единицу объема в каждой полосе, соответствующей одной ветви колебаний, известно и равно  $N$  (где  $N$  – число элементарных ячеек на единицу объема в кристалле), т.е. плотность состояний в полосе нормирована:

$$\int_0^{\infty} g(\omega) d\omega = N.$$

Если полоса расположена между  $\omega_{\min}$  и  $\omega_m$ , то эти величины можно взять за пределы интегрирования. В частности, в модели Дебая, где суммируются три полосы колебательного спектра, можно найти верхний предел  $m_D$ :

$$\int_0^{\omega_D} g(\omega) d\omega = \int_0^{\omega_D} 3\omega^3 d\omega / (2\pi^2 v_0^3) = 3N,$$

откуда 
$$\omega_D = v_0 (6\pi^2 N)^{1/3}.$$

Характерную максимальную энергию фононов  $\hbar\omega_D$  – подгоночный параметр модели Дебая – можно выразить через температурные единицы, что дает *температуру Дебая*

$$\theta_D = \hbar\omega_D/k_B,$$

(сфера радиусом  $q_D$  занимает в  $\mathbf{q}$ -пространстве тот же объем, что и зона Бриллюэна). Фононы с волновым числом  $\mathbf{q} \approx \mathbf{q}_D$ , частотой  $\omega \approx \omega_D$ , энергией  $E \approx k_B\theta_D$  находятся вблизи границ зоны Бриллюэна.

Учитывая связь плотности состояний по модели Дебая с распределением фононов по энергиям и свойства функции Бозе – Эйнштейна  $f_{BE}$ , легко заключить, что при  $T < \theta_D$  таких приграничных фононов практически не будет (высокоэнергетическая часть спектра будет «зарезана» экспоненциальным фактором в  $f_{BE}$  в области  $\hbar\omega < k_B T$ ):

$$\partial N/\partial E = \partial N/\partial(\hbar\omega) = 3\omega k_B T / (2\pi^2 \hbar^2 v_0^3); \quad (1.31)$$

спектр имеет максимум при  $\omega \cong k_B T/\hbar$ , т.е. при росте температуры сдвигается в высокоэнергетическую область. При  $T \geq \theta_D$  условие  $\hbar\omega < k_B T$  выполняется почти для всех фононов, т.е. распределение почти до  $\omega = \omega_m$  соответствует (1.31), максимум  $\partial N/\partial E$  находится на  $\omega = \omega_m$ , а форма спектра фононов не зависит от температуры – при неизменном распределении  $N_{ph}$  по энергиям пропорционально температуре увеличивается число фононов. При этом большинство фононов имеют волновые векторы вблизи границ зоны Бриллюэна  $q \approx q_D$ , а при  $T \ll \theta_D$  таких высокоэнергетических фононов нет, и волновые векторы  $q, q_D$  лежат у середины зоны Бриллюэна. Поскольку фононы с  $q \cong q_D$  и  $q < q_D$  по-разному взаимодействуют друг с другом и с электронами, процессы переноса (теплопроводность, электропроводность и др.) различны при  $T \ll \theta_D$  и  $T > \theta_D$ .

При  $T \geq \theta_D$  у большей части фононов длина волны составляет порядка нескольких межатомных расстояний, а при  $T \ll \theta_D$  длины волн фононов могут быть гораздо больше и по порядку величины равны  $a\theta_D/T$ .

Несмотря на то, что в модели Дебая используется довольно грубое упрощение спектра (рис. 1.52), а  $\theta_D$  является подгоночным параметром, эту величину часто используют для характеристики степени заполнения фононами спектра состояний. Для уточнения иногда полагают  $\theta_D$  зависящей

от  $T$  (рис. 1.53). Хорошее приближение дает также сочетание модели Дебая для акустических фононов и модели Эйнштейна – для оптических.

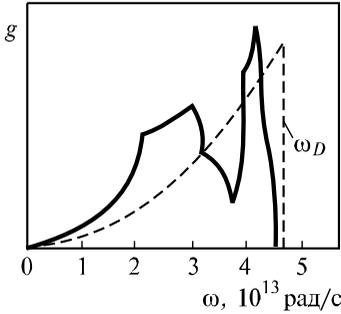


Рис. 1.52. Плотность состояний фононов в меди (сплошная кривая – эксперимент, штриховая – модель Дебая)

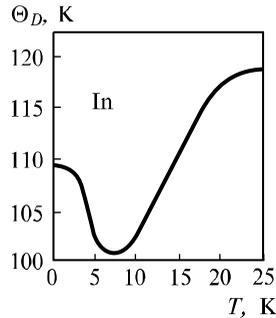


Рис. 1.53. Зависимость  $\Theta_D(T)$  для индия (определена по теплоемкости)

### Плазмоны и экранированные электроны

Вследствие кулоновского отталкивания средняя плотность электронного заряда около данного электрона понижена, т.е. вокруг электрона образуется область распределенного некомпенсированного положительного заряда. Это приводит к ослаблению, экранированию дальнедействующей составляющей кулоновского поля точечного заряда.

В результате коллективно взаимодействующий электронный газ можно представить как газ слабо взаимодействующих друг с другом, но экранированных зарядов и газ слабо взаимодействующих друг с другом плазмонов. Плазмоны являются бозе-частицами, энергия плазмона  $\hbar\omega_{pl}$  определяется плазменной частотой колебаний

$$\omega_{pl} = \left[ e^2 N_e / (m_e \epsilon_0) \right]^{1/2}, \quad (1.32)$$

а импульс  $\mathbf{p} = \hbar\mathbf{k}$  – волновым вектором  $\mathbf{k}$ .

Экранирование соответствует исключению из фурье-разложения кулоновского потенциала длинноволновых мод  $\mathbf{k} < \mathbf{k}_c$ ; экранированный потенциал имеет вид

$$U_{\text{экр}} \approx e^2 \exp(-\mathbf{k}_c \mathbf{r}) / (4\pi\epsilon_0 |\mathbf{r}|) \quad (1.33)$$

(рис. 1.54). Поэтому каждый экранированный электрон «не чувствует» поля частиц, удаленных более чем на  $k_c^{-1}$ .

Длинноволновые моды колебаний потенциала с  $k < k_c$  относятся к динамическим колебаниям электронного газа – плазменным колебаниям, которым соответствуют плазмоны. Значение  $k_c$  для вырожденного газа оценивают как  $k_c \cong \omega_{pl} / v_F$ . Концентрация квазисвободных электронов  $N_e$  в металлах достигает  $10^{23} \text{ см}^{-3}$ , и  $\omega_{pl}$ , согласно (1.32), составляет 10...30 эВ (табл. 1.6).

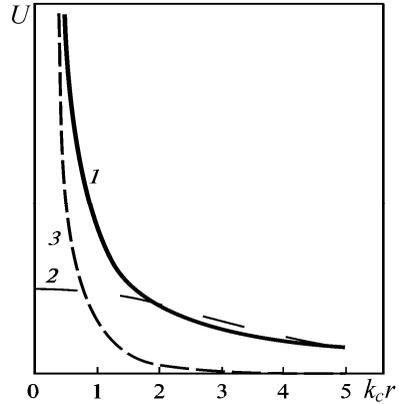


Рис. 1.54. Кулоновский потенциал (1), его длинноволновая ( $k < k_c$ ) составляющая (2), экранированный потенциал (3)

В неметаллах также возможны колебания с участием всех валентных электронов (так, для C, Si, Ge – по четыре на атом).

Из-за квантованности плазмоны не могут возбуждаться при нагреве (когда характерные порции энергии теплового возбуждения слишком малы). Возбуждение плазмонов происходит, например, при движении по кристаллу высокоэнергетичных ( $E \geq 10...20 \text{ эВ}$ ) электронов, при этом последние теряют порции энергии  $\hbar\omega_{pl}$ ,  $2\hbar\omega_{pl}$  и т.п. В отсутствие таких источников возбуждения плазмоны не появляются, однако при этом вместо квазисвободных электронов с кулоновским взаимодействием следует рассматривать электроны с экранированным потенциалом – см. (1.4).

Таблица 1.6

### Энергия плазмонов

Элемент	Be	B	C	Si	Ge	Al	Mg	Cu	Ag	ZnS	MgO
$\hbar\omega_{pl}$ , эВ	19	19	22	17	16	15	10	20	23	17	25

В собственных полупроводниках возможны также низкочастотные плазменные колебания с  $N_e$ , соответствующей концентрации

электронов проводимости, которая гораздо меньше атомной; энергия таких плазмонов составляет порядка 0,01 эВ (инфракрасный диапазон волн). Плазменную частоту в этом случае определяют с учетом диэлектрической проницаемости  $\epsilon$ :

$$\omega_{pl} = \left[ e^2 N_e / (m^* \epsilon \epsilon_0) \right]^{1/2}.$$

Анизотропия решетки сказывается на свойствах плазмонов (см. рис. 1.54).

### Поляроны

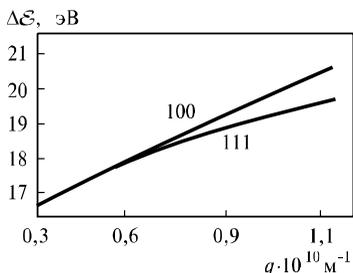


Рис. 1.55. Закон дисперсии плазмона в Si в двух направлениях

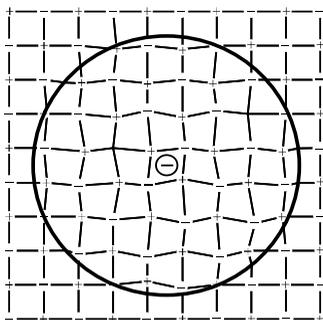


Рис. 1.56. Большой полярон

При движении квазисвободного электрона в ионном кристалле электроны притягивают положительные ионы и отталкивают отрицательные ионы, т.е. вместе с ним по решетке движется область поляризации (рис. 1.55), изменяющая динамику электронов и дырок. Деформация решетки приводит к образованию потенциальной ямы, удерживающей электрон (дырку) в области локальной поляризации; следовательно, энергия такой системы квантована, а энергетические уровни находятся в запрещенной зоне ниже дна зоны проводимости. Движущийся заряд вместе с перемещающейся областью поляризации представляет собой квазичастицу – полярон. Особенностью полярона является большая эффективная масса (в сотни раз большая массы электрона), а следовательно, малая подвижность.

Поскольку энергия полярона меньше энергии свободного электрона в среде, где отсутствует поляризация, в ряде веществ, например в оксидах переходных металлов и полупроводниках с узкой зоной проводимости, электроны проводимости находятся именно в поляронном состоянии. Поляроны, созданные электроном и дыркой, могут объединяться в систему из двух связанных поляронов – «поляронный» экситон. Поскольку искажение (деформация) решетки связано с движением фононов, считают, что электрон окружен облаком виртуальных оптических фононов, которые вместе с электроном образуют квазичастицу – полярон.

Эта квазичастица характеризуется импульсом  $\hbar\mathbf{k}$ . Дисперсионное соотношение для большого полярона (т.е. с размером поляризованного облака существенно большим, чем порядок решетки) в приближении непрерывной среды при малых  $k$  имеет вид

$$E(k) = -\alpha\hbar\omega_L + \hbar^2 k^2 / 2m_{pol}, \quad (1.34)$$

где  $\omega_L$  – частота продольных оптических колебаний при  $k = 0$ ;  $m_{pol}$  – масса полярона; постоянная  $\alpha$ , равная удвоенному среднему числу виртуальных фононов, имеет вид

$$\alpha = \frac{c^2}{8\pi\epsilon_0\hbar\omega_L} \sqrt{\frac{2m^*\omega_L}{\hbar}} \left( \frac{1}{\epsilon(\infty)} - \frac{1}{\epsilon(0)} \right),$$

где  $\epsilon(0)$ ,  $\epsilon(\infty)$  – диэлектрическая проницаемость кристалла при низко- и высокочастотном пределах;  $m^*$  – эффективная масса. Размер полярона при  $\alpha < 1$   $r_p = \sqrt{\hbar / 2m_{pol}\omega_L}$  составляет (10...100)  $\text{\AA}$ .

При  $\alpha > 1$  формула (1.34) неприменима и  $m_{pol} = m^* (1 + \alpha/6)$ , а радиус  $r_p$  уменьшается пропорционально  $1/\alpha$ . При  $\alpha \gg 1$  полярон мал, т.е.  $r_p \geq \alpha$ , и  $m_{pol} \gg m^*$ . Электрон в малом поляроне создает себе в результате поляризации потенциальную яму глубиной

$$E' = \alpha^2 \hbar\omega_L / 4.$$

### Экситоны

Под экситоном понимают электрически нейтральное элементарное возбуждение в кристалле, обусловленное появлением пары связанных друг с другом электрона и дырки. Если энергия возбуждения электрона валентной зоны меньше ширины запрещенной зоны, то он не сможет перейти в зону проводимости, однако электрон способен удалиться от атома, оставаясь связанным силами притяжения с образовавшейся дыркой. Связанная пара электрон-дырка может перемещаться вдоль кристалла, но, будучи электрически нейтральной, не создает тока. В то же время такая пара, как и любая квазичастица, обладает энергией и квазиимпульсом. Движение экситонов вызывает перенос энергии в решетке.

Энергия экситона квантована и характеризуется набором дискретных квантовых чисел, энергетические уровни располагаются в запрещенной зоне, причем они не являются локальными, поскольку экситонное состояние соответствует возбуждению всего кристалла. Увеличение энергии экситона сопровождается переходом на более высокие энергетические уровни, и при достаточной энергии электронно-дырочная пара разрывается с образованием свободных электрона в зоне проводимости и дырки в валентной зоне.

При образовании экситонного состояния существенную роль играет величина энергии связи между электроном и дыркой. Выделяют две различные модели, соответствующие предельным случаям. Экситон характеризуется волновым вектором  $\mathbf{k}$ , соответствующим движению экситона как целого, и расстоянием между электроном и дыркой  $\beta$ ; экситоны подчиняются статистике Бозе – Эйнштейна, образуя бозе-конденсат, экситонные молекулы, электрон-дырочные капли.

Экситон с удаленными друг от друга частицами  $\beta \gg a$  – *экситон Ваннье* – рассматривается как два заряда, находящихся в среде с диэлектрической проницаемостью  $\epsilon$  и взаимодействующих по кулоновскому закону, т.е. как водородоподобный атом, но с малой массой ядра (сравнимой с массой электрона) и с уменьшенными в  $\epsilon^2$  раз силами притяжения. Энергия экситона Ваннье

$$E = \Delta E_g - \mu e^4 / (32\pi^2 \epsilon_0 \epsilon^2 \hbar^2 n^2) + \hbar^2 \mathbf{k}^2 / [2(m_e^* + m_h^*)], \quad (1.35)$$

где первый член – ширина запрещенной зоны, второй – энергия связи, третий – кинетическая энергия движения экситона;  $\mu$  – приведенная масса,  $\mu^{-1} = (m_e^*)^{-1} + (m_h^*)^{-1}$ ;  $n = 1, 2, 3, \dots$  – квантовое число, характеризующее энергетический уровень экситона (рис. 1.57). Радиус экситона с квантовым числом  $n$  выражается формулой

$$R_n = n^2 E m_e a_0 / \mu,$$

где  $a_0$  – боровский радиус.

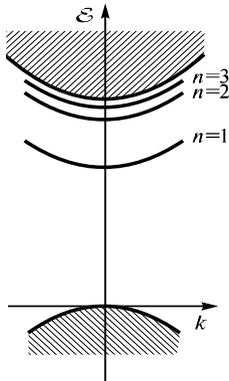


Рис. 1.57. Энергетические уровни экситона Ваннье

Другой предельный случай, когда электрон и дырка движутся в пределах одной элементарной ячейки кристалла, соответствует *экситону Френкеля*. В этом случае анализ проводят в терминах возбужденных состояний отдельных атомов. Важная общая черта у экситонов Френкеля и Ваннье заключается в том, что энергия возбуждения может последовательно передаваться по решетке, т.е. экситоны движутся, и их энергия выражается формулой типа (1.35) (движение заключается не в перемещении зарядов, а в передаче возбуждения вдоль решетки).

В процессе хаотического перемещения по кристаллу экситон может взаимодействовать с другими квазичастицами или дефектами структуры. При этом изменяются его энергия и квазиимпульс. Экситонное состояние при столкновениях может быть разрушено.

В результате либо образуются свободный электрон и дырка, либо испускается фотон, а избыточная энергия передается решетке.

Среднее время жизни экситона составляет  $10^{-8} \dots 10^{-2}$  с. Движущийся экситон может также быть захвачен одним из узлов или дефектов решетки и локализоваться в их области. Возможно объединение экситонов в комплексы с образованием экситонных молекул или ионов.

Экситонные уровни заметно влияют на спектр поглощения, а также на процессы, связанные с переносом энергии возбуждения в кристалле.

### Поляритоны

Электромагнитные колебания (фотоны) взаимодействуют с тангенциальными волнами поляризации – тангенциальными (поперечными) оптическими фононами (при поляризации ионной компоненты) и экситонами (для электронной компоненты), такое взаимодействие заключается во взаимном превращении фотонов и квантов поляризации (т.е. фононов или экситонов, рис. 1.58).

Дисперсия квантов поляризации невелика, т.е. их дисперсионные зависимости вида  $\omega \cong \omega_0 = \text{const}$  (почти горизонтальные) пересекаются с линейно растущей зависимостью для фотонов  $\omega = ck$  (рис. 1.59), причем пересечение происходит при малых значениях  $k$ . В окрестности точки пересечения взаимодействие между этими квазичастицами столь велико, что ни одну из них уже нельзя рассматривать как маловозмущенную, т.е. имеет место единый колебательный процесс, в котором участвуют и вещество, и электромагнитное поле. Он характеризуется квазичастицами – поляритонами, являющимися бозонами.

Для экситон-поляритонов в приближении сплошной среды дисперсионное соотношение определяется уравнением вида (см. рис. 1.59)

$$E^4 - E^2(E_1^2 - E_2^2) + E_1^2 E_2^2 + 4E_1 E_2 E_3^2 = 0,$$

где  $E_1 = \hbar ck$ ;  $E_2 = \hbar \omega_{pl} \sqrt{1 + \chi_e / \omega_{pl}^2}$ ;  $E_3 = i \sqrt{\chi_c k \hbar^2 / (4\omega_{pl} \sqrt{1 + \chi_e / \omega_{pl}^2})}$ ,

здесь  $\chi_e$  – диэлектрическая восприимчивость. При больших значениях  $k$  ветви соответствуют чисто фотонной ( $\omega = ck$ ) и чисто экситонной ( $\omega = \omega_{pl}$ ) зависимостям. При малых  $k$  первая стремится к постоянному значению  $\omega = \omega_{pl} \sqrt{1 + \chi_e / \omega_0^2}$ , а вторая – к началу координат, причем угол наклона меньше скорости света в  $\sqrt{\epsilon(\infty)}$  раз. Для фотон-поляритонов дисперсионное соотношение имеет вид

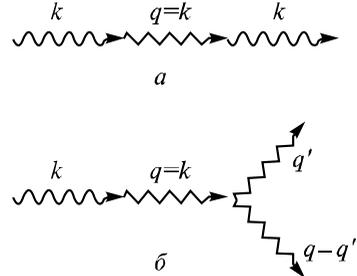


Рис. 1.58. Фонон-поляритон (а) и его распад (б)

$$\omega^4 - \omega^2 \left[ \omega_L^2 + c^2 k^2 / \varepsilon(\infty) \right] + \omega_T^2 c^2 k^2 / \varepsilon(\infty) = 0,$$

где  $\omega_L$ ,  $\omega_T$  – частоты продольных и поперечных фононов при  $k=0$  (рис. 1.60). Верхняя ветвь при  $k \rightarrow 0$  стремится к  $\omega = \omega_L$ , а при  $k \rightarrow \infty$  приближается к линейной зависимости от  $k$ , однако скорость распространения таких поляритонов в  $\sqrt{\varepsilon(\infty)}$  раз меньше скорости света. Нижняя ветвь имеет наклон  $c/\sqrt{\varepsilon(0)}$  и затем стремится к  $\omega = \omega_T$ .

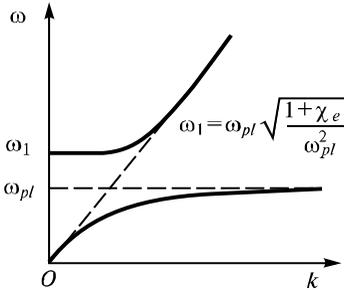


Рис. 1.59. Окрестности пересечения двух дисперсных кривых ( $\omega = ck$  – для фононов,  $\omega = \omega_{pl}$  – для экситон-поляритонов)

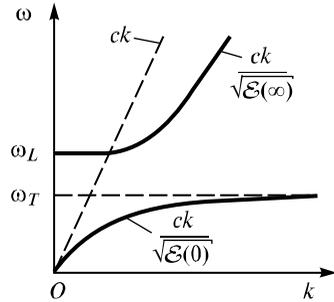


Рис. 1.60. Дисперсионные кривые для фонон-поляритона

## Магноны

Атомы твердого тела могут обладать магнитным моментом, связанным в основном со спинами  $s$  электронов, причем при низких температурах в кристаллах эти магнитные моменты упорядочены. Существует сильное влияние  $T$  на магнитную структуру ферромагнетиков: с ростом  $T$  начинает нарушаться строгая упорядоченность магнитных моментов.

Слабые нарушения упорядоченности расположения спинов, происходящие в результате возбуждения твердого тела, распространяются в виде спиновых волн (рис. 1.61). Ситуация сходна с тепловыми колебаниями, когда вследствие взаимодействия соседних элементарных ячеек энергия взаимодействия распространяется по кристаллу. Спиновые волны также квантуются, соответствующая квазичастица – магнон; при малых плотностях магнонов их рассматривают как бозе-частицы с квазиимпульсом  $\hbar k$ . Закон дисперсии для одноатомного кубического кристалла ферромагнетика имеет вид

$$E(k) = sIv(1 - \cos ka) + \beta, \quad (1.36)$$

где  $I$  – обменный интеграл;  $I \cong k_B T_c$ ;  $v$  – число ближайших соседей. При  $ka \ll 1$  из (1.36) следует

$$E(k) = \hbar^2 k^2 / (2m^*),$$

где

$$m^* = \hbar^2 / (vsIa^2) -$$

эффективная масса магнона, при  $v = 6$ ,  $s = 1/2$ ,  $a = 10^{-8}$  см

$$m^* \approx 10^4 m_e / T_C$$

( $T_C$  – в кюри). С повышением температуры количество магнонов возрастает пропорционально  $T^{3/2}$ , поэтому намагниченность насыщения  $M_s$  спадает (закон трех вторых Блоха):

$$M_s(T) / M_s(T=0) = 1 - A(T/T_C)^{3/2},$$

где  $A$  – константа, зависящая от типа вещества.

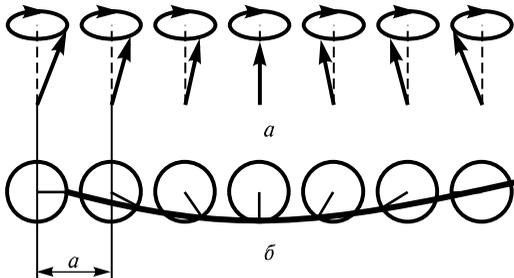


Рис. 1.61. Спиновая волна в одномерной цепочке:  
 $a$  – пространственное представление;  $b$  – вид сверху

На переориентацию спиновых моментов затрачивается энергия, следовательно, магноны увеличивают теплоемкость ферромагнетика. Особенно заметен их вклад при низких температурах, где фононная теплоемкость, пропорциональная  $T^3$ , быстро убывает.

В кристаллах с многоатомным базисом кроме акустической ветви (1.36) имеются еще и оптические.

### Куперовские пары

При низких температурах  $T < T_s$  (где  $T_s \approx 0,1\theta_D$  – критическая температура) в веществах с сильным электрон-фононным взаимодействием акт рассеяния электрона на неоднородности решетки вызывает локальное смещение ионов решетки полем электрона и появление нормального колебания в решетке, т.е. фонона, который распространяется по кристаллу и может быть поглощен вторым электроном. Между электронами, обменивающимися фононами, возникают силы притяжения, превышающие кулоновские силы отталкивания и приводящие к объединению электронов в

пары (куперовские пары), причем энергия пары связанных электронов меньше энергии свободных электронов на величину энергии связи.

Наибольшую вероятность объединения в пары имеют электроны, импульсы и спины которых равны и антипараллельны, а энергии близки к  $E_F$ . Образуются как бы молекулы из двух электронов, обладающие равными нулю импульсом и спином, т.е. куперовские пары являются бозонами и собираются (конденсируются) в упорядоченный, связанный коллектив на одном энергетическом уровне, лежащем ниже уровня Ферми на величину  $\Delta$ .

Пространственная протяженность волновой функции одной пары электронов имеет порядок длины когерентности  $\xi$  (в чистых сверхпроводниках  $\xi \sim 10^{-6}$  м, а при наличии примесей уменьшается пропорционально  $l_e^{1/2}$ , где  $l_e$  – длина свободного пробега). В то же время среднее расстояние между парами составляет порядка  $10^{-8}$  м, т.е. волновые функции электронов перекрываются, и пары не изолированы друг от друга, а упорядочены. Силы взаимодействия между коллективными куперовскими парами приводят к появлению в спектре плотности состояний электронов энергетической щели шириной  $2\Delta$  (рис. 1.62), причем значение  $2\Delta$  гораздо больше энергии связи одной пары (при  $T = 0$  К,

$l = AT^p (E - E_C)^q$ ,  $A = \text{const}$ ). Поэтому пара электронов, движущихся в кристалле, не может возбудиться, т.е. получить энергию от решетки. Иными словами, пары электронов не рассеиваются решеткой (пока порция энергии не достигает  $2\Delta$ ); их полный импульс не меняется и равен нулю.

Наряду со связанными в куперовские пары электронами в кристалле при  $0 < T < T_s$  имеется некоторое количество несвязанных, квазисвободных электронов на уровнях выше запрещенной зоны – обычных электронов проводимости. Распределение Ферми записывают для них в виде

$$f(E) = \left[ \exp(E' / (k_B T)) + 1 \right]^{-1},$$

где  $E' = (E^2 + \Delta^2)^{1/2}$ ;  $E$  – энергия, отсчитываемая от уровня Ферми. Поскольку  $\Delta > k_B T$ , величина  $f(E)$  мала, и, следовательно, мала концентрация несвязанных электронов.

При  $T = 0$  ширина энергетической щели равна  $E_C$ . С ростом температуры кристалла усиливаются колебательные движения атомов, появляю-

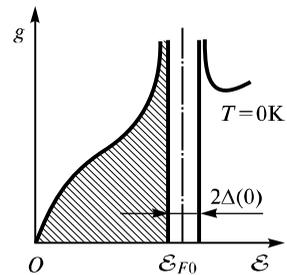


Рис. 1.62. Диаграмма распределения по энергиям плотности состояний электронов в сверхпроводнике

ся фононы с энергиями, способными разрушить пары и уменьшить упорядоченность системы электронов. Одновременно затрудняется распространение фононов между электронами пары. Все это приводит к уменьшению ширины щели, и при  $T = T_1$  величина  $\Delta(T)$  обращается в нуль. Одновременно разрушаются упорядоченные куперовские пары, и электронный газ переходит в обычное состояние.

Вещества с высокой электропроводностью при высоких температурах характеризуются слабым электрон-фононным взаимодействием, поэтому у них не образуются куперовские пары и не возникает сверхпроводимость.

### **1.3. Дефекты кристаллической структуры. Аморфные тела**

В реальных твердых телах всегда имеются дефекты кристаллической структуры (нарушения трансляционной симметрии), связанные с конечными размерами твердого тела (поверхностью), внешними воздействиями (механическими, тепловыми, радиационными и др.) и примесями, которые оказывают существенное влияние на все свойства твердых веществ. Если число дефектов становится столь велико, что трансляционная симметрия нарушается уже при одной-двух трансляциях на основной вектор, то происходит качественный скачок – переход кристаллической структуры в аморфную (характеризующуюся только ближним порядком). Количественные оценки степени влияния аморфизации и дефектов на переносные, механические и другие свойства твердых тел приведены далее.

Если дефекты рассматривать как  $n$ -мерные нарушения в кристаллической решетке, то они могут быть: точечными ( $n = 0$ ), линейными ( $n = 1$ ), плоскими ( $n = 2$ ), объемными ( $n = 3$ ).

К точечным дефектам относят атомы посторонней примеси, которые могут располагаться как в узлах, так и в междоузлиях основной решетки (матрицы) кристалла; вакансии – пустые узлы матрицы; междоузельные атомы самой матрицы; посторонние атомы, адсорбированные на поверхности кристалла. Линейные дефекты представляют собой дислокации. К плоским дефектам принадлежат границы зерен кристаллов-двойников, границы самого кристалла и зоны Гинье – Престона, представляющие собой скопления примесных атомов в кристалле, пока еще когерентных с самой матрицей, т.е. область предвыделения. Объемные дефекты, по существу, яв-

ляются макроскопическими нарушениями. Это закрытые и открытые поры, трещины, включения посторонней фазы. Сложные дефекты наименее изучены. Они могут возникать вследствие взаимодействия атомов или ионов примесей с вакансиями. Такие дефекты еще называют *ассоциированными*.

### 1.3.1. Точечные дефекты в чистых кристаллах

Согласно основным принципам статистической физики, даже в том случае, когда средняя кинетическая энергия атомов очень мала, в кристалле всегда найдется некоторое количество атомов, кинетическая энергия которых может быть очень велика. При этом в соответствии с вероятностным характером этого явления любой атом кристалла в тот или иной момент времени может приобрести энергию, значительно большую, чем средняя кинетическая энергия атомов кристалла. Такой атом может выйти из своего равновесного положения, т.е. узла решетки. Перемещаясь по кристаллу и передавая энергию остальным атомам, он занимает новое равновесное положение. Если все ближайшие узлы решетки заняты, то он может разместиться только в междоузлии (где в потенциальном рельефе для атома в твердом теле имеются минимумы). Оставшийся пустым узел решетки называют *вакансией*. Точечные дефекты в виде совокупности вакансий и атомов в междоузлиях называют *дефектами по Френкелю* (рис. 1.63).

Парные дефекты по Френкелю возникают легче в кристаллах, содержащих большие межатомные промежутки, чем в плотноупакованных. В последних для междоузельных атомов нет места. Примером кристаллов первого типа являются кристаллы со структурой алмаза (рис. 1.64), а кристаллов второго типа – металлы с плотной упаковкой. Так, маловероятно встретить при обычных условиях междоузельные атомы в ГЦК-металлах. Единственным типом междоузельных атомов здесь являются лишь малые примесные атомы, такие, как атомы В, С, N.

Полупроводники со структурой алмаза, ZnS и близкие к ним являются относительно рыхлыми. Они содержат большие межатомные пустоты, в которых могут легко размещаться междоузельные атомы. Междоузлия в структуре алмаза имеют тетраэдрическое окружение (см. рис. 1.64).

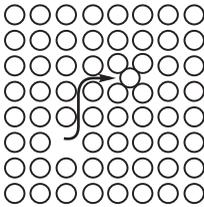


Рис. 1.63. Дефект по Френкелю

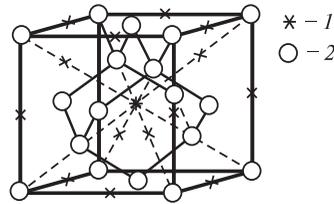


Рис. 1.64. Расположение тетраэдрических междоузлий в структуре алмаза: 1 – междоузлие, 2 – атом

По возможности размещения междоузельных атомов структуры с ионной связью занимают промежуточное положение между плотноупакованными металлами и полупроводниками с ковалентной связью. Несмотря на то, что геометрия решетки оставляет для них некоторое пространство, ионы часто сильно различаются по объему, и в результате упаковка получается довольно плотной. Поэтому вероятность появления междоузельных атомов в ионных соединениях сильно изменяется от одного вещества к другому.

Кроме парных дефектов, по Френкелю, в кристаллах имеются и одиночные точечные дефекты – вакансии, дефекты по Шоттки. Обычно они встречаются в кристаллах с плотной упаковкой атомов, где образование междоузельных атомов затруднено и энергетически невыгодно. Процесс образования дефектов в таком кристалле может происходить следующим образом. Некоторые атомы из приповерхностного слоя в результате теплового движения выходят из кристалла на поверхность (рис. 1.65). Образовавшаяся вакансия мигрирует затем в объем кристалла.

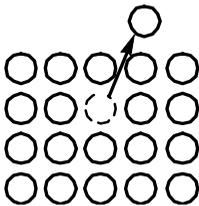


Рис. 1.65. Дефект по Шоттки

Как всякий точечный дефект, вакансии приводят к нарушениям внутреннего периодического поля в кристалле. Следовательно, это должно приводить к возникновению локальных уровней в запрещенной зоне полупроводника. В германии и кремнии эти уровни должны носить акцепторный характер. Действительно, удаление одного из матричных атомов в таких кристаллах приводит к незавершенности электронных орбит соседних с вакансией атомов, т.е. эти атомы способны воспринимать электроны из валентной зоны: в этом случае возникновение вакансии эквивалентно образованию четырехзаряд-

ного акцептора. В гетерополярных полупроводниках типа  $A^{III}B^V$ , например, акцепторный или донорный характер уровней вакансий зависит от того, какого из атомов не хватает в решетке кристалла. Пустые металлоидные узлы, т.е. вакансии  $A$ , являются донорами, а вакансии  $B$  – акцепторами. В щелочно-галогидных кристаллах вакансия аниона (т.е. «отсутствие отрицательного заряда») действует как эффективный положительный заряд. Поскольку кристалл в целом должен оставаться электронейтральным, концентрации положительных и отрицательных вакансий должны быть равны. Однако при наличии в кристалле электронов или дырок, а также при образовании сложных дефектов такое равенство не является обязательным.

Электроны принимают участие, например, в образовании центров окраски в щелочно-галогидных кристаллах и представляют собой анионную вакансию, которая, имея эффективный положительный заряд, удерживает при себе свободный электрон (рис. 1.66). Этот электрон может появиться в кристалле, например, в результате ионизации избыточного атома щелочного металла. Такой  $F$ -центр вызывает появление полос поглощения в видимой области спектра (бесцветный щелочно-галогидный кристалл становится окрашенным).

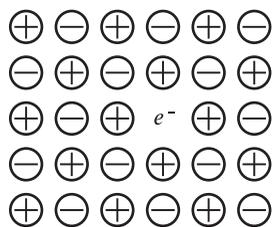


Рис. 1.66.  $F$ -Центр окраски в щелочно-галогидном кристалле

Этот электрон может появиться в кристалле, например, в результате ионизации избыточного атома щелочного металла. Такой  $F$ -центр вызывает появление полос поглощения в видимой области спектра (бесцветный щелочно-галогидный кристалл становится окрашенным).

Точечные дефекты в ионных кристаллах оказывают сильное влияние на электропроводность, которая в большей мере обусловлена движением заряженных точечных дефектов – вакансий, междоузельных собственных или примесных ионов (ионная проводимость).

Очевидно, что равновесная концентрация вакансий обоих типов зависит от температуры и от энергии образования вакансии, которую называют *энергией дефектообразования*  $E_D$ . В случае вакансии по Френкелю – это энергия отрыва атома от равновесного положения, а в случае вакансии по Шоттки к ней добавляется энергия, затрачиваемая на перемещение атома к стокам.

Процесс образования вакансий имеет вероятностный характер, поэтому концентрация вакансий

$$N_v = A \exp\left[-E_d/(k_B T)\right],$$

где  $A$  – коэффициент пропорциональности, зависящий от общего числа атомов в единице объема кристалла и от числа пустых мест, в которые может перескочить атом. Обычно энергия дефектообразования велика по сравнению с тепловой энергией ( $k_B T$ ) и составляет 1...2 эВ для различных кристаллов.

Если  $E_d$  [эВ] и  $A = 10^{22} \text{ см}^{-3}$ , то концентрация вакансий будет меняться с изменением температуры очень быстро (при  $T = 300 \text{ К}$   $N_v \sim 6 \cdot 10^4 \text{ см}^{-3}$ , а при  $T \sim 1100 \text{ К}$   $N_v \sim 2 \cdot 10^{17} \text{ см}^{-3}$ ). Если выдержать кристалл некоторое время при высокой температуре, т.е. образовать в нем большое количество вакансий, а затем быстро охладить (закалка), то повышенное количество вакансий заморозится, т.е. не успеет исчезнуть. Поэтому количество вакансий в реальном кристалле помимо температуры и энергии дефектообразования определяется предыдущей термообработкой.

Точечные дефекты, возникающие при облучении кристаллов быстрыми частицами (нейтронами, протонами, электронами), а также осколками деления ядер и ускоренными ионами, получили название *радиационных дефектов*. В отличие от тепловых радиационные точечные дефекты термодинамически неравновесны, так что после прекращения облучения состояние кристалла не является стационарным.

Для возникновения радиационных дефектов наибольшее значение имеют упругие столкновения быстрых частиц с атомами кристалла. Если энергия, переданная в результате упругого столкновения от движущейся частицы атому мишени, превышает некоторое значение, то атом мишени, выбитый из узла решетки, оставляя вакансию, движется через кристалл. Наименьшую энергию  $E_d$ , которую необходимо передать одному из атомов кристалла, чтобы он оказался в ближайшей междоузельной позиции, называют *пороговой*. Если энергия, переданная атому быстрой частицей, меньше  $E_d$ , то смещения атома не происходит, а возникают лишь упругие волны, энергия которых переходит в энергию теплового движения

атомов. Опыт показывает, что  $E_D$  примерно в два-три раза больше энергии, необходимой для адиабатного перемещения атома из узла решетки в междуузлие. Так,  $E_D \sim 25$  эВ для большинства кристаллов, в которых энергия связи атомов составляет примерно 10 эВ. Каждый атом кристалла, получивший от быстрой частицы энергию  $E > E_D$ , может сместиться в междуузлие, в результате чего одновременно возникают вакансии и атом в междуузлии. Радиационные точечные дефекты в отличие от тепловых всегда парные (дефекты по Френкелю).

### 1.3.2. Примесные атомы

Чужеродные примесные атомы с матрицей основного кристалла могут образовывать либо твердые растворы замещения, либо твердые растворы внедрения. В первом случае примесные атомы находятся в узлах кристаллической решетки, во втором – в междуузлиях (рис. 1.67).

Та или иная ситуация реализуется в зависимости от влияния двух факторов: геометрического и электрохимического.

Влияние геометрического фактора учитывают, считая, что растворы замещения образуют лишь те атомы, радиусы которых отличаются от радиусов матричных атомов не более чем на 15 %.

Чтобы применять это правило, необходимо определить эффективные атомные радиусы.

Для образования растворов замещения необходимо также, чтобы атомы примеси и матрицы были электротехнически подобны, т.е. разность электроотрицательностей примесного и матричного атомов должна быть мала. Твердые растворы внедрения подчиняются сравнительно простому правилу: отношение радиуса внедряющегося атома к радиусу атома матрицы должно быть меньше, чем

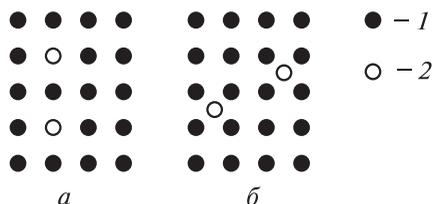


Рис. 1.67. Возможное расположение примесных атомов в кристалле: *a* – раствор замещения, *b* – раствор внедрения; 1 – матричный атом, 2 – примесный атом

0,59. Можно показать, что значение 0,59 соответствует наибольшей сфере, которая может уместиться в промежутках плотноупакованной решетки. Если отношение  $r_{\text{п}}/r_{\text{м}}$  (где  $r_{\text{п}}$  – радиус примесного атома;  $r_{\text{м}}$  – радиус матричного атома) заключено в пределах  $0 < r_{\text{п}}/r_{\text{м}} < 0,59$ , то примесь образует раствор внедрения, а если  $0,85 < r_{\text{п}}/r_{\text{м}} < 1,15$ , то – раствор замещения, область значений  $0,59 < r_{\text{п}}/r_{\text{м}} < 0,85$  вообще неблагоприятна для образования твердых растворов.

### 1.3.3. Примеси замещения

Рассмотрим их на примере кристаллов Ge, Si, где кристаллическая решетка состоит из четырех валентных атомов с ковалентной связью, при которой валентные электроны матричных атомов объединяются в электронные пары (рис. 1.68, а).

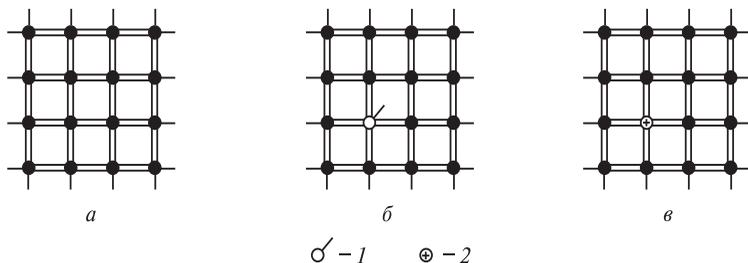


Рис. 1.68. Схема, иллюстрирующая образование доноров и акцепторов в кристалле с примесями: а – ковалентный беспримесный кристалл, б – образование доноров, в – образование акцепторов; 1 – пятивалентный атом, 2 – трехвалентный атом

Если в такой решетке один из узлов заместить примесным атомом с большей валентностью, например пятивалентным атомом Sb (рис. 1.68, б), то четыре валентных электрона атома Sb будут участвовать в образовании ковалентной связи так же, как и у обычного матричного (Ge или Si) атома, и лишний пятый электрон уже не сможет находиться в валентной зоне кристалла из-за отсутствия в ней свободных энергетических уровней. Следовательно, этот электрон будет либо в запрещенной зоне, либо в зоне проводимости. Чтобы он попал в зону проводимости, примесный атом необходимо

ионизировать, затратив для этого энергию ионизации  $E_D$ . Величина  $E_D$  отличается от энергии ионизации  $E_i$  свободного атома, так как атом примеси находится в кристалле, т.е. погружен в среду с некоторой диэлектрической постоянной  $\epsilon_r$ , что ослабляет кулоновские силы. При этом примесный атом можно рассматривать как содержащий только один электрон, т.е. как водородоподобный атом.

Из-за поляризующего действия всей решетки сила притяжения электрона примесным атомом будет в  $\epsilon_r^2$  раз меньше, чем в вакууме, а масса электрона заменяется на эффективную  $m^*$ , т.е. в этом случае формально можно уподобить примесный атом атому водорода, но большего размера  $r_e$  (в  $\epsilon_r m/m_e^*$  раз) и с меньшей (в  $\epsilon_r m/m_e^*$  раз) энергией связи:

$$r_e = \frac{4\pi\epsilon_0\epsilon_r h^2}{m_e^* e^2}, \quad \Delta E_D = \frac{1}{2} \frac{Z^2 e^4 m_e^*}{(4\pi\epsilon_0\epsilon_r h)^2}.$$

Кроме основного у примесного донорного атома могут быть возбужденные состояния, которые также можно описать в водородоподобном приближении (т.е. в предположении, что поле иона, в котором движется электрон, близко к кулоновскому, как в атоме водорода):

$$r_{en} = \frac{4\pi\epsilon_0\epsilon_r h^2 n}{m_e^* e^2}, \quad \Delta E_D = \frac{1}{2} \frac{Z^2 e^4 m_e^*}{(4\pi\epsilon_0\epsilon_r h)^2} \frac{1}{n^2},$$

где  $n = 2, 3, 4, \dots$  – главное квантовое число состояния. Для возбужденных состояний водородоподобное приближение выполняется значительно лучше, чем для основных, так как особенности строения волновых функций остальных электронов оказывают меньшее влияние на возбужденные электроны, которые находятся на значительно большем расстоянии от иона, чем электроны основного состояния.

Такой электрон слабо связан с ионом внедрения и легко его покидает, т.е. переходит в зону проводимости. Таким образом, подобные дефекты создают уровни энергии в запрещенной зоне вбли-

зи дна зоны проводимости и являются донорами, т.е. поставляют электроны проводимости.

Другая ситуация возникает при замещении атома Si трехвалентной примесью (рис. 1.68, в): ненасыщенная связь создает условия для захвата электрона, причем энергия такого электрона лишь немного выше, чем у валентных электронов в чистом Si. Уровень образуется у потолка валентной зоны, а примесь является акцептором, т.е. захватывает электроны валентной зоны, образуя подвижные дырки.

Атомы других валентностей, как правило, образуют уровни, лежащие далеко и от дна зоны проводимости, и от потолка валентной зоны; эти уровни называют *глубокими*. Такие примеси способны в ряде случаев образовывать не один примесный уровень, а несколько, соответствующих различным зарядовым состояниям.

#### 1.3.4. Примеси внедрения

В этом случае электроны примесных атомов уже не участвуют в образовании валентных химических связей, а принадлежат только самому примесному атому, донорный или акцепторный характер внедренного атома не зависит прямым образом от их валентности, а определяется значением электроотрицательности.

Если электроотрицательность  $X_{\text{II}}$  примесных атомов больше, чем атомов основного кристалла  $X_{\text{M}}$ , то примесь проявляет акцепторные свойства. При обратном соотношении ( $X_{\text{II}} < X_{\text{M}}$ ) атомы примеси будут донорами. Появление уровней в запрещенной зоне существенно меняет многие свойства полупроводников и диэлектриков (электропроводность, оптические свойства и др.). Влияют примеси и на транспортные свойства металлов (они являются центрами, на которых рассеиваются движущиеся квазичастицы – электроны, фононы и др.).

#### 1.3.5. Тепловое движение дефектов

Кинетика дефектов определяет диффузную и ионную проводимость кристаллов. Передвижение дефектов является следствием наличия высокоэнергетичного хвоста в больцмановском распределении атомов, т.е. при  $T > 0$  К для атома примеси внедрения или

вакансии имеется ненулевая (хотя и экспоненциально малая) вероятность преодолеть потенциальный барьер  $\Delta E$ , переместиться на соседнее равновесное состояние.

Аппроксимируя рельеф потенциальной ямы параболой

$$U(x) = U(x_0) + k(x - x_0)^2 / 2 \quad (1.37)$$

(где  $k = \text{const}$ ;  $x$  – текущая;  $x_0$  – равновесная координаты), получают частоту переходов в виде

$$\omega = \nu \exp\left[-\Delta U / (k_B T)\right], \quad (1.38)$$

где  $\Delta U$  – высота потенциального барьера, а стоящий перед бальцмановской экспонентой множитель представляет собой частоту гармонических колебаний атома в поле (1.37):

$$\nu = \frac{1}{4\pi} \sqrt{\frac{k}{M}}$$

( $M$  – масса атома). Физический смысл (1.38) ясен: вероятность перехода за данный цикл колебаний равна бальцмановской вероятности того, что данный атом получит энергию выше  $\Delta U$ .

Под действием электрического поля  $E$  ионы в междоузлиях могут двигаться в направлении электростатической силы. Предположив, что потенциальный барьер для иона под действием поля в одном направлении уменьшается на  $eEa/2$  (где  $a$  – постоянная решетки), а в другом – увеличивается на столько же, можно получить скорость направленного движения примесей, умножив  $a\nu$  на разность вероятностей скачка по полю и против поля:

$$\begin{aligned} \nu &= a\nu \left\{ \exp\left[-(\Delta U - eEa/2)/(k_B T)\right] - \exp\left[-(\Delta U + eEa/2)/(k_B T)\right] \right\} = \\ &= a\nu \exp\left[-\Delta U/(k_B T)\right] \left\{ \exp\left[eEa/(2k_B T)\right] - \right. \\ &\quad \left. - \exp\left[-eEa/(2k_B T)\right] \right\} \left( \omega eEa^2 / (k_B T) \right). \end{aligned}$$

Разделив  $\nu$  на  $E$ , получают подвижность дефектов

$$\mu = e\omega a^2 / (k_B T),$$

по которой можно определить и коэффициент диффузии, и ионную проводимость.

Движение примесей замещения наиболее вероятно при появлении рядом с примесным атомом вакансии, т.е. диффузия атомов замещения коррелирована с движением вакансий.

### 1.3.6. Линейные и поверхностные дефекты

Линейные дефекты – дислокации в кристалле – могут иметь любую форму, но они или образуют замкнутые петли, или начинаются и заканчиваются на границах кристалла (или межкристаллитных границах). В общем случае дислокация может быть представлена как результат суперпозиции винтовой и краевой дислокаций, причем соотношение между ними может меняться вдоль линии дислокации. Чисто краевая дислокация образуется, когда атомная плоскость прерывается внутри кристалла (рис. 1.69).

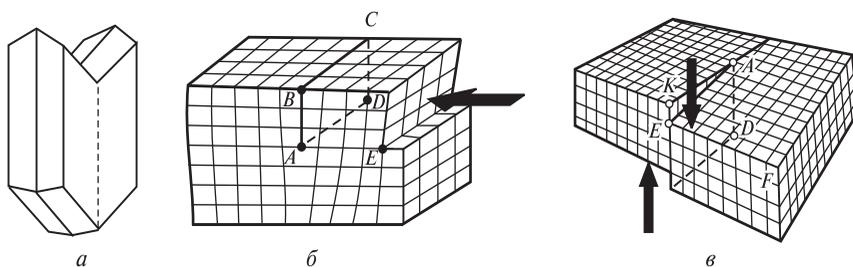


Рис. 1.69. Дислокации в кристаллах: *a* – схема идеального кристалла; *б* – схема кристалла с краевой дислокацией (линия *AD* – край лишней атомной полуплоскости *ABCD*); *в* – схема кристалла с винтовой дислокацией (линия *AD* превращает поверхность в наклонный спуск). Стрелками указаны силы, которые могут вызвать такие дислокации

В случае чисто винтовой дислокации одна часть решетки смещается относительно другой в направлении, параллельном линии дислокации. Количественно дислокация характеризуется *вектором Бюргерса*  $\mathbf{b}$ , определяющим величину и направление смещения атомных плоскостей. Для его нахождения проводят, переходя от атома к атому, замкнутый контур, охватывающий дислокацию – *контур Бюргерса* – вначале в недеформированной, а затем в деформированной решетке. Вектор Бюргерса – это вектор, необходимый для замыкания последнего контура. Для чисто краевой дислокации  $\mathbf{b}$  перпендикулярен обрывающейся плоскости, для чисто винтовой дислокации он равен шагу спирали и параллелен ее оси.

Дислокации уменьшают и коррозионную стойкость кристаллов, вдоль них облегчена диффузия примесей: в ядре дислокации мень-

ше высота потенциальных барьеров между стационарными состояниями атомов внедрения.

Поверхностными дефектами являются границы зерен практически правильных кристаллов с малоугловыми границами, разделяющими кристаллы с относительной разориентировкой кристаллических осей на углы  $\theta$  от нескольких секунд до  $3...5^\circ$ . Согласно Бюргерсу, малоугловые границы представляют собой совокупности дислокаций, а угол  $\theta$  связан с  $|\mathbf{b}|$  и расстоянием  $D$  между дислокациями (рис. 1.70):

$$\operatorname{tg} \theta = b/D.$$

Границы зерен оказывают существенное влияние на многие свойства кристаллов, в частности на электропроводность, поглощение ультразвука, оптические свойства и т.д. Наличие границ приводит к тому, что в поликристаллах коэффициент диффузии примесей значительно больше, чем в монокристаллах.

Плоскими дефектами, помимо названных уже границ зерен и поверхности, являются также границы двойниковых кристаллов – кристаллов, у которых одна часть совмещается с другой либо поворотом вокруг оси двойникования, либо отражением, либо двумя операциями совместно.

В принципе, поверхностными дефектами являются и свободные границы кристаллов, где нарушается кристаллическая симметрия.

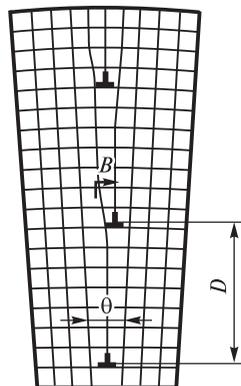


Рис. 1.70. Границы зерен с малым углом разориентации

### 1.3.7. Аморфные тела. Структура

У твердых тел часто встречаются такие большие отклонения от правильной кристаллической структуры, что их уже нельзя рассматривать как кристаллы с отдельными дефектами различных типов. Такие тела, называемые аморфными, по структуре и многим свойствам подобны жидкостям, но вязкость аморфных твердых тел на 15–16 десятичных порядков выше, чем у капельных жидкостей.

Наиболее характерным для структуры аморфных тел является наличие ближнего порядка при отсутствии дальнего, т.е. каждый атом находится почти в том же окружении, что и в кристалле, но трансляционная симметрия нарушена.

Можно считать, что атомы в аморфном теле располагаются в узлах трехмерной сетки, сходной с кристаллической решеткой соответствующего кристалла по структуре элементарных ячеек, но эти ячейки искажены. Искажения, накапливаясь на нескольких порядках решетки, приводят к нарушению трансляционной симметрии и дальнего порядка. Кроме близких к правильным встречаются также топологически «неправильные» ячейки, соответствующие разрыву связей или установлению «лишних» связей в области дефекта кристалла. Так же, как и кристаллические, аморфные тела различаются по числу подвижных носителей заряда на металлы, полупроводники и диэлектрики.

### *Аморфные металлы*

Отсутствие дальнего порядка характерно для многих сплавов. Аморфные состояния чистых металлов (металлическое стекло) образуются, например, при быстром охлаждении расплавленного металла. По-видимому, любой расплав можно привести к твердому аморфному состоянию. Предполагается, что в металлическом стекле существует хаотическое непрерывное распределение сферических частиц, характеризующееся плотной упаковкой без каких-либо разрывов типа границ и точечных дефектов, характерных для кристаллов. Координационные числа, определенные по площади под первым пиком функции радиального распределения, в большинстве случаев оказываются равными единице, как для правильных плотноупакованных решеток, т.е. они больше, чем для жидких металлов.

При нагреве в аморфных металлах происходят структурные изменения. В отличие от обычных стекол (оксидных), которые при этом размягчаются и переходят в расплав, а при охлаждении расплава снова образуется стекло, металлические стекла при повышении температуры кристаллизуются. Эта особенность обусловлена металлическим типом связи. Температура кристаллизации  $T_k$  аморфных металлических сплавов в твердом состоянии достаточно

велика. Например, для сплавов переходных металлов с металлоидами  $T_k$  превышает (0,4...0,6)  $T_{пл}$ .

Особенности атомной структуры металлических стекол, приводящие к отсутствию в них таких дефектов, как дислокации, границы зерен и т.д., обуславливают высокую прочность и износостойкость. Так, предел прочности сплавов на основе железа существенно больше, чем у чистого железа. Высокая устойчивость металлических стекол к коррозии связана, прежде всего, с отсутствием границ зерен, включений и т.п.; примером может служить нержавеющая сталь.

### *Аморфные полупроводники и диэлектрики*

Эти материалы разделяют на три группы.

1. Аморфные твердые тела с тетраэдрическими связями, такие, как кремний, германий, соединения  $A^{III}$  и  $B^V$ . Эти полупроводники в аморфном состоянии нельзя получить охлаждением расплава. Их получают обычно в виде тонких пленок с помощью различных методов осаждения (термическое испарение в вакууме, катодное напыление и т.д.). Их свойства в значительной степени подобны свойствам кристаллических аналогов.

2. Халькогенидные стекла – некристаллические вещества, содержащие атомы халькогенов (серы, селена, теллура), получающиеся в результате охлаждения расплава. Они в основном нечувствительны к примесям, обладают симметричными вольт-амперными характеристиками, претерпевают различные структурные изменения.

3. Стекла, основным компонентом которых являются элементы V группы таблицы Менделеева. По своим свойствам эта группа аморфных полупроводников занимает промежуточное положение между халькогенидными стеклами и аморфными полупроводниками с тетраэдрическими связями.

### *Аморфные диэлектрики в виде тонких пленок*

Эти материалы находят широкое применение в микроэлектронике. Во многих таких диэлектриках, так же как и в аморфных полупроводниках, проводимость (весьма незначительная) осуществляется перескоками из одного локализованного состояния в другое. Энергия активации этого процесса значительно ниже, чем энергия активации примесной проводимости в кристаллических диэлектриках.

Поскольку аморфные диэлектрики имеют более низкую плотность, чем соответствующие кристаллы, их диэлектрическая проницаемость  $\epsilon$  несколько ниже по сравнению с  $\epsilon$  кристаллов.

### *Жидкие кристаллы*

Это – жидкости, у которых наблюдается определенный порядок в расположении молекул, следствием чего является наличие у них ряда признаков, присущих кристаллическим веществам, в частности анизотропия механических, электрических, магнитных и оптических свойств. В этом состоянии, промежуточном между жидкостью и твердым телом, аморфным и кристаллическим состоянием, находятся некоторые органические вещества в определенном температурном интервале.

### *Механические свойства кристаллов*

Рассмотрим анизотропные механические свойства кристалла в целом, необходимые для практического использования справочного материала.

Механические свойства твердого тела отражают его реакцию на воздействие некоторых внешних факторов. В простейшем случае такими внешними факторами являются механические воздействия: сжатие, растяжение, изгиб, удар, кручение. Кроме механических существуют тепловые, магнитные, электрические и другие воздействия.

Механические свойства кристаллов определяются, в первую очередь, силами связи, действующими между атомами или молекулами, составляющими твердое тело.

*Механические напряжения.* Если тело находится под действием внешних сил, то в каждой его точке возникают механические напряжения. Если в таком теле выделить какой-либо элемент объема, то на него действуют два типа сил: 1) объемные силы (например, сила тяжести), действующие на все элементы тела; 2) силы, действующие на поверхность элемента со стороны окружающих его частей тела.

При описании напряженного состояния считают, что напряжение во всем теле однородно (одинаково во всех точках тела), все части тела находятся в статическом равновесии, объемные силы и объемные моменты отсутствуют. Выберем любую точку  $O$  в объеме тела и вокруг нее построим, как это делается в классической теории упругости, бесконечно малый куб (рис. 1.71).

Обозначим через  $\sigma_{ij}$  компоненту напряжения, действующую в направлении  $i$  на грань куба, перпендикулярную оси  $j$ . Напряжения  $\sigma_{11}$ ,  $\sigma_{22}$ ,  $\sigma_{33}$  – нормальные (растягивающие или сжимающие);  $\sigma_{12}$ ,  $\sigma_{21}$ ,  $\sigma_{23}$  и т.д. – касательные (скалывающие или сдвиговые).

Напряженное состояние в точке характеризуется девятью величинами  $O_{ij}$ , которые являются компонентами  $\sigma_{ij}$  ( $i, j = 1, 2, 3$ ) тензора второго ранга – тензора механических напряжений.

Так как элементарный куб находится в состоянии равновесия, можно показать из рассмотрения вращающих моментов относительно любой оси куба, что  $\sigma_{23} = \sigma_{32}$ ,  $\sigma_{31} = \sigma_{13}$ ,  $\sigma_{12} = \sigma_{21}$ , т.е. из девяти компонент только шесть являются независимыми.

**Деформация.** Это изменение объема или формы твердого тела без изменения его массы под действием внешней силы. Если образец имел начальную длину  $l_0$  и длину  $l_k$  после приложения растягивающей силы, то относительная деформация образца

$$\varepsilon = (l_k - l_0) / l_0.$$

Пусть точка  $O$  после деформации осталась на месте, а все остальные точки тела изменили свои положения.

Определим положение точки  $A(x, y, z)$  до деформации радиусом-вектором  $\mathbf{r}$ . После деформации точка  $A(x, y, z)$  переместится в положение  $A'(x', y', z')$ , определяемое радиусом-вектором  $\mathbf{r}'$ . Вектор  $\overline{AA'} = \mathbf{r} - \mathbf{r}' = \mathbf{U}(u, v, w)$  называют вектором смещения;  $u, v, w$  – компоненты вектора смещения по осям  $x, y, z$ . Очевидно, что  $x' = x + u$ ,  $y' = y + v$ ,  $z' = z + w$ . Определим деформацию отрезков  $\Delta x, \Delta y, \Delta z$ . В направлении оси  $x$  она составит  $\Delta u / \Delta x$  или  $\partial u / \partial x$  в пределе при  $\Delta x \rightarrow 0$ , в направлении оси  $y$  имеем  $\Delta v / \Delta y$  и  $\partial v / \partial y$  в пределе при  $\Delta y \rightarrow 0$ , в направлении  $z$  получим  $\Delta w / \Delta z$  или  $\partial w / \partial z$  в пределе  $\Delta z \rightarrow 0$ . Так как компоненты  $u, v, w$  являются линейными функциями координат, то

$$\Delta u = (\partial u / \partial x) \Delta x + (\partial u / \partial y) \Delta y + (\partial u / \partial z) \Delta z = e_{11} \Delta x + e_{12} \Delta y + e_{13} \Delta z,$$

$$\Delta v = (\partial v / \partial x) \Delta x + (\partial v / \partial y) \Delta y + (\partial v / \partial z) \Delta z = e_{21} \Delta x + e_{22} \Delta y + e_{23} \Delta z,$$

$$\Delta w = (\partial w / \partial x) \Delta x + (\partial w / \partial y) \Delta y + (\partial w / \partial z) \Delta z = e_{31} \Delta x + e_{32} \Delta y + e_{33} \Delta z.$$

Девять величин  $e_{ij}$  образуют симметричный тензор второго ранга – тензор деформации. Он содержит девять компонент, шесть из которых являются независимыми, поскольку компоненты, симметричные относительно главной диагонали, равны между собой ( $e_{ij} = e_{ji}$ ):

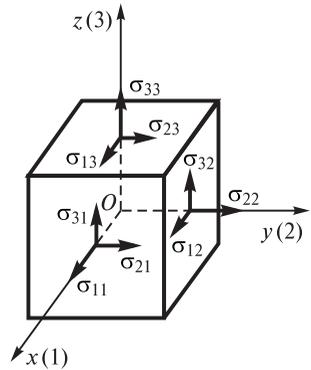


Рис. 1.71. Напряжения, действующие на грани элементарного куба

$$T_{\text{деф}} = \begin{vmatrix} e_{11} & (e_{12} + e_{21})/2 & e_{13} e_{31}/2 \\ (e_{21} + e_{12})/2 & e_{22} & (e_{23} + e_{32})/2 \\ e_{31} e_{12}/2 & (e_{32} + e_{23})/2 & e_{33} \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} \varepsilon_{11} & \varepsilon_{12} & \varepsilon_{13} \\ \varepsilon_{21} & \varepsilon_{22} & \varepsilon_{23} \\ \varepsilon_{31} & \varepsilon_{32} & \varepsilon_{33} \end{vmatrix}.$$

Диагональные компоненты  $\varepsilon_{ii}$  описывают удлинения или сжатия, остальные компоненты  $\varepsilon_{ij}$  являются компонентами деформации сдвига. Угол сдвига, или полный сдвиг в какой-то плоскости, равен соответствующей недиагональной компоненте тензора деформации  $\varepsilon_{ij}$ .

В одномерном случае, когда деформация и напряжение достаточно малы, деформация пропорциональна приложенному напряжению (закон Гука):  $\sigma = C\varepsilon$ , где  $C$  – модуль Юнга.

В трехмерном случае, если относительная деформация бесконечно мала, то каждая компонента тензора деформации линейно связана со всеми компонентами тензора напряжений и, наоборот, каждая компонента тензора напряжения линейно связана со всеми компонентами тензора деформации, т.е. для монокристаллов:

$$\sigma_{ij} = C_{ijkl}\varepsilon_{kl},$$

где  $C_{ijkl}$  – константа жесткости кристалла; всего будет 81 компонента  $C_{ijkl}$ . Однако число независимых компонент – 21;  $\varepsilon_{ij} = \varepsilon_{ji}$ ,  $\sigma_{ij} = \sigma_{ji}$ ,  $C_{ijkl} = C_{jikl}$ ,  $C_{ijkl} = C_{klij}$ . Это позволяет сократить число индексов: двойное сочетание  $ij = m$  ( $ij = 1, 2, 3$ ) и  $kl = n$  ( $kl = 1, 2, 3$ ), и заменить одним индексом от 1 до 6 по следующей схеме:  $11 \rightarrow 1, 22 \rightarrow 2, 33 \rightarrow 3; 23, 32 \rightarrow 4; 31, 13 \rightarrow 5; 12, 21 \rightarrow 6$ . Компоненты жесткости  $C_{ijkl}$  преобразуют также. В матричном обозначении закон Гука имеет вид

$$\sigma_i = C_{ij}\varepsilon_j \quad (i, j = 1, 2, \dots, 6).$$

Полное число независимых упругих констант сокращается в зависимости от симметрии кристалла. Так, если кристалл обладает наименьшей триклинной симметрией, то полное число упругих констант равно 21 (максимальное число независимых констант), а для кристаллов кубической симметрии оно равно 3. Основное свойство кубического кристалла состоит в том, что направления  $x, y, z$  взаимно перпендикулярны и полностью эквивалентны. Это приводит к тому, что  $C_{11} = C_{22} = C_{33} = C_{44} = C_{55} = C_{66}$ . Остальные компоненты  $C_{ij}$  равны нулю, так что для кубического кристалла имеются лишь три независимые компоненты  $C_{11}, C_{12}, C_{44}$ , и набор постоянных упругой жесткости сводится к матрице

$$C_{ij} = \begin{vmatrix} C_{11} & C_{12} & C_{12} & 0 & 0 & 0 \\ C_{12} & C_{11} & C_{12} & 0 & 0 & 0 \\ C_{12} & C_{12} & C_{11} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & C_{44} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & C_{44} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & C_{44} \end{vmatrix}.$$

Через  $C_{11}$ ,  $C_{12}$ ,  $C_{44}$  выражаются различные механические характеристики кубических кристаллов: модуль Юнга  $E$ , коэффициент Пуассона  $\nu$  и др. (например, объемный модуль упругости  $B = (C_{11} + C_{12})/3$ ; постоянная сдвига  $\tau = (C_{11} - C_{12})/2$  и т.д.).

Если для кристалла выполняются следующие условия: 1) все силы взаимодействия между частицами, составляющими кристалл, – центральные (для ковалентных кристаллов это условие не выполняется); 2) частицы сферически-симметричны и расположены в центрах симметрии структуры; 3) в исходном состоянии какие-либо напряжения в кристалле отсутствуют, то это дает шесть дополнительных соотношений между коэффициентами упругости (соотношения Коши):

$$C_{23} = C_{44}, \quad C_{56} = C_{14}, \quad C_{64} = C_{25}, \quad C_{31} = C_{55}, \quad C_{12} = C_{66}, \quad C_{45} = C_{36}.$$

Для кристалла кубической симметрии они сводятся к равенству  $C_{12} = C_{44}$ . В ковалентных кристаллах силы связи имеют нецентральный характер и  $C_{12} \neq C_{44}$ . Для металлов соотношения Коши также не выполняются, т.е. в металлах силы взаимодействия не обладают сферической симметрией. Для многих ионных кристаллов, однако, соотношения Коши выполняются хорошо, причем тем лучше, чем меньше доля ковалентной или металлической связи.

При больших деформациях, превышающих предел упругости, соотношение между напряжением и деформацией – нелинейное, что является следствием отклонения от гармонического характера взаимодействия атомов при большом отклонении от положений равновесия. В реальном кристалле с дефектами, если напряжение превышает некоторый предел, называемый пределом текучести, то появляется остаточная (пластическая) деформация, т.е. необратимое изменение формы и объема, остающееся после снятия напряжения. На типичной кривой напряжение-деформация (рис. 1.72) точка  $A$  соответствует пределу упругости, точка  $B$  – пределу текучести. На участке  $BC$  кривая горизонтальна, что означает текучесть (деформация возрастает без изменения напряжения). Начиная с точки  $C$  кривая снова идет вверх. Если в некоторый момент времени в точке  $M$  снять нагрузку, то кривая разгрузки пойдет по прямой  $MP$ . Вторичная на-

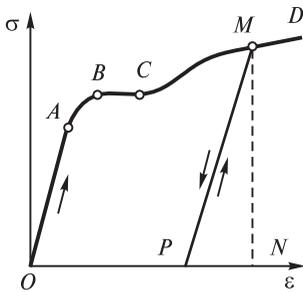


Рис. 1.72. Диаграмма зависимости напряжение-деформация

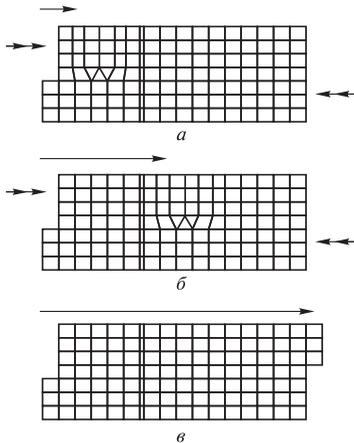


Рис. 1.73. Последовательное движение (а – б) краевой дислокации, расширяющей область сдвига в кристалле

грузка идет также по прямой  $MP$ , т.е. вывод материала в пластическую область увеличивает предел упругости. Это называют деформационным упрочнением

Пластическая деформация связана с движением дислокаций под действием напряжений. Дислокации могут двигаться как вдоль плоскостей скольжения (плоскость, перпендикулярная «лишней» атомной плоскости) (рис. 1.73), так и перпендикулярно к ним. Для последовательного пересоединения связей атомов достаточно относительно небольших напряжений (в металлах около  $10^{-4} \mu$ , где  $\mu$  – модуль сдвига). Поэтому сдвиговая прочность реальных металлов с дислокациями на несколько порядков ниже теоретической прочности идеального кристалла (которая оценивается как  $0,1 E$ ). Иной характер носит движение дислокации перпендикулярно плоскости скольжения – переползание (иначе называемое неконсервативным движением). Оно связано с удлинением (или укорочением) «лишних» атомных плоскостей, которое происходит вследствие захвата диффундирующих междоузельных атомов (или вакансий) на дислокацию или «испарения» точечных дефектов с дислокаций. Движению дислокаций мешают также упругие взаимодействия с другими дислокациями, границами зерен, примесными атомами, частицы другой фазы. Таким образом, дислокации делают материал

мягче, но если их очень много и они мешают друг другу двигаться, то кристалл снова становится твердым (деформационное упрочнение).

Основными механизмами размножения дислокаций при пластической деформации являются *источники Франка – Рида* и двойное поперечное скольжение. Источником Франка – Рида является отрезок дислокации с закрепленными концами. Под приложенным напряжением отрезок дислокации изгибается до тех пор, пока не отделится замкнутая петля дислокации и не восстановится исходный отрезок дислокации (рис. 1.74). При двойном поперечном скольжении точками закрепления служат концы вин-

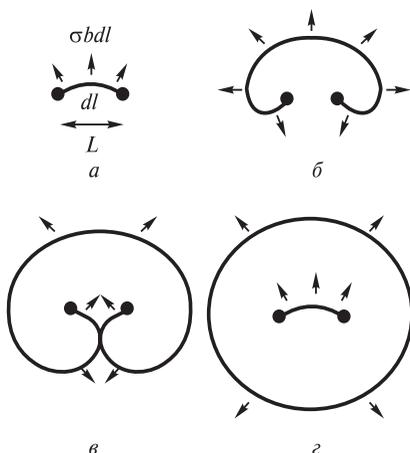


Рис. 1.74. Этапы (а–г) образования петли дислокации источником Франка-Рида

обусловлено наличием дефектов, создающих слабые места, и неравномерностью внутренних напряжений. Если возникла трещина размером  $L > L_{кр}$ , то она будет распространяться до полного разрыва материала, поскольку на образование трещины площадью  $L^2$  затрачивается энергия  $2\alpha L^2$  (где  $\alpha$  – поверхностная энергия), при этом в объеме  $L^3$  упругая энергия снижается на величину  $L^3\sigma^2/2(E)$ . Отсюда критический размер трещины  $L_{кр} \approx \alpha E/\sigma^2$ .

Образование критической, зародышевой трещины происходит вследствие флуктуаций; при этом в пластических материалах разрыву предшествует пластическая деформация, облегчающая образование зародышевой трещины. В хрупких материалах зародышевая трещина образуется без предварительной пластической деформации. Обычно возникает множество зародышевых трещин, которые растут и сливаются, образуя макроскопический разрыв.

товой дислокации, вышедшей в другую плоскость скольжения и повернувшей затем в другую плоскость, параллельную первичной.

Пределом прочности называют критическое напряжение  $\sigma_p$ , при котором происходит разрыв материала. Теоретическое значение  $\sigma_p$  идеального кристалла оценивают как напряжение, при котором наступает разрыв всех межатомных связей на поверхности разрыва. Такая оценка дает значение  $\sigma_p \sim 0,1 E$  (где  $E$  – модуль упругости). Обычно экспериментальный предел прочности на несколько порядков ниже. Это

## 1.4. Процессы переноса. Транспортные свойства твердых тел

### 1.4.1. Электропроводность

На основе представлений о квазичастицах и их статистических свойствах, а также решений кинетического уравнения проанализированы зависимости для электропроводности реальных твердых

тел: металлов (простых и переходных), полупроводников и диэлектриков, как чистых веществ, так и легированных, кристаллических, аморфных.

Концентрация квазисвободных электронов в полупроводниках настолько меньше их числа в металлах, что электропроводность последних оказывается существенно выше. В соответствии с материалами, изложенными в разд. 1.1, для данного металла при известной поверхности Ферми зависимость  $\sigma(T)$  выражается только во влиянии  $T$  на длину (или время) свободного пробега при  $E = E_F$ .

В полупроводниках  $\sigma$  невырожденного электронного газа описывается формулой  $\sigma = n_e e^2 \langle \tau \rangle / m^*$ , где  $n_e$  сильно зависит от  $T$  и наличия дефектов. При близких по порядку величины сечениях взаимодействия  $\sum_{ej}$  и концентрациях  $n_j$  рассеивателей значения  $\tau = \left( n_j \sum_{ej} v_e \right)^{-1}$  для металлов гораздо меньше, чем для полупроводников, из-за того, что скорость электронов, соответствующая  $E_F$ , гораздо выше тепловой скорости электронов полупроводников.

### Электропроводность металлов

Для металла электросопротивление складывается из вкладов рассеяния электронов на дефектах, фононах, электронах, магнонах и др.:

$$\rho = \rho_d + \rho_{ph} + \rho_e + \rho_m + \dots$$

(правило Матиссена). В металлах при высоких температурах важную роль играет рассеяние на фононах  $\rho_{ph}$ . При  $T \geq \Theta_D$  спектр фононов не меняется, а энергетический спектр электронов, переносящих ток (как и средние сечения электрон-фононного рассеяния), практически не зависит от температуры (энергии  $E_e$ ,  $E_F$ ), число же рассеивающих фононов пропорционально  $T$ , т.е. связанная с электрон-фононным рассеянием составляющая электросопротивления  $\rho_{ph} T$ . Поэтому электросопротивление часто считают пропорциональным  $T$ . Однако реальные зависимости  $\sigma = \sigma(T)$  значительно сложнее (рис. 1.75 – 1.76).

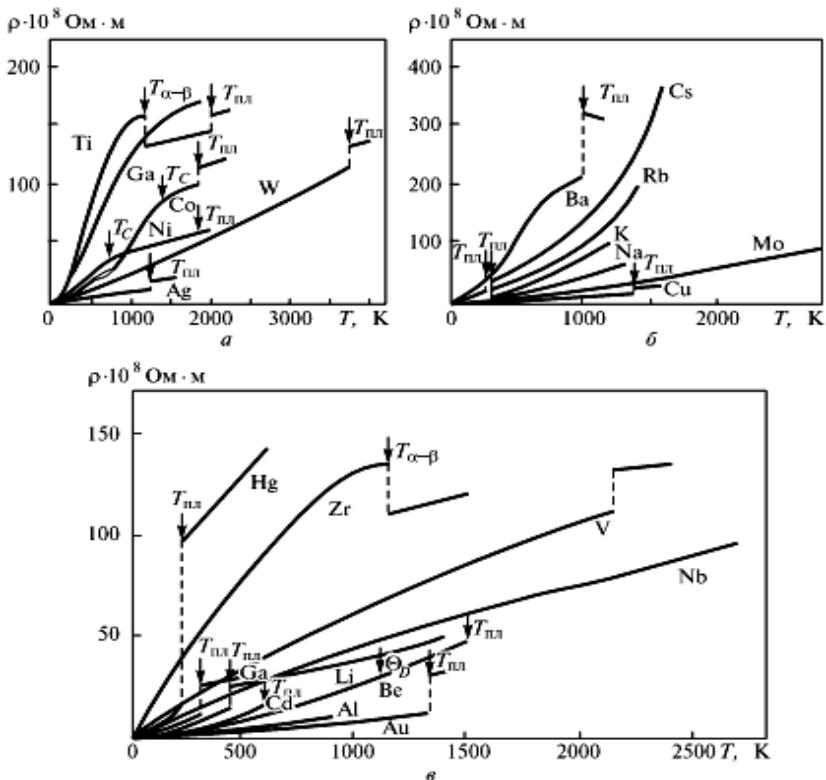


Рис. 1.75. Температурные зависимости (а – в) удельного электросопротивления металлов

Отклонения от зависимости  $\rho_{ph} T$  связаны с вымораживанием фононов при  $T < \Theta_D$  зависимостью  $\Theta_D = \Theta_D(T)$ ; другие нелинейности  $\rho = \rho(T)$  объясняются электрон-магнонным рассеянием, фазовыми переходами и др. При  $T \ll \Theta_D$  расчеты с учетом уменьшения числа фононов и изменения их спектра дают зависимость  $\sigma \sim T^{-5}$ . Точнее, определяемое электрон-фононными рассеяниями удельное электросопротивление

$$\rho = \text{const} \cdot T^5 \int_0^{\Theta_D/T} x^5 / \left[ (e^x - 1)(1 - e^{-x}) \right] dx, \quad x = \Theta_D/T \quad (1.39)$$

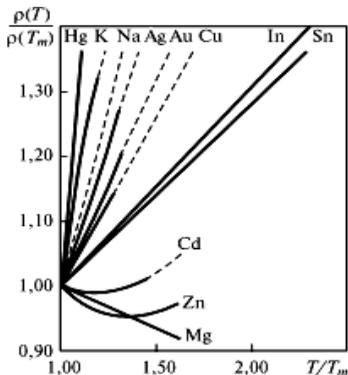


Рис. 1.76. Температурные изменения электросопротивления жидких металлов

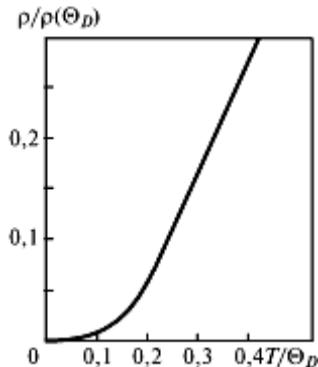


Рис. 1.77. Электросопротивление металлов при малой температуре из-за рассеяния на фонах

(соотношение Блоха – Грюнайзена), интеграл в (1.39) равен  $x^4/4$  при малых  $x$  и константе при больших значениях  $x$ ; вид зависимости  $\rho(T)/\rho(\Theta_D)$  представлен на рис. 1.77.

На  $\rho(T)$  оказывают влияние температурное расширение решетки и связанное с ним изменение  $\Theta_D$ . Поэтому при преобладании электрон-фононного рассеяния при  $T > \Theta_D$  часто имеется более быстрое, чем линейное, нарастание электросопротивления.

Рассеяние электронов в переходных металлах может быть связано с рассеянием электронов на магнонах, т.е. с разупорядочением ориентации спинов атомов, дополнительный источник беспорядка приводит к значительному увеличению  $\rho$ . Поскольку при низких температурах имеет место упорядочение, а при  $T \geq T_C$  (где  $T_C$  – температура Кюри) происходит полная хаотизация ориентации спинов, это сопротивление падает с уменьшением  $T$  при  $T < T_C$ , а при  $T > T_C$  наступает насыщение.

В чистых металлах и их сплавах при различных условиях ( $T, p$ ) могут существовать фазы, отличающиеся строением кристаллической решетки. При переходе из одной фазы в другую в значениях электропроводности наблюдаются скачки значения  $\rho$  как в одну, так и в другую сторону, причина этому – различное взаимодействие разных кристаллических структур с электронным газом, а так-

же переходы типа порядок-хаос при плавлении металла (при этом с ростом температуры и степени беспорядка  $p$  растет). На значения  $p$  влияет также «история» обработки образца (наклеп, деформация, закалка, намагничивание).

### **Сверхпроводимость**

При низких температурах  $T < T_s$  (где  $T_s$  – температура сверхпроводящего перехода) некоторые металлы, полупроводники и сплавы скачком теряют свое электросопротивление. Причина этого, согласно теории БКШ (Бардина – Купера – Шриффера), состоит в образовании куперовских пар – пар электронов, обменивающихся виртуальными фононами. Естественно, для устойчивости таких пар необходимо сильное электрон-фононное взаимодействие, т.е. в обычном, несверхпроводящем состоянии указанные вещества являются достаточно плохими проводниками (в них эффективно электрон-фононное рассеяние).  $T_s$  зависит от магнитного поля: последнее затрудняет переход в сверхпроводящее состояние. При  $T = 0$  сверхпроводимость существует только, когда  $H < H_s$ , при  $0 < T < T_s$  – когда  $H < H_s$ , последняя зависимость описывается формулой вида

$$H_s(T) = H_0 \left[ 1 - 1,06(T/T_s)^2 \right],$$

а для

$$H_s(T) = 1,73H_0(1 - T/T_s).$$

При переходе в сверхпроводящее состояние магнитное поле вытесняется из сверхпроводника (идеальный диамагнетик, *эффект Мейснера*), толщина переходного слоя на границе

$$\lambda = \lambda_0 \left[ 1 - (T/T_s)^4 \right]^{-1/2},$$

где  $\lambda_0 \cong 5 \cdot 10^{-8}$  м; магнитное поле спадает по закону  $B = B_0 e^{-x/\lambda}$  (здесь  $x$  – расстояние от границы).

### **Электропроводность сплавов металлов**

В сплавах металлов электросопротивление зависит от того, является ли данный образец твердым раствором (легирующий элемент

равномерно распределен по объему), либо он состоит из отдельных фаз с разным химическим составом. Например, отожженная сталь состоит из смеси фаз  $\alpha$ -Fe и Fe<sub>3</sub>C, а закаленная – твердый раствор углерода в  $\alpha$ -Fe. В случае смеси фаз электросопротивление обычно близко к значению  $\rho$  для наиболее проводящей фазы (для стали  $\alpha$ -Fe), хотя при выпадении плохо проводящей фазы по краям зерен такие «перегородки» могут существенно увеличить сопротивление образца.

Твердые растворы с небольшим содержанием примеси обычно представляют собой поликристаллы с определенным количеством точечных дефектов, образующих рассеивающие центры, электросопротивление при легировании растет. Это является общим правилом даже в том случае, когда в металле  $A$  с низкой электропроводностью растворяется металл  $B$  с высокой электропроводностью. Повышение  $\rho$  при образовании твердого раствора (легировании) может быть весьма значительным. Например, введение 0,2 % (ат.) As или Fe в золото приводит к росту значения  $\rho$  при температуре 0 °C в 2 раза.

Электрическое сопротивление слабоконцентрированного твердого раствора  $\rho = \rho_0 + \rho'$ , где  $\rho_0$  – сопротивление основного компонента (растворителя);  $\rho'$  – остаточное сопротивление, равное с  $\Delta\rho$  (здесь  $c$  – атомарное содержание примеси;  $\Delta\rho$  – добавочное сопротивление на 1 % (ат.) примеси); второе слагаемое в формуле не зависит от температуры.

Из закономерностей рассеяния электронов на ионизованных и нейтральных дефектах следует, что возрастание сопротивления, вызванное содержанием 1 % (ат.) различных металлов (кроме переходных), растворенных в одном и том же растворителе, зависит от валентности растворителя и растворенных металлов: чем больше различие между их валентностями, тем больше добавочное сопротивление, т.е.  $\Delta\rho = a + b(z - z_p)^2$ , где  $a$  и  $b$  – константы;  $z$  и  $z_p$  – валентности легирующего компонента и металла-растворителя (*правило Линде*). Правая часть диаграммы на рис. 1.78 (примеси непереходных металлов) является наглядным подтверждением этого правила: через соответствующие точки для  $\rho$  можно провести параболу. Левая часть иллюстрирует аномалию при

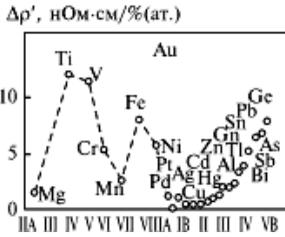


Рис. 1.78. Добавочное сопротивление на 1 % (ат.) примеси в Au

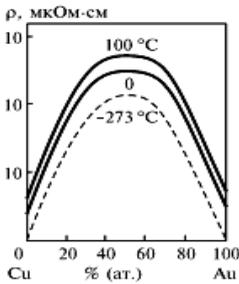


Рис. 1.79. Зависимость удельного электросопротивления сплавов Cu и Au от состава

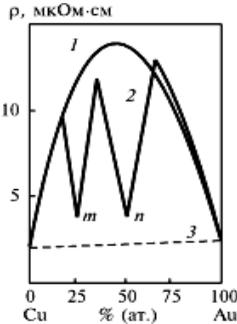


Рис. 1.80. Удельное сопротивление сплавов Cu и Au: 1 – закаленные сплавы; 2 – сплавы после отжига; 3 – зависящая от температуры часть сопротивления

растворении переходных металлов, связанную с описанными ранее рассеяниями на магнонах. Максимум сопротивления в двойных сплавах, как правило, лежит при 50 % (ат.):  $1/\sigma c(1-c)$ , где  $c$  – атомная доля одного из компонентов (рис. 1.79).

В твердых растворах ферромагнетиков и сильнопарамагнитных металлов максимальное сопротивление может соответствовать концентрации, отличной от 50 % (ат.). Например, сопротивление растворов благородных металлов и металлов переходных (при больших концентрациях) аномально высоко вследствие того, что валентные электроны могут переходить на лежащие глубже недостроенные  $d$ - или  $f$ -уровни переходных металлов, и число электронов, создающих электрический ток, уменьшается, т.е. проявляется  $s$ - $d$ - и  $s$ - $f$ -рассеяние электронов.

При стехиометрических соотношениях компонентов, соответствующих составу интерметаллического соединения, возможно образование упорядоченной кристаллической решетки: электрическое поле ионного состава решетки становится при упорядочении более симметричным, что уменьшает значение  $\rho$  (рис. 1.80).

#### Влияние наклепа

Влияние образующихся при деформации (наклепе) дислокаций и вакансий на электросопротивление чистых металлов относительно мало и при нормальных температурах не превышает 2...6 %. Роль таких дефек-

тов заметна лишь при малых температурах, где они дают вклад в остаточное сопротивление, обусловленное факторами, не зависящими от температуры.

При наклепе и отжиге твердых растворов, даже слабоконцентрированных, их электрическое сопротивление изменяется в большей степени, чем сопротивление чистых металлов в тех же условиях; еще более значительно изменение электрического сопротивления при наклепе упорядоченных твердых растворов (рис. 1.81): при наклепе порядок в расположении атомов вследствие относительного перемещения пачек скольжения и отдельных атомных плоскостей нарушается.

Пластическая деформация гетерогенных (неоднородных) структур может и несколько увеличивать электропроводность – вследствие образования ориентированной структуры с частичным разрушением перегородок из плохопроводящей фазы.

При большом количестве статистически расположенных дефектов (аморфный металл) рассеяние приобретает коллективный характер. При этом правило Матиссена может нарушаться. По электропроводности аморфные металлы ближе к жидким металлам, чем к кристаллическим.

У аморфных металлических сплавов при комнатной температуре  $\rho = (1...2) \cdot 10^{-4}$  Ом·см, что в 2–3 раза превышает  $\rho$  соответствующих кристаллических сплавов и слабо зависит от  $T$ . Это связано с особенностями структуры аморфных металлов. В кристаллических металлах длина свободного пробега электрона составляет примерно 50 периодов решетки даже при  $T$ , близкой к  $T_{пл}$ . Отсутствие дальнего порядка в металлических стеклах обуславливает малую длину свободного пробега, соизмеримую с межатомным расстоянием.

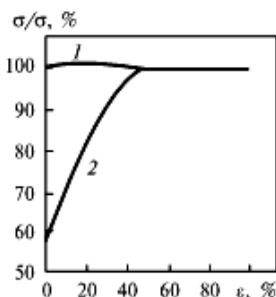


Рис. 1.81. Зависимость электрического сопротивления сплава CuAu от степени деформации  $\epsilon$ : 1 – закаленный, 2 – отожженный образец

## Электропроводность полупроводников

Электропроводность полупроводников в слабых электрических полях может быть обусловлена движением электронов в зоне проводимости и дырок в валентной зоне; также возможна проводимость по примесям  $\sigma$ :

$$\sigma = en_e \mu_e + en_h \mu_h + \sigma',$$

где  $\mu_e = e\langle\tau_e\rangle/m_e^*$ ,  $\mu_h = e\langle\tau_h\rangle/m_h^*$  – подвижности электронов и дырок.

В случае большой концентрации носителей заряда газ оказывается вырожденным; при этом подвижность почти не зависит от температуры.

В более важном случае невырожденного больцмановского распределения носителей заряда наиболее вероятна тепловая скорость носителей заряда (для определенности электронов)  $\langle v \rangle = [8k_B T / (\pi m^*)]^{1/2}$ . Зависимость длины свободного пробега  $l$  от энергии электрона  $E$  может быть аппроксимирована в виде

$$l = AT^p (E - E_C)^q, \quad A = \text{const}, \quad (1.40)$$

где  $E_C$  – граница зоны (для электронов – зоны проводимости), а числа  $p$  и  $q$  зависят от того, на чем (фононах, дефектах и т.д.) происходит рассеяние. Тогда после усреднения по энергиям можно получить

$$\mu = BT^{p+q-1/2}.$$

Такая температурная зависимость содержит фактор  $T^p$  из зависимости (1.40), фактор  $T^q$ , полученный из  $(E - E_C)^q$  при усреднении (так как среднее отклонение энергии частиц от дна зоны – порядка  $T$ ), а фактор  $T^{-1/2}$  появился в результате деления на среднюю скорость. В частности, для рассеяния на продольных акустических ( $LA$ -) фононах при  $T > \Theta_D$   $l$  пропорционально  $T^1$  (числу фононов), т.е.  $p = -1$ ,  $q = 0$  и соответствующая подвижность  $\mu = BT^{-3/2}$ . При рассеянии на ионизованных дефектах длина пробега не зависит от температуры и обратно пропорциональна резерфордскому сечению, т.е.  $(E - E_C)^2$ ,  $q = 2$ ,  $p = 0$ , и  $\mu$  пропорциональна  $T^{3/2}$ , кроме того, подвижность не зависит от знака заряда примеси. С двумя указанными (обычно основными) механизмами рассеяния на  $LA$ -фононах и ионизованных дефектах конкурируют и некоторые другие. Так, в ионных кристаллах при высоких температурах может оказаться основным рассеяние электронов на  $TO$ -фононах, тогда значение  $\mu$  пропорционально  $\exp[\hbar\omega_E / (k_B T)]$ , где  $\omega_E$  – характерная частота оптических фононов.

Значительно уменьшить подвижность электрона в полярном кристалле может образование полярона, который обладает большой  $m^*$ .

Рассеяние в полупроводниках может быть обусловлено не только ионизованной, но и нейтральной примесью; сечение рассеяния обратно пропорционально скорости электрона, так что подвижность оказывается не зависящей от  $E$  и  $T$  и примерно равной  $\mu \approx e/(20\hbar a_0 n_0)$ , где  $n_0$  – концентрация примесей. Такое рассеяние наиболее эффективно для быстрых электронов (которые меньше взаимодействуют с ионизованными примесями) при низких температурах (когда мало фононов).

Рассеяние происходит также на дислокациях (особенно если они оказываются заряженными), на границах зерен и др.

### *Электропроводность аморфных полупроводников*

Предположим, что плотность состояний имеет вид, изображенный на рис. 1.34, б. В рамках этой модели в аморфном полупроводнике различают три механизма проводимости.

1. Проводимость, связанная с носителями, которые возбуждены в нелокализованном состоянии. В этом случае перенос осуществляется аналогично тому, как это имеет место в кристаллических полупроводниках. Опыт показывает, что во многих аморфных полупроводниках ток переносится дырками. Тогда

$$\sigma = \sigma_0 \exp[-(E_F - E_V)/(k_B T)],$$

где  $\sigma \approx 100 \dots 500 \text{ Ом}^{-1} \cdot \text{см}^{-1}$  не зависит от  $T$ ; при этом значение  $\mu$  пропорционально  $T^{-1}$ .

Проводимость, связанная с носителями, возбужденными в локализованные состояния, расположенные в «хвостах» зон, т.е. вблизи  $E_A$  или  $E_B$  (см. рис. 1.34, б). Если ток переносится также дырками, то проводимость, осуществляемая в этом случае путем перескоков, определяется выражением  $\sigma = \sigma_1 \exp[-(E_F - E_B + \Delta E_1)/(k_B T)]$ , где  $E_B$  – энергия края «хвоста» флуктуационных состояний;  $\Delta E_1$  – энергия активации перескоков (прыжков); обычно  $\sigma_0/\sigma_1 \sim 10^2 \dots 10^4$ .

Прыжковая проводимость, связанная с носителями, которые совершают перескок между локализованными состояниями вблизи уровня Ферми с различными энергиями (рис. 1.82). Для прыжка в более высокоэнергетическое состояние электрон должен получить энергию  $\Delta E$  от фонона: при  $T = 0 \text{ К}$  прыжковая проводимость равна нулю.

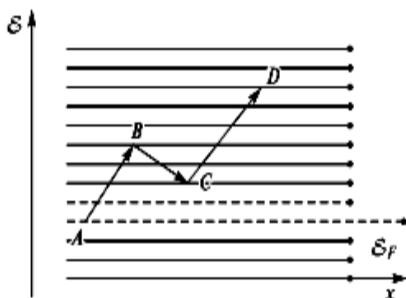


Рис. 1.82. О механизмах прыжковой (перескоковой) проводимости

В прыжковой проводимости принимают участие только электроны с энергиями в интервале порядка  $k_B T$  около уровня Ферми. Число таких электронов  $n = g(E_F)k_B T$ , где  $g(E_F)$  – плотность состояний вблизи уровня Ферми. Вероятность перескока электрона пропорциональна фактору Больцмана  $\exp[-\Delta E/(k_B T)]$ , где  $\Delta E$  – разность энергий, и зависит от перекрытия волновых функций. Отсюда прыжковая про-

водимость по локализованным состояниям вблизи уровня Ферми определяется формулой Мотта:

$$\sigma = e^2 p R^2 g(E_F).$$

Здесь вероятность перескока  $p = v_{ph} \exp[-2\alpha R - \Delta E/(k_B T)]$ ;  $v_{ph} \sim 10^{12} \dots 10^{13} \text{ c}^{-1}$  – множитель, зависящий от спектра фононов;  $\alpha$  – коэффициент, зависящий от степени перекрытия волновых функций;  $R$  – расстояние, на которое осуществляется перескок.

Средняя энергия активации перескоков  $\Delta E$  тем меньше, чем выше плотность состояний. При сильной локализации электрон перескакивает лишь на ближайшее локализованное состояние, и тогда

$$\Delta E = 1/[R^3 g(E_F)].$$

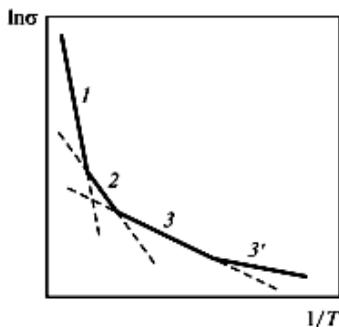


Рис. 1.83. Зависимость (области 1 – 3') электропроводности аморфного полупроводника от температуры

В области низких температур электроны с большей вероятностью перескакивают на более удаленные состояния, разность энергий между которыми меньше, чем для ближайших состояний. При этом прыжковая проводимость определяется законом Мотта:

$$\sigma = \sigma_2 \exp[-(T_0/T)^{1/4}].$$

Параметры  $\sigma_2$  и  $T_0$  зависят от  $g(E_F)$  и радиуса локализации волновых функций. Общий вид зависимости электропроводности в координатах  $\ln \sigma$  от  $T^{-1}$  с учетом всех перечисленных механизмов переноса представлен на рис. 1.83.

Область 1 соответствует переносу по нелокализованным состояниям, 2 – по состояниям в «хвостах» зон, 3 и 3' – по локализованным состояниям вблизи уровня Ферми. При этом на участке 3' выполняется закон Мотта. Если плотность состояний, связанных с дефектами, велика, то следует ожидать, что не будет такого интервала температур, где процесс 2 был бы доминирующим. В этом случае участок 3 переходит в участок 1.

### Электропроводность пористых полупроводников

У сильнолегированных полупроводников (оксидов с избытком металла) суммарный ток электропроводности складывается из тока, протекающего через объем кристаллов и контакты между ними; тока, проходящего по поверхности кристаллов; и, наконец, эмиссионного тока свободных электронов в порах оксидного слоя (рис. 1.84).

При низкой температуре электропроводность осуществляется в основном вследствие переноса электронов по приповерхностному слою кристаллов, который представляет собой, по существу, поверхностную зону вырожденного полупроводника, резко отличающуюся по своим свойствам от свойств объема. В высокотемпературной области электронный ток идет в основном по объему кристаллов (включая контакты между ними) и по порам слоя.

Электропроводность пористых слоев оксидов чрезвычайно чувствительна к условиям приготовления образца, его пористости, плотности проходящего через слой тока, наличия и состава примесей и поверхностных пленок (рис. 1.85).

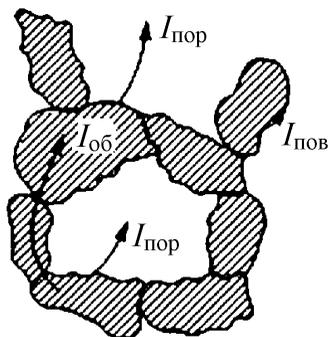


Рис. 1.84. Структура оксидного слоя:  $I_{об}$  – ток по объему кристаллов;  $I_{пов}$  – ток по поверхности;  $I_{пор}$  – ток свободных электронов в порах слоя

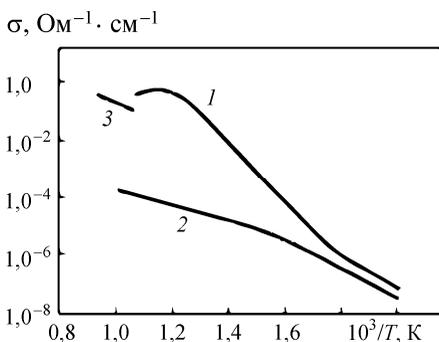


Рис. 1.85. Зависимость электропроводности ВаО от температуры: 1 – монокристалл ВаО, активированный в парах Ва; 2 – то же, обесцвеченный длительным прокаливанием в вакууме; 3 – плотная поликристаллическая пленка ВаО

### 1.4.2. Теплопроводность твердых тел

Из анализа динамики электронной, фоновой и фотонной составляющих плазмы твердого тела получены зависимости для теплопроводности металлов, полупроводников и диэлектриков.

Тепловая энергия в твердом теле передается в основном при переносе фононов, свободных электронов, фотонов.

В кинетической теории газов и газовой плазмы мощность потока тепловой энергии  $w$  при движении частиц

$$w = -\operatorname{div} \lambda \cdot \operatorname{grad} T, \quad (1.41)$$

где  $\lambda$  – коэффициент теплопроводности,

$$\lambda = \sum_j (1/3) C_{Vj} v_j l_j; \quad (1.42)$$

здесь сумма берется по сортам частиц, переносящих энергию;  $C_V$  – теплоемкость,  $v$  – скорость,  $l$  – средняя длина свободного пробега частиц. Фактор  $1/3$  связан с усреднением по направлениям движения частиц.

Длину пробега для данного сорта рассеяний  $ji$  выражают через эффективное сечение соударения  $\sum_{ji}$  и концентрацию рассеивающих центров  $n_i$ :

$$l_{ji} = 1 / \left( \sum_{ji} n_i \right).$$

Длину пробега частиц  $j$  определяют по длинам пробега  $l_j$  относительно соударений с различными сортами рассеивателей:

$$l_j = 1 / \sum_i (1/l_{ji}).$$

Эти же выражения можно использовать при описании переноса энергии в плазме твердого тела.

#### *Фоновая теплопроводность*

Фоновая теплопроводность играет примерно ту же роль, что и теплопроводность вследствие наличия тяжелых частиц в газовой плазме; она существенна в диэлектриках и полупроводниках. Соответствующий коэффициент, согласно (1.42),

$$\lambda_{ph} = C_{Vg} v_{ph} l_{ph},$$

где  $l_{ph}$  – средняя длина пробега фонона в решетке;  $v_{ph}$  – средняя скорость фононов (при  $T \ll \Theta_D$  совпадающая со скоростью звука, а при  $T \geq \Theta_D$  имеющая близкие к ней значения). В общем случае при вычислении  $l_{ph}$  следует сложить частоты соударений с фононами, дефектами структуры, поверхностью кристалла и др.

Фонон-фононное рассеяние играет основную роль в правильных кристаллах при  $T \geq \Theta_D$ . Если  $T \geq \Theta_D$ , то число фононов  $N_{ph} \sim T$ ,  $C \approx \text{const}$ , поэтому  $\lambda_{ph} T^{-1}$ . Коэффициент пропорциональности может быть оценен несколькими способами; удобным приближением является формула Дугдела и Макдональда для трехфононных процессов

$$\lambda_{ph-ph}^{-1} = 9\alpha\gamma/T(v_s C_V a),$$

где  $a$  – коэффициент линейного термического расширения;  $\gamma$  – параметр Грюнайзена;  $\bar{v}_s = (v_L + 2v_T)/3$  – средняя скорость звука (здесь  $v_L$  – скорость продольных волн;  $v_T$  – скорость поперечных волн);  $C_V$  – удельная теплоемкость при постоянном объеме.

Рассеяние фононов на электронах также дает вклад в решеточное теплосоппротивление. Оценка величины и температурной зависимости этого вклада показывает, что при высоких температурах

$$\lambda_{ph-ph}^{-1} = (e/k_B)^2 z_e^2 (\rho_{e-ph}/T),$$

где  $z_e$  – эффективное число электронов проводимости на атом;  $\rho_{e-ph}$  – электрон-фононный вклад в  $\rho$ .

Так как  $\rho_{e-ph}$  примерно пропорционально  $T$ , при высоких температурах  $\lambda_{ph-e}$  не зависит от температуры. В переходных металлах  $\lambda_{ph-e}^{-1}$  может быть соизмеримым или даже большим, чем  $\lambda_{ph-ph}^{-1}$ . При низких температурах  $\lambda_{ph-e}^{-1}$  пропорционально  $T^2$ .

Столкновения между фононами без переброса не препятствуют тепловому потоку, так как при рассеянии фононы «передают» друг другу часть переносимой энергии, а также импульса как указателя направления перемещения этой энергии. Поэтому нормальные фонон-фононные рассеяния не дают вклада в  $l_{ph}$ , а при отсутствии других механизмов рассеяния (правильный кристалл больших размеров) теплопроводность могла бы неограниченно нарастать. Такой рост  $\lambda_{ph}$  наблюдается при  $T \ll \Theta_D$ , когда процессы переброса «вымораживаются», т.е. их вероятность стремится к ну-

лю пропорционально  $\exp(-\beta\Theta/(k_B T))$ ,  $\beta = 0,5...0,7$ ; итак, при  $T \ll \Theta_D$  фонон-фононное рассеяние оказывается неэффективным. В этом случае фононы в диэлектриках и полупроводниках рассеиваются границами тела – имеет место «кнудсеновское течение фононного газа» (под  $l$  понимают характерный размер  $L'$  тела). Поскольку при  $T \ll \Theta_D$   $C_{Vg} \sim T^3$ , то  $\lambda_{ph} \sim L'T^3$ . В поликристаллических образцах длина  $l$  равна размеру монокристаллов  $L'$ . Рассеяние может происходить также на точечных дефектах (примесях, вакансиях), дислокациях, других нарушениях упорядоченности в решетке, даже на случайных распределениях различных изотопов химических элементов. В частности, в сплавах замещения периодичность решетки для фононов нарушается из-за случайного распределения атомов разной массы по эквивалентным узлам, поэтому теплопроводность решетки сплава меньше теплопроводности любого из исходных материалов. Соответствующие длины пробега часто слабо зависят от температуры, тогда при  $T \ll \Theta_D$   $\lambda_{ph} \sim T^3$  (из-за  $C_{Vg}$ ), а при  $T \geq \Theta_D$  – не зависит от  $T$ .

### Электронная теплопроводность

В металлах основную роль играет перенос энергии свободными электронами, он примерно на один-два порядка интенсивнее фононной теплопроводности (точно так же электронная теплопроводность преобладает над атомарной и ионной в сильноионизованной плазме). Хотя теплоемкость электронного газа значительно меньше, чем у решетки, скорости движения электронов существенно выше скорости звука, и результирующая теплопроводность получается большой. Поскольку и теплота, и заряд в металлах переносятся электронами, для металлов часто выполняется закон Видемана – Франца

$$\lambda = \left(\pi^2/3\right)\left(k_B^2/e^2\right)T\sigma$$

и анализируются отклонения от него, т.е. отличия числа Лоренца

$$L = \lambda/(\sigma T)$$

от

$$L = (\pi k_B)^2 / (3e^2).$$

Так, при высоких температурах с хорошей точностью  $L \approx L_0$ , т.е. выполняется закон Видемана – Франца. Если электросопротивление связано с электрон-фононными соударениями, т.е. пропорционально  $T$ , то  $\lambda_e$  не зависит от  $T$ .

Существует несколько причин, по которым может быть  $L \neq L_0$ . Прежде всего это неупругий характер рассеяния (при этом процессы рассеяния, обуславливающие электро- и теплосоппротивление, имеют различную интенсивность, и нельзя ввести единое время релаксации для электро- и

теплосопротивления), а также сложная структура электронных зон и электронного спектра, и негладкий характер  $g(E)$  в пределах теплового слоя (ширина которого порядка  $k_B T$ ). Примером проявления последнего могут служить межзонные  $s-d$ -переходы, существенно определяющие внешнее число Лоренца в переходных металлах.

Величина и вид температурных зависимостей  $L$  являются однозначными функциями плотности электронных состояний и ее производных (изменение фононного спектра учитывается зависимостью  $\Theta_D = \Theta_D(T)$ ).

Проявление неупругого характера рассеяния при  $T \geq \Theta_D$  также связано с рассеянием на магнонах. В модели Касуя  $L = L_0$  при  $T \geq T_C$  (и так как  $\rho = AT + D$ , то  $\lambda_e = L_0 / (A + DT^{-1})$ , что обеспечивает рост теплопроводности с температурой). Однако ниже точки Кюри  $L$  зависит от температуры вследствие проявления вкладов неупругого рассеяния.

В парамагнитных переходных металлах рассеяние на парамагнонах также имеет неупругий характер.  $L$  зависит от температуры и параметров широкой  $s$ - и узкой  $d$ -зон. При низких температурах теплосопротивление, обусловленное парамагнонным рассеянием, изменяется как  $\lambda_{e-ph}^{-1}$ , пропорциональное  $T$ .

При высоких температурах  $L$ , связанное с рассеянием электронов на парамагнонах, меньше  $L_0$  и стремится к нему в пределе  $T \rightarrow \infty$ :

$$(L/L_0)_{pm} \approx 1/(1 + \Delta/T),$$

( $\Delta$  определяется параметрами  $s$ - и  $d$ -зон). Отметим, что для металлов, у которых уровень Ферми лежит вблизи максимума плотности состояний, моттовская составляющая, связанная с  $s-d$ -рассеянием, приводит к увеличению  $L$  по сравнению с  $L_0$ .

При низких температурах  $L$  меняется из-за возникновения больших различий во времени релаксации для электропроводности  $\tau_\sigma$  и теплопроводности  $\tau_\lambda$ : при учете только нормальных электрон-фононных соударений  $\tau_\lambda$  пропорционально  $M\Theta_D^4/T^3$ , а  $\lambda_e - M\Theta_D^4/T^2$ , так что  $L \neq L_0$ , а пропорционально  $(T/\Theta_D)^2$ .

Примесный вклад в электронное теплосопротивление  $\lambda_{e-i}^{-1}$  – для чистых металлов при высоких температурах подчиняется закону Видемана – Франца – Лоренца:  $\lambda_{e-i}^{-1} = \rho_i / (L_0 T)$ , где  $\rho_i$  – остаточное сопротивление. С ростом  $T$  этот вклад быстро убывает и для достаточно чистых металлов при  $T \geq 0,5$  не заметен на фоне других составляющих. Экспериментальные температурные зависимости теплопроводности металлов представлены на рис. 1.86.

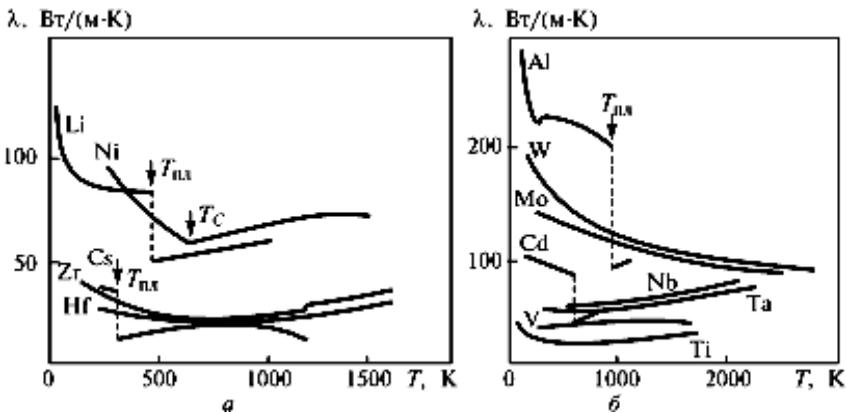


Рис. 1.86. Температурные зависимости теплопроводности различных металлов

*Фотонная теплопроводность в диэлектриках при высоких температурах*

Перенос излучения, так же как и в газовой плазме, в общем случае не носит характера теплопроводности и может быть представлен в виде (1.41) только при малой (по сравнению с размером тела  $L'$ ) средней по спектру фотонов длине пробега фотона  $\langle l_v \rangle$ ; в этом случае

$$\lambda_v = (16/3)n_1^2 \sigma_{SB} T^3 \langle l_v \rangle, \quad (1.43)$$

$$\langle l_v \rangle = \int_0^{\infty} l_v G [hv/(k_B T)] d[hv/(k_B T)],$$

$$G(y) = 15y^4 \exp(-y) / \{ \pi^4 [1 - \exp(-y)]^2 \}.$$

Из-за резкой спектральной зависимости  $l_v$  закон усреднения существенно влияет на результат, при  $l_v \ll L'$  поток  $S_v$  растет при увеличении длины пробега  $l_v$ . При оптической прозрачности  $l_v \gg L'$ , когда каждый фотон выходит за пределы тела, более применимо приближение радиационного охлаждения

$$w = 4\aleph_1 \sigma_{SB} T^4; \quad (1.44)$$

здесь усредненный по Планку обратный пробег излучения

$$\aleph_1 = \int (1/l_v) G_1 [hv/(k_B T)] d[hv/(k_B T)],$$

где  $G_1(y) = 15y^3 / (\pi^4 (e^y - 1))$ . При  $l_v \gg L'$  перенос энергии растет при уменьшении  $l_v$ . Из (1.41), (1.43), (1.44) следует, что (при постоянных  $l_v$ )

поток энергии пропорционален  $T^4$ . Максимальные значения  $S_v$  достигаются при  $l_v \approx L'$ . Закономерности формирования оптического спектра  $l_v$  обсуждаются ниже.

### 1.4.3. Термоэлектрические, гальваномагнитные и термомагнитные явления

Кинетические явления в кристаллах, обусловленные изменением функции распределения электронов при одновременном воздействии нескольких возмущающих факторов – электрического и магнитного полей и градиента температуры, – по типу действующих сил подразделяют на три основные группы: термоэлектрические, гальваномагнитные и термомагнитные.

#### *Термоэлектрические явления*

Термоэлектрические явления объединяют группы физических процессов, обусловленных взаимными превращениями энергии теплового движения и энергии электрического тока. К ним относят обычно три обратимых эффекта – Зеебека, Пельтье и Томсона.

#### *Эффект Зеебека*

Эффект Зеебека заключается в том, что в электрической цепи, состоящей из последовательно соединенных элементов, изготовленных из различных материалов, возникает термоЭДС, если места контактов поддерживаются при неодинаковых температурах. Если при  $\mathbf{j} = 0$  в однородном образце  $\nabla_r T \neq 0$ , то возникает поле напряженностью

$$\mathbf{E} = (1/(eT))(K_0^{-1}K_1)\nabla T = Q\nabla T. \quad (1.45)$$

Если соединить два различных металла (полупроводника)  $A$  и  $B$  в замкнутую цепь и поддерживать контакты  $1$  и  $2$  под разными температурами, то в цепи возникает ЭДС  $\varphi$ :

$$\varphi = \int_0^1 E_B dx + \int_1^2 E_A dx + \int_2^0 E_B dx = \int_1^2 (Q_A - Q_B) dT.$$

На количественные характеристики эффекта Зеебека влияет изменение распределения температуры, сечений соударений, градиентов температуры и др.

### Эффект Пельтье

Эффект Пельтье, обратный эффекту Зеебека, состоит в том, что при прохождении тока в цепи с проводниками из разнородных материалов в местах контактов помимо выделения джоулевой теплоты поглощается или выделяется (в зависимости от направления тока и типа вещества) некоторое количество теплоты  $Q_n = \Pi I t$ , где  $\Pi$  – коэффициент Пельтье;  $I$  – сила тока;  $t$  – время. Если вдоль подобной цепи поддерживается постоянная температура,  $\nabla T = 0$ , и под действием внешней ЭДС протекает ток  $j$ , то

$$w = eK_1 E, \quad j = e^2 K_0 E, \quad (1.46)$$

т.е. 
$$w = (1/e) K_0^{-1} K_1 j = \Pi j. \quad (1.47)$$

С учетом определения  $K_n$ , легко заключить, что  $\Pi$  зависит от материала и состояния (температуры) проводника, т.е. в ветви  $A$  течет поток теплоты  $\Pi_A \mathbf{j}$ , в ветви  $B - \Pi_B \mathbf{j} \neq \Pi_A \mathbf{j}$ . На контактах поток теплоты должен быть непрерывен; следовательно, количество теплоты, равное  $(\Pi_A - \Pi_B)$ , выделяется в единицу времени на одном контакте и поглощается на другом. В нагреве одного контакта и охлаждении другого и состоит эффект Пельтье. Из (1.45) и (1.47) видно, что

$$\Pi = Q T. \quad (1.48)$$

### Эффект Томсона

При наличии в цепи одновременно и электрического тока, и потока теплоты в объеме однородного проводника на фоне выделения джоулевой теплоты при  $\mathbf{j} \nabla_r T < 0$  поглощается, а при  $\mathbf{j} \nabla_r T > 0$  выделяется количество теплоты

$$q = \mathbf{j} \int_{T_1}^{T_2} \tau(T) dT, \quad (1.49)$$

где  $\tau = \tau(T)$  – коэффициент Томсона. Из (1.45), (1.49) следует связь  $\tau$  и  $Q$ :

$$\partial Q / \partial T = -\tau / T. \quad (1.50)$$

Коэффициент Томсона имеет физический смысл удельной теплоемкости носителей электрического тока: количество теплоты поглощается, если потоки теплоты (из-за теплопроводности и носителей заряда) противоположны, и выделяется, если они сонаправлены, т.е. поток носителей заряда как бы сносит тепловое распределение с собой.

### *ТермоЭДС электронного газа*

Значение термоЭДС (и связанных с  $Q$  коэффициентов Пельтье (1.48) и Томсона (1.50)) зависит от особенностей рассеяния носителей заряда и дисперсионных зависимостей вблизи  $E = E_F$ . Учитывая выражения для  $\sigma$  и термоЭДС  $Q$  через интегралы  $K_n$  (1.45), (1.46) и определение  $K_n$ , получают связь между  $Q$  и  $\sigma$  в виде

$$Q = \pm \pi^2 / 3 (k_B^2 T / e) \{ \partial [\ln \sigma(E)] / \partial E \} |_{E=E_F}. \quad (1.51)$$

В зависимости от знака носителей заряда может быть взят плюс или минус;  $\sigma = \sigma(E)$  рассматривается как функциональная зависимость  $\sigma$  от энергии  $E$ , соответствующей поверхности  $S$ :

$$\sigma = \sigma(E) = \left[ 1 / (4\pi^3) \right] (e^2 \tau / \hbar) \int l(E) dS(E).$$

Непосредственно выражение (1.51) применимо при  $T \geq \Theta_D$ . Аппроксимируя зависимость  $\sigma = \sigma(E)$  вблизи  $E = E_F$  степенной зависимостью

$$\sigma = \text{const} \cdot E^x,$$

из (1.51) получают

$$Q = \left( \pi^3 / 3 \right) k_B^2 T x / (e E_F). \quad (1.52)$$

В зависимости от особенностей рассеяния и строения электронного спектра вблизи  $E = E_F$  величина  $x$  может быть положительной или отрицательной. В переходных металлах энергия Ферми лежит в области  $d$ -полос, дающих основной вклад в плотность со-

стояний  $d\zeta/dE$  ( $E_d - E_F$ ). В терминах квазичастиц  $m^* < 0$  (рассматривается верх разрешенной зоны, см. разд. 1.2), т.е. носители заряда ведут себя как дырки. Если считать, что особенности поведения  $\sigma(E)$  определяются особенностями энергетической зависимости в  $d\zeta/dE$ , то с помощью (1.51) можно получить

$$Q = -(\pi^2/6)k_B^2 T / (e(E_d - E_F)). \quad (1.53)$$

Поскольку  $E_d - E_F \ll E_F$ , для переходных металлов значение  $Q$  больше, чем для простых.

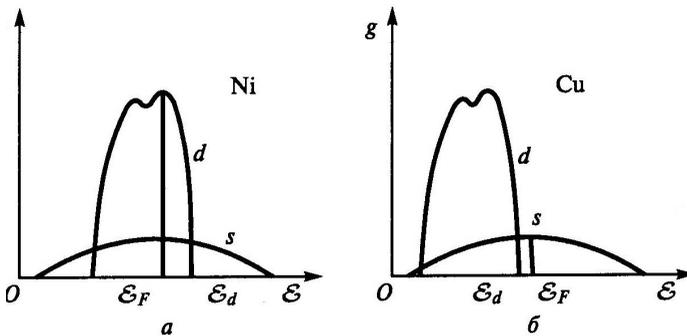


Рис. 1.87. Плотность состояний никеля (а) и меди (б)

Выражение (1.53), как и (1.52), получено в достаточно грубых приближениях и может лишь с осторожностью применяться в количественных расчетах; в частности, оно не точно при температурах меньше температуры магнитного упорядочения. Однако (1.53) качественно верно описывает влияние уровня Ферми на  $Q$ , в частности, для сплавов переходных и непереходных металлов, например Cu-Ni-сплавов. Размеры и электроотрицательность атомов Cu (атомный номер 29) и Ni (28) очень близки, и они образуют гомогенные твердые растворы замещения при любых концентрациях. Однако в среднем 0,6 электронов на атом Ni в чистом металле уходят из  $d$ -оболочек и находятся в  $s$ -состоянии, оставляя 0,6 дырок в  $d$ -оболочке на атом, т.е. энергия Ферми лежит ниже  $E_d$ , у чистой меди же каждому атому соответствует один свободный  $s$ -электрон, а  $d$ -оболочка полностью занята (рис. 1.87). В сплаве часть электронов меди заполняют дырки в  $d$ -оболочках никеля, приближая  $E_F$  к

$E_d$ . Согласно (1.53), это должно вызвать рост термоЭДС, что и наблюдается в эксперименте. Максимум на зависимости  $Q$  от концентрации связан с конкуренцией роста  $Q$ , согласно (1.53), и влиянием разбавления переходного элемента с увеличением концентрации Cu.

На рис. 1.88 показаны экспериментальные термоЭДС для ряда металлов.

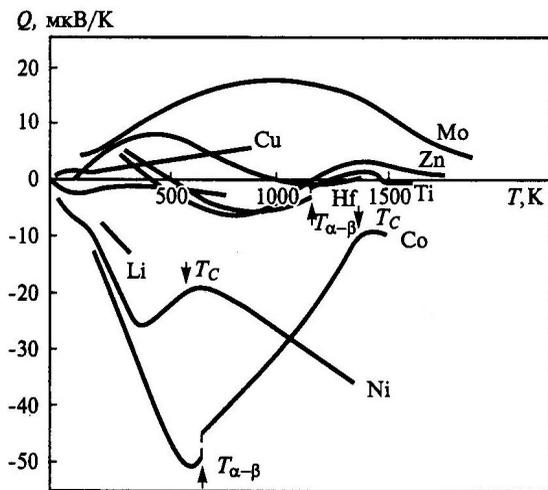


Рис. 1.88. Температурная зависимость абсолютной термоЭДС некоторых металлов

Электронная термоЭДС в полупроводниках имеет гораздо большие значения, чем в металлах, так как электронный газ не вырожден, и температурные изменения функции распределения значительнее.

### Решеточная термоЭДС

Наряду с потоком заряда и электронной термоЭДС может проявляться поток теплоты, переносимый «увлеченными» фононами – решеточная термоЭДС. Причина «увлечения» фононов – передача им импульса при электрон-фононных рассеяниях, преимущественно в направлении дрейфа носителей заряда, в ходе нормальных процессов, для которых суммарный импульс сохраняется. Эту кар-

тину существенно нарушают процессы переброса, при которых фононы испускаются более всего в направлении, противоположном направлению тока носителей заряда.

Особенно значительна роль переброса в металлах, так как в вырожденном электронном газе переходы с малым изменением энергии происходят при начальном и конечном состояниях электрона вблизи поверхности Ферми, которая может быть близка к границам зоны Бриллюэна, так что относительно малого импульса фонона достаточно для выхода за пределы этой зоны, т.е. для осуществления процесса переброса.

В невырожденных полупроводниках при  $T \ll \Theta_D$  возбуждаются акустические фононы также с малыми волновыми числами, и процессы переброса происходят редко. В полупроводниках термо-ЭДС значительно выше, чем в металлах. Знак решеточной термо-ЭДС совпадает со знаком носителя заряда.

### *Гальваномагнитные явления*

Гальваномагнитные явления – это совокупность эффектов, связанных с воздействием магнитного поля на электрические свойства твердых тел.

Электропроводность анизотропного кристалла является в общем случае тензором, и гальваномагнитные явления можно трактовать как изменение этого тензора под действием магнитного поля, приводящего к искривлению траекторий электронов между столкновениями с радиусом кривизны  $r = m^* v_{др} / (eB_0)$ . Особенно сильно сказывается влияние магнитного поля при критических значениях индукции  $B_0$ , когда радиус  $r$  становится величиной одного порядка с длиной свободного пробега  $l_e$ . В этом случае искажение траектории настолько велико, что изменяется механизм рассеяния электронов. Критическая напряженность поля для большинства веществ очень высока ( $H_{кр} \approx 10^7 \dots 10^{11}$  А/м), и в реальных полях ( $H = 10^6$  А/м) искривление траекторий электронов незначительно. Однако у ряда веществ (например, в Вi) значение  $H_{кр}$  значительно ниже и магнитное поле резко изменяет тензор электропроводности.

Гальваномагнитные явления подразделяют на продольные и поперечные в зависимости от того, в каком направлении они проявляются относительно вектора электрического поля. К поперечным гальваномагнитным явлениям относят эффекты Холла и Эттингаузена, к продольным – изменение продольного сопротивления в магнитном поле и эффект Нернста.

### Эффект Холла

Эффект Холла заключается в возникновении поперечного электрического поля  $\mathbf{E}_H$  в кристалле, по которому протекает ток  $\mathbf{I}$ , при помещении его во внешнее магнитное поле  $\mathbf{B}_0$ , перпендикулярное  $\mathbf{I}$ . Поле  $\mathbf{E}_H$  перпендикулярно  $\mathbf{I}$  и  $\mathbf{B}_0$ , а его напряженность пропорциональна силе тока и индукции магнитного поля.

Физическую природу эффекта Холла легко понять с помощью кинетического подхода, анализируя движение свободных электронов в скрещенных электрических и магнитных полях (как в газовой плазме). Известно, что в поле на движущуюся частицу действует сила Лоренца  $\mathbf{F}_L = e[\mathbf{B}, \mathbf{v}]$ , перпендикулярная скорости. Чтобы скомпенсировать вызванное этой силой отклонение носителей заряда, требуется наложение поперечного электрического поля

$$\mathbf{F}_H = [\mathbf{B}, \mathbf{v}] = [1/(ne)][\mathbf{B}, \mathbf{j}], \quad (1.54)$$

возникающего в результате появления нескомпенсированных зарядов на поверхности тела. Две указанные поперечные силы компенсируют одна другую, и носители тока движутся под действием лишь продольного электрического поля.

ЭДС Холла обратно пропорциональна концентрации  $n$  носителей тока, поскольку при той же плотности тока с падением  $n$  растет средняя скорость, т.е. увеличивается относительное влияние магнитных сил.

Имеется и качественное, и количественное соответствие между проявлениями эффекта Холла в плазме твердого тела и в газовой плазме: формула (1.54) применима в обоих случаях. Если  $\mathbf{B} \perp \mathbf{j}$ , то поперечное поле (поле Холла)  $\mathbf{F}_H = e\tau\mathbf{j}\mathbf{B}/(m^*\sigma) = R\mathbf{j}\mathbf{B}$ , коэффициент Холла в данном приближении  $F_H = e\tau/(m^*\sigma) \approx 1/(ne)$ . При вы-

ходе за рамки модели свободных электронов появляется зависимость  $R$  от особенностей поверхности Ферми и индукции магнитного поля, наиболее заметная при низких температурах. В ферромагнетиках ЭДС Холла определяется суммой  $R_0 B + R_s I$ , где  $R_0$  – обычный, или нормальный, коэффициент Холла;  $B$  – индукция магнитного поля;  $R_s$  – аномальный коэффициент Холла;  $I$  – намагниченность образца. При комнатных температурах в ферромагнетиках  $R_s$  на один-два порядка больше  $R_0$  и существенно зависит от температуры (часто наблюдается корреляция между поведением  $R_s$  и квадратом электросопротивления). Ниже приведены данные для коэффициента Холла в парамагнитной области.

У металлов значение  $R$  имеет порядок  $10^{10}$  м<sup>3</sup>/Кл, эффект Холла проявляется слабо, аномально большие значения постоянной Холла имеют металлы V группы (Bi, Sb, As) – до  $10^{-6}$  мЗ/Кл. У полупроводников  $R$  достигает  $10^2$  м<sup>3</sup>/Кл. При наличии носителей заряда обоих знаков  $R = (A/e)(n_h \mu_h^2 - n_e \mu_e^2) / (\mu_h n_h + \mu_e n_e)^2$ .

При рассмотрении эффекта Холла в полупроводниках следует учитывать зависимость длины пробега  $l$  электронов от энергии (так как перенос осуществляется электронами с широким спектром  $E$ ):

$$R = \pm A/(en),$$

где  $A$  – постоянная, учитывающая энергетическую зависимость  $l$ ,  $A \sim 1$  для вырожденного газа, а для невырожденного

$$A = \frac{3}{4} \sqrt{\pi} \Gamma(2r + 3/2) / [\Gamma(r + 2)]^2;$$

здесь  $\Gamma$  – гамма-функция,  $r$  имеет то же значение, что и в (1.54); так, для рассеяния на ионах ( $r = 2$ )  $A = 1,93$ .

Плотность тока связана с параллельной составляющей электрического поля:

$$\mathbf{E}_{\parallel} = \mathbf{j} / \sigma.$$

Для дырок справедливы аналогичные закономерности, но из-за другого знака заряда (или  $m_h^*$ ) направление ЭДС Холла противоположно.

## Эффект Эттинсгаузена

Эффект Эттинсгаузена заключается в появлении поперечного градиента температуры при протекании тока  $I$  в магнитном поле  $\mathbf{B} \perp \mathbf{I}$ . Причина в том, что реальный электронный газ в кристалле имеет некоторое распределение по скоростям, на более быстрые электроны действует большая отклоняющая сила магнитного поля, и они могут преодолеть силы поперечного электрического поля Холла. Медленные электроны, на которые действует меньшая отклоняющая сила Лоренца, не могут преодолеть силу  $e\mathbf{E}_H$  и смещаются к противоположной стенке образца. В результате происходит разделение электронов в поперечном направлении в зависимости от их скорости, и вследствие обмена энергией электронов с решеткой (быстрые электроны отдают энергию, а медленные увеличивают ее за счет решетки) в поперечном направлении появляется градиент температуры  $\nabla T = P[\mathbf{I}, \mathbf{B}_0]$ , где  $P$  – коэффициент Эттинсгаузена. Поперечный перепад температур невелик (обычно он не превышает долей градуса).

При помещении вещества в магнитное поле изменяется продольная составляющая электропроводности. Это явление называют магнитосопротивлением (*магниторезистивным эффектом, эффектом Гаусса*). Магнитное поле вызывает искривление траекторий электронов проводимости, и если вдоль искривленной траектории длина свободного пробега останется прежней, то в направлении электрического поля она уменьшится, а следовательно, уменьшится и электропроводность; ее изменение связано с индукцией магнитного поля и подвижностью носителей заряда соотношением  $\Delta\sigma/\sigma = -C(\mu_n B_0)^2$ . Магнитосопротивление в отличие от эффекта Холла является четной функцией относительно магнитного поля (изменение направления вектора  $\mathbf{B}_0$  на противоположное не влияет на  $\Delta\sigma$ ). Коэффициент  $C$  определяется механизмом рассеяния носителей заряда и равен  $(9/16)\pi$  для ионных кристаллов. Для примесных полупроводников  $C = \pi/10$  в атомных решетках и  $C = 0,96$  в ионных. Измеряя зависимость  $\Delta\sigma$  от  $B_0$ , определяют подвижность носителей заряда.

Значение  $\Delta\sigma/\sigma$  для металлов невелико, однако у Вi это отношение может достигать 200 %, и по его изменению измеряют магнитные поля. Для полупроводников отношение  $\Delta\sigma/\sigma$  изменяется в широких пределах в зависимости от их типа (от средних значений  $10^{-2} \dots 10^{-10}$  до нескольких единиц). В полях напряженностью выше  $10^6$  А/м зависимость  $\Delta\sigma/\sigma$  от  $\mathbf{V}_0$  отклоняется от квадратичной, и  $\Delta\sigma/\sigma$  пропорционально  $V_0^m$ , где  $1 < m < 2$ .

Распределение электронов по скоростям сказывается на степени их смещения магнитным полем. Медленные электроны сильно «закручиваются» и не могут пройти вдоль всего образца в отличие от более быстрых электронов, создается продольный градиент температуры  $\partial T/\partial x$ , пропорциональный  $V_{0y}^2 I_x$  (*эффект Нернста*).

### *Термомагнитные явления*

К термомагнитным явлениям относят эффекты, возникающие при воздействии магнитного поля на вещество, в котором существует градиент температуры. Здесь также выделяют продольные и поперечные эффекты (по отношению к направлению градиента температуры).

В кристалле с разными температурами граней встречные диффузионные потоки носителей заряда отклоняются магнитным полем в разные стороны, а поскольку они имеют разные тепловые скорости, появляется поперечный градиент температуры (*эффект Риги – Ледюка*). Кроме того, более быстрые электроны, движущиеся от горячей грани, слабее отклоняются полем, тогда как движущиеся им навстречу от холодной грани медленные электроны получают большее смещение, создавая поперечный градиент концентрации и поперечное электрическое поле (*поперечный эффект Нернста – Эттинсгаузена*). Так как искривление траекторий в магнитном поле приводит к уменьшению длины свободного пробега вдоль образца, уменьшается и продольная составляющая электронной теплопроводности (*эффект Маджи – Риги – Ледюка*). Искривление траекторий сказывается также на средней энергии электронов, в результате изменяется термоЭДС (*продольный эффект Нернста – Эттинсгаузена*).

## 1.5. Быстрые частицы в твердом теле

### 1.5.1. Движение быстрых электронов в твердом теле

В твердом теле надтепловые ( $E_e = mv^2/2 \gg k_B T$ ) электроны движутся как квазичастицы, испытывая упругие рассеяния, изменяющие лишь направление скорости; ионизирующие неупругие столкновения, порождающие электрон-дырочные пары, т.е. увеличивающие число квазисвободных электронов (вторичных); неупругие столкновения, не приводящие к образованию свободных носителей заряда. Электроны также могут рекомбинировать с дырками или заряженными дефектами и выходить за пределы твердого тела. Торможение электрона при взаимодействии с твердым телом описывают длиной потери энергии:

$$(-dE/dx) = E/l.$$

#### *Электрон-электронные и электрон-плазмонные неупругие соударения. Валентные оболочки металлов*

При движении по плотному электронному газу электрон рассеивается на электронах в парных соударениях, а также порождает коллективные элементарные возбуждения – плазмоны (рис. 1.89). Для относительно невысоких энергий  $E_1/E_F \leq 25$  (т.е.  $E_1 < 100$  эВ)

$$l_e^{-1} = 1,47(E_F \beta)^{3/2} E_1 (E_1 - E_F)^2 / \left\{ (m_e^*)^{1/2} \left[ \text{tg}(1/\beta^{1/2}) \right]^{-1} + \beta^{1/2} / (1 + \beta) \right\},$$

$$\beta = [4/(9\pi)]^{1/3} r_s / \pi$$

( $l_e^{-1}$  – в нанометрах;  $E_F, E_1$  – в электрон-вольтах); здесь  $r_s$  – среднее расстояние между электронами, выраженное в единицах радиуса Бора,  $(4\pi/3)(r_s a_0)^3 n_e = 1$ . При энергиях  $E_1 > E_F + E_{pl}$  (где  $E_{pl} = \hbar\omega_{pl}$  – энергия плазмона) длина пробега электронов при генерации плазмонов

$$l_{pl} = 0,2a_0 E_1 / E_{pl} \left\{ \ln \left[ (E_F + E_{pl})^{1/2} - E_F^{1/2} \right] - \ln \left[ E_1^{1/2} - (E_1 - E_{pl})^{1/2} \right] \right\}.$$

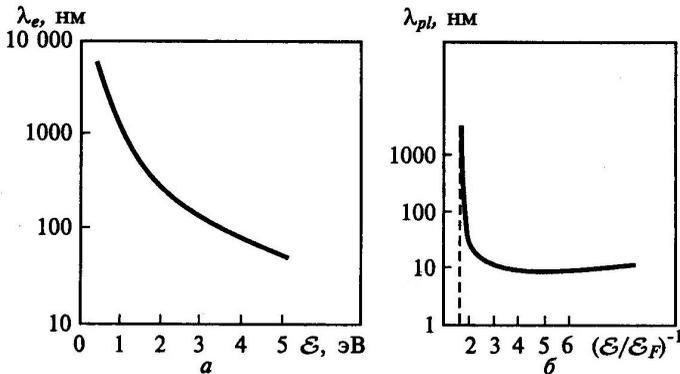


Рис. 1.89. Длина взаимодействия электрон-электрон (а) и электрон-плазмон (б) в Al в зависимости от энергии электрона

### *Возбуждение внутренних электронных оболочек. Формула Бора. Закон торможения Бете*

Если электрон имеет энергию, достаточную для возбуждения внутренних оболочек, то торможение его связано с парными и коллективными возбуждениями внутренних электронов, т.е. с рождением электрон-дырочных пар (новых свободных электронов) и с возбуждением плазмонов по электронам этих оболочек (рис. 1.90). Анализ приводит к *формуле Бора*:

$$-dE/dx = \left(4\pi n_2 / v_1^2\right) \sum_{n,l} N_{nl} \ln\left(2v_1^2 / I_{nl}\right), \quad (1.55)^{*1}$$

где  $n_2$  – концентрация атомов;  $N_{nl}$  – число электронов на оболочке с главным и орбитальным квантовыми числами  $n$  и  $l$ ;  $I_{nl}$  – энергия ионизации для этой оболочки, суммирование проводят по оболочкам с  $I_{nl} < 4(mv_1^2/2)$  (т.е. при увеличении  $v_1$  во взаимодействие последовательно включаются все новые оболочки). Формула Бора пригодна также для описания торможения вследствие ионизации валентных оболочек и возбуждения плазмонов в полупроводниках и диэлектриках при  $E_p \geq \Delta E_g$ . При  $E > I_{nl}$  формула Бора неточна,

<sup>1</sup>Звездочкой помечены формулы, записанные в атомной системе единиц.

так как не учитывает индивидуальных особенностей строения оболочки  $nl$ ; уточнение связано либо с подробными квантово-механическими расчетами, либо с использованием полуэмпирических зависимостей.

В соответствии с моделью атома Томаса – Ферми, число электронов с  $v < v_l$  равно  $n(v_l) = Z_2^{1/3} v_l^*$ , где  $Z_2$  – заряд ядра атома. Из (1.55) следует выражение для  $dE/dx$ :

$$-dE/dx = 2\pi n_2 4Z_2^{1/3} / v_l. \quad (1.56)^*$$

При высоких энергиях электронов суммирование в (1.55) проводят по всем оболочкам; в этом случае (если среднюю энергию ионизации атома  $I_i$  определить из формулы  $Z_2 \ln I_i = \sum_{nl} Z_{nl} \ln I_{nl}$ )

из (1.56)\* следует формула Бете:

$$-dE/dx = \left[ 4\pi n_2 Z_2 / (v_l^2) \right] \ln(2v_l^2 / I_i). \quad (1.57)^*$$

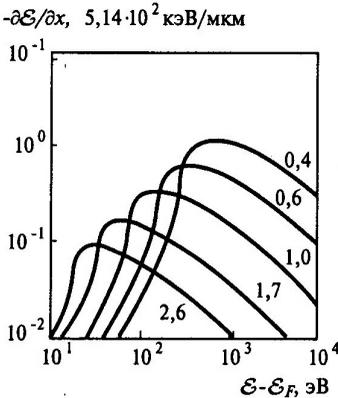


Рис. 1.90. Зависимости тормозной способности электрона от энергии для различной плотности электронного газа  $n$

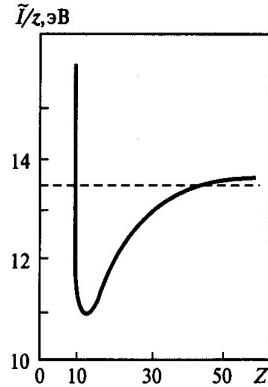


Рис. 1.91. Полуэмпирическая зависимость  $I_i$  от заряда  $Z$

Для оценки  $I_i$  (эВ) используют полуэмпирическую зависимость Блоха  $I_i \approx 13,6 Z_2$  или экспериментальные данные (рис. 1.91). Если ввести безразмерные параметры

$$E' = 2mv_l^2 / I_i, K = 4n_2 Z_2 / [v_l^2 (I_i/4)], \xi = Kx, \quad (1.58)^*$$

то формулу Бете – Блоха можно записать в универсальном для всех веществ виде:  $dE'/d\xi = -\ln E'/E'$ .

### Релятивистские электроны

Для релятивистских электронов ( $E \gg 1$  МэВ) выражение (1.57) преобразуется к виду (формула Фано):

$$-dE/dx = (4\pi/(v_1^2)) n_2 Z_2 \{ \ln [(v_1^2/E)/(2I_i^2)] + \ln [1/(1-\beta^2)] \} - \\ - \left[ 2(1-\beta^2)^{1/2} - 1 + \beta^2 \right] \ln 2 + (1-\beta^2) + \left[ 1 - (1-\beta^2)^{1/2} \right]^2 / 8, \\ \beta = v_1/c = v_1/137. \quad (1.59)^*$$

### Электрон-ионное взаимодействие.

#### Дифракция электронов на ионах в кристаллах

Дебройлевская длина волны при  $E_e < 10$  МэВ  $\lambda_D \geq a$ , поэтому при движении электронов возникают квантово-механические дифракционные эффекты: вследствие брэгговского отражения и интерференции с падающей волной в кристалле образуются стоячие волны (рис. 1.92) с пространственно неравномерной плотностью вероятности нахождения высокоэнергетичных электронов  $|\psi_1|^2$ . Суммарная плотность  $|\psi_2|^2$  электронов тела, валентных и внутренних, также пространственно неоднородна (она существенно выше вблизи ядер).

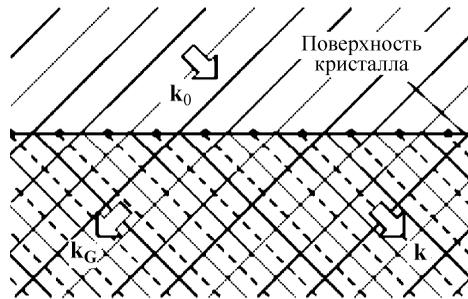


Рис. 1.92. Фазовое соотношение для двух возбуждаемых в кристалле волн (сплошные и штриховые линии в направлении  $k_G$  находятся в противофазе)

Поэтому в тех случаях, когда минимумы  $|\psi_1|^2$  соответствуют узлам решетки, эти электроны при движении по кристаллу встречают гораздо меньшее сопротивление из-за электрон-электронного рассеяния. В этом и состоит причина *каналирования электронов*, т.е. ано-

мально больших длин пробега электронов в определенных направлениях распространения. Интерференционные эффекты приводят к появлению немонотонной зависимости интенсивности прохождения пучка при изменении длины образца (рис. 1.93).

### Каналирование релятивистских электронов

При  $E_e > 10$  МэВ  $\lambda_D < a$  быстрые электроны можно рассматривать как классические частицы и может происходить такое же каналирование, как и при движении положительных ионов (см. ниже), но вместо отталкивания от цепочек ионов происходит притяжение. В результате проекции на поперечную плоскость траекторий электронов, движущихся под малыми углами к направлениям цепочек атомов в кристаллах, совершают движение по траекториям, напоминающим спирали или синусоиды (рис. 1.94); при этом столкновения происходят значительно реже, чем при хаотическом расположении атомов или при движении под произвольными углами к кристаллографическим направлениям.

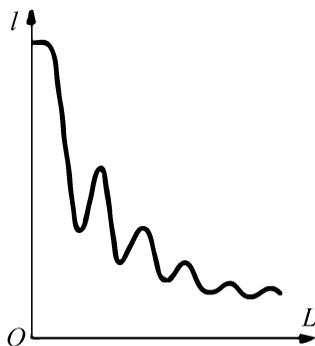


Рис. 1.93. Зависимость интенсивности  $I$  электронного пучка от толщины  $L$  в кристалле клинообразной формы

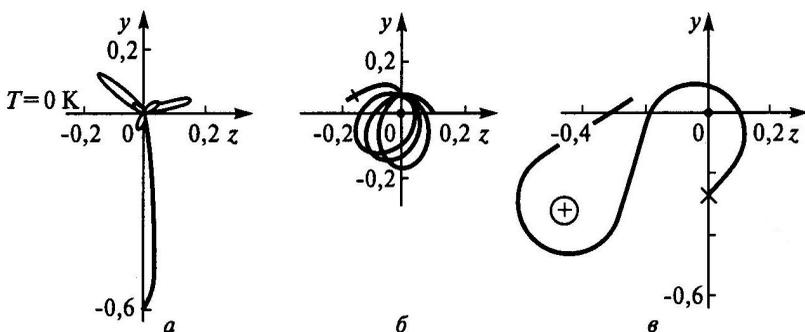


Рис. 1.94. Проекция траектории каналирования электронов с энергией 10 МэВ вдоль оси  $\langle 110 \rangle$  Cu: для малого ( $a$ ), среднего ( $б$ ) и большого ( $в$ ) угловых моментов

## Электрон-фотонное взаимодействие

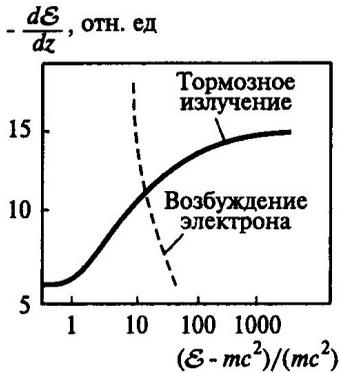


Рис. 1.95. Энергетические зависимости сечений одноэлектронного возбуждения и тормозного излучения Pt

При движении быстрых электронов в твердом теле испускаются фотоны (рентгеновские и гамма-кванты). Причина этого, во-первых, в фоторекомбинации электронов и дырок, образовавшихся при ионизации внутренних оболочек, и, во-вторых, в отличии движения электронов от прямолинейного равномерного; при ускорении заряженных частиц, согласно классической электродинамике, испускается электромагнитное излучение, мощность которого

$$S = \left[ \frac{2}{3c^3} \right] \left( \frac{\partial^2 \mathbf{r}}{\partial t^2} \right)^2. \quad (1.60)^*$$

При  $E \ll mc^2$  тормозная способность с учетом энергии на тормозное излучение

$$-dE/dx = (16/3)n_2EZ_2^2/137, \quad (1.61)^*$$

где  $a_0$  – радиус Бора. При  $E \gg mc^2$

$$-dE/dx = 4n_2EZ_2^2/(137) \left\{ \ln \left[ \frac{2E}{(c^2)} \right] - 1/3 \right\}. \quad (1.62)^*$$

При  $E \geq 20mc^2 \sim 10$  МэВ тормозная способность, связанная с излучением, становится больше одноэлектронного возбуждения (рис. 1.95).

### Тормозная способность в соединениях

При относительно высоких энергиях первичных электронов, когда несущественно взаимодействие с валентными электронами, соединения, состоящие из атомов различных элементов, рассматривают как смеси элементов, а тормозную способность считают равной сумме ее значений для составляющих (*правило Брэгга*):

$$(-dE/dx)_\Sigma = \sum_i (-dE/dx)_i C_i,$$

где  $(dE/dx)_i$  – тормозная способность атомов элементов  $i$  при концентрации, равной концентрации атомов в соединении;  $C_i$  – парциальная доля этого элемента  $\sum_i C_i = 1$ . Правило Брэгга справедливо и для валентных оболочек, если они в соединении не подвергаются сильной модификации.

### *Упругое рассеяние электронов на фононах*

Оно связано с электростатическим взаимодействием с полем внутри решетки. Высокоэнергетичные электроны отражаются лишь от глубоких потенциальных воронок в непосредственной окрестности решеточных остовов, где поле близко к кулоновскому, и для рассеяния электрона на ионе применима формула Резерфорда:

$$\sigma(\theta) = (B/4)^2 \operatorname{cosec}^4(\theta/2), B = 2Z_2 / (v_1^2). \quad (1.63)^*$$

При таком отражении небольшая часть энергии и импульс передаются решетке, т.е. рождается фонон, так как  $\Delta E = 0,1$  эВ, а  $\Delta E_1 = 10^2 \dots 10^5$  эВ; такое рассеяние считают *упругим*. Однако изменение импульса (квазиимпульса) электрона при рождении фонона может быть очень большим (с учетом процессов переброса Пайерлса), и электроны могут отклоняться на большие углы рассеяния (в обратном направлении).

### *Общая картина взаимодействия пучка электронов с твердым телом*

Попадающий в твердое тело быстрый электрон испытывает практически упругие рассеяния на фононах на большие углы и неупругие рассеяния на электронах, сопровождающиеся появлением новых квазисвободных носителей заряда с меньшей энергией. Тормозная способность имеет максимум, положение и величина которого зависят от электронной плотности среды (см. рис. 1.90): с увеличением  $E_1$  до максимума (при  $E_{\max}$ ) рост  $\partial E/\partial x$  связан с тем, что расширяется число возможных неупругих переходов и электронных возбуждений (последовательно включаются взаимодействия с валентными и все более глубокими электронными оболочка-

ми); при  $E > E_{\max}$  на первый план выходит уменьшение сечений взаимодействия быстрого электрона с электронным газом. В ультрарелятивистском случае  $E \gg mc^2$ , рост длины свободного пробега ограничивается потерями на излучение жестких рентгеновских и гамма-квантов. В кристаллах может происходить каналирование электронов в определенных кристаллографических направлениях. При своем движении в твердом теле высокоэнергетичный электрон с энергией  $E > E_{\max}$  на начальном отрезке пути тормозится относительно слабо, а при приближении  $E$  к  $E_{\max}$  быстро отдает свою энергию, так что максимум плотности энерговыделения находится не на поверхности, а внутри тела.

Из-за многочисленных рассеяний (обычно малоугловых на электронах и рассеяний на большие углы на фонах) траектория первичного электрона имеет сложную статистически нерегулярную форму с ветвлениями (вследствие возбуждения вторичных электронов) (рис. 1.96).

Глубина проникновения электронов связана со статистическим усреднением по траекториям и поэтому не может быть однозначно охарактеризована одним параметром. На рис. 1.97 показаны характерные распределения электронов по глубине  $x$ . Кроме *нормального пробега*  $R_{xN}$ , соответствующего ослаблению электронного потока в  $e$  раз, используют *максимальный пробег*  $R_{x\max}$ , на котором ток первичных электронов практически прекращается, применяют также *экстраполированный пробег*  $R_{xЭ}$ , который получают экстраполяцией линейного участка распределения по глубине потока электронов  $\gamma = \gamma(x)$  (см. рис. 1.97). Вводят и *наиболее вероятный пробег*  $R_{x0}$ , соответствующий максимуму производной потока

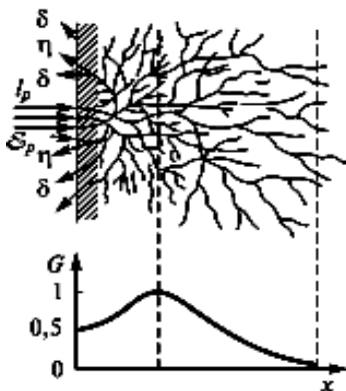


Рис. 1.96. Рождение вторичных электронов и функция плотности возбуждения истинно вторичных электронов

электронов, отнесенный к начальному потоку  $d\gamma_x/dx$ , и средний пробег  $R_{xcp}$ ,

$$R_{xcp} = \int_0^{\infty} x(d\gamma_x/dx)dx \Big/ \int_0^{\infty} d\gamma_x/dx .$$

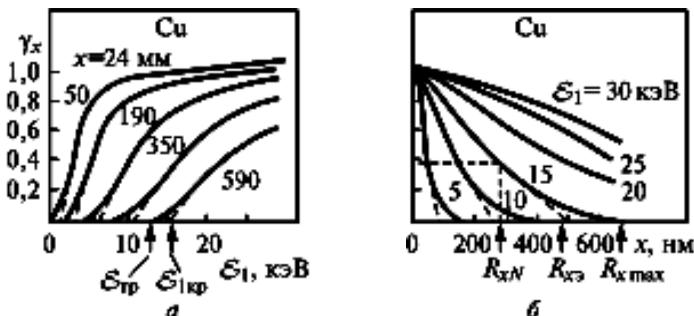


Рис. 1.97. Зависимость коэффициентов прохождения электронов в Cu от их энергии (а) и от толщины пленки (б)

Для каждого вещества форма распределения  $\gamma = \gamma(x)$  почти не меняется при вариации начальной энергии падающих частиц  $E_1$  в пределах  $10^3 \dots 10^6$  эВ, и его аппроксимируют эмпирической формулой

$$\gamma_x = \exp\left[-(x/R_{xN})^p\right], \quad (1.64)$$

где  $R_{xN}$  зависит от вещества мишени и  $E_1$ , а значение  $p$ , определяемое свойствами мишени, находят из эмпирической зависимости

$$p = 3,7\sqrt{Z_2/A_2}/\lg Z_2$$

( $A_2$  – атомный вес мишени). С помощью (1.64) легко выразить пробеги через один из них, например  $R_{xN}$ :

$$R_{xmax} = [\ln(1/\gamma_{xmin})]^{1/p},$$

$$R_{xЭ} = (p+1)R_{xN}/p, \quad R_{xw} = ((p-1)/p)^{1/p} R_{xN}, \quad R_{xcp} = \Gamma((p+1)/p)R_{xN};$$

здесь  $\gamma_{xmin}$  – значение  $\lambda_x$ , которое можно считать практически нулевым в некотором конкретном случае;  $\Gamma(y)$  – гамма-функция.

Значения  $R_{xN}$  определяются, с одной стороны, средней длиной траектории электронов до полного торможения

$$R_{\xi} = \int_0^{E_1} (-dE/dx)^{-1} dE, \quad (1.65)$$

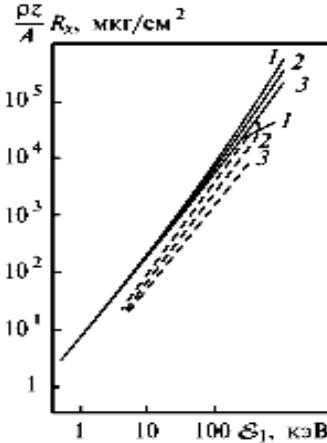


Рис. 1.98. Зависимость максимального (сплошные линии) и нормального пробега электронов от энергии для Al (1), Cu (2), Au (3)

с другой — отклонениями траектории от прямолинейной, связанными с рассеяниями на ионах решетки. Из экспериментальных данных следует зависимость пробега от коэффициента неупругого отражения  $\eta$ :

$$R_{x\max} = R_{\xi} (0,95 - 1,1\eta).$$

Значение  $R_{\xi}$  определяют интегрированием (1.65): полагая, что тормозная способность описывается законом Бете — Блоха (рис. 1.98).

### Энерговыделение в твердом теле

Большая часть энергии поглощенных телом быстрых электронов преобразуется в конечном счете в теплоту, т.е. происходит нагрев приповерхностных слоев. Распределение мощности поглощенной энергии электронного пучка по глубине зависит от  $(-dE/dx)$  и вероятности рассеяния, определяющей характер формы траекторий электронов. Это распределение аппроксимируют функцией Гаусса

$$G(x) = G_m \exp\left[-(x - x_m)^2 / \Delta x_m^2\right] = G_m \exp\left[-(x/\Delta x_m - \mathfrak{K})^2\right],$$

где  $x_m$  — координата максимума мощности;  $\Delta x_m$  — полуширина распределения;  $\mathfrak{K} = x_m / \Delta x_m$ ; необходимые параметры находят из эмпирических соотношений

$$\Delta x_m = (R_{x\max} - x_m) / 2 = R_{x\max} / (2 + \mathfrak{K}),$$

$$\kappa = x_m / \Delta x_m = 0,16\eta^{-0,65};$$

значение  $G_m$  определяют нормировкой на суммарную поглощенную энергию:

$$G_m = 2E_1 (1 - 0,5\eta - 0,4\eta^2) / \{ \sqrt{\pi} \Delta x_m [1 + \operatorname{erf}(\eta)] \},$$

где  $\operatorname{erf}(y) = (2/\sqrt{\pi}) \int_0^y e^{-y^2} dy$  – функция ошибок.

В случае относительно узких пучков диаметром  $d \ll R_{\max}$ , когда задачу нельзя считать плоской, пространственное распределение энерговыделения приближенно определяют в предположении, что источник тепловыделения представляет собой сферу с центром на глубине  $x_m$  от поверхности, плотность энергии в которой падает при удалении от центра по закону Гаусса:

$$G(x, y, z) = G'_m \exp \left[ - \left( (x - x_m)^2 + y^2 + z^2 \right) / \Delta x_m^2 \right]$$

(оси  $y$  и  $z$  направлены вдоль поверхности из точки попадания пучка).  $G'_m$  также находят из условий нормировки:

$$G'_m = 2E_1 (1 - 0,5\eta - 0,4\eta^2) / \left\{ \left( \sqrt{\pi} \Delta x_m \right)^3 [1 + \operatorname{erf}(\eta)] \right\},$$

параметры  $x_m$  и  $\Delta x_m$  задаются теми же формулами, что и для плоского случая.

### 1.5.2. Движение быстрых ионов в твердом теле

Быстрый ион в твердом теле взаимодействует в парных соударениях с ионами решетки и электронами, валентными и внутренними, а также порождает коллективные возбуждения ионов (фононы) и электронов (плазмоны). Для медленных ионов возможно также многочастичное взаимодействие с атомами среды. Упорядоченное расположение ионов в кристалле вносит анизотропию.

## Ион-ионные столкновения

Сечения столкновений быстрого иона с атомами твердого тела в первом приближении рассматривают в рамках тех же моделей, что и кулоновские столкновения изолированных заряженных частиц. Сечение кулоновского рассеяния на углы  $\theta \dots \theta + d\theta$  определяется формулой Резерфорда:

$$\sigma(\theta)d\theta = \left[ Z_1 Z_2 e^2 / (2Mv_1^2) \right]^2 \operatorname{cosec}^4(\theta/2) d\theta, \quad (1.66)$$

где  $M = 1/(1/M_1 + 1/M_2)$  – приведенная масса;  $v_1$  – скорость быстрого иона;  $Z_1, Z_2, M_1, M_2$  – зарядовые числа и массы ионов. Соответствующие сечения передачи энергии  $\Delta E \dots \Delta E + d\Delta E$

$$\sigma(\Delta E)d\Delta E = (\pi/4) \left[ Z_1 Z_2 e^2 / (2Mv_1^2) \right]^2 (\Delta E_{\max} / \Delta E^2) d\Delta E, \quad (1.67)$$

где  $\Delta E_{\max} = 4M_1 M_2 E / (M_1 + M_2)^2$  – максимальная величина передаваемой энергии,  $E = M_1 v_1^2 / 2$ . Из законов сохранения импульса и энергии следует, что при  $M_1 \gg M_2$  быстрый ион рассеивает ионы твердого тела, отклоняясь на небольшие углы; при  $M_1 \ll M_2$  он может рассеиваться на углы до  $180^\circ$  (более подробно см. гл. 2). Рассеяния на незранированном поле ядра преобладают при больших энергиях ионов

$$E_1 > E_B = 4Ry^2 Z_1^2 Z_2^2 (Z_1^{2/3} + Z_2^{2/3}) M_1 / (M_2 E^*),$$

где  $Ry = 13,6$  эВ;  $E^*$  – энергия, необходимая для выбивания иона из узла кристаллической решетки.

На расстояниях больше или порядка характерного размера внутренних электронных орбит заряд ядра решетки, однако, экранируется электронами (см. разд. 1.1), в этом случае считают, что потенциал взаимодействия описывается экранированным кулоновским потенциалом

$$U(r) = \frac{Z_1^2 Z_2^2 e^2}{r} \Phi\left(\frac{r}{a}\right), \quad (1.68)$$

где  $\Phi(r/a)$  – универсальная функция, одинаковая для любых пар взаимодействующих атомов;  $a$  – параметр экранирования, завися-

ций от атомных номеров сталкивающихся частиц. Функцию экранирования можно аппроксимировать степенной функцией  $U(r) \propto r^{-n}$ , в которой по мере уменьшения энергии частиц показатель степени  $n$  увеличивается от  $n = 1$  для незэкранированного кулоновского потенциала до  $n = \infty$  при очень малых энергиях, когда сталкивающиеся атомы можно рассматривать как абсолютно твердые шары<sup>2</sup>.

### *Торможение ионов за счет упругих соударений с атомами твердого тела*

Потери энергии за счет упругих соударений при торможении в веществе определяются сечением соударения  $\sigma$  и переданной в нем энергией  $T$ :

$$-\frac{dE}{dx} = n_0 \int_0^{r_{\max}} T d\sigma = n_0 S_n, \quad (1.69)$$

где  $n_0$  – концентрация атомов среды;  $S_n$  – сечение упругого (ядерного) торможения (см. далее рис. 1.109), а также формулу (1.79). Для диапазона средних значений энергий и атомных номеров сталкивающихся частиц, когда применима аппроксимация  $U(r) \sim r^{-2}$ , интеграл (1.69) считается точно и приводит к формуле Линдхарда и Шарффа:

$$\begin{aligned} -dE/dx &= \xi_v \left( \pi^2/2 \right) (n_2 M_1 / (M_1 + M_2)) Z_1 Z_2 a', & (1.70) \\ \xi_v &= 2 / (2,7183 \cdot 0,8853), \\ a' &= 0,8853 a_0 \left( Z_1^{2/3} + Z_2^{2/3} \right)^{-1/2}. \end{aligned}$$

### *Взаимодействие ионов с кристаллами.*

#### *Каскадные процессы и повреждения решетки. Фокусоны*

При движении иона по телу в столкновениях с ионами решетки последним передаются порции энергии, которые могут многократно превышать энергию  $E^*$ , необходимую для выбивания иона с

---

<sup>2</sup> Более подробно с парными потенциалами взаимодействия атомных частиц можно познакомиться в пособии [20].

его места в кристаллической решетке. Выбитый ион претерпевает столкновения с соседями, также передавая некоторым из них энергию  $\Delta E > E^*$ , так что появляются каскады соударений (рис. 1.99) и могут образоваться многочисленные дефекты решетки типа вакансий и атомов в междоузлиях, которые локализованы в поврежденной области. В ее центре преобладают вакансии, на периферии – междоузельные включения (рис. 1.100).

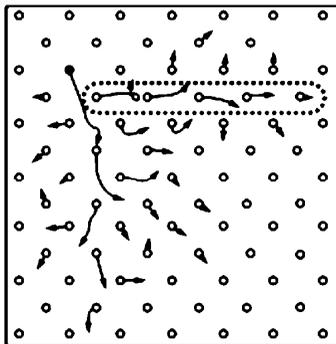


Рис. 1.99. Начальная стадия развития каскада столкновений в Al (черный кружок – первично выбитый атом)

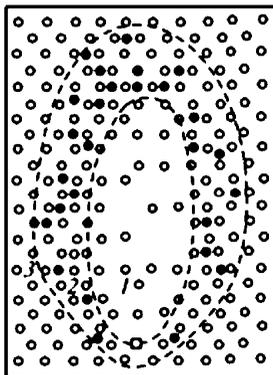


Рис. 1.100. Структура поврежденной области: 1 – обедненная зона; 2 – зона, насыщенная внедренными атомами (черные кружки); 3 – неповрежденная кристаллическая решетка

Эта зона может охватывать значительную область кристалла, а число одновременно смещающихся атомов достигать примерно  $10^3$ . Движение выбитых атомов в правильном кристалле происходит анизотропно, преимущественно в направлениях, соответствующих наибольшей атомной плотности (наименьшим межатомным расстояниям).

Это можно представить в виде цепочек замещающих столкновений либо в терминах движения по кристаллу фокусон. Если фокусон дошел до  $i$ -го атома цепочки, это означает, что атом получил импульс от  $(i-1)$ -го атома и передает его  $(i+1)$ -му, причем после прохождения фокусона  $(i-1)$ -й атом остается в положении равновесия  $i$ -го узла,  $i$ -й в  $(i+1)$ -м узле и т.д. Там, где энергия

фокусона становится меньше  $E^*$ , образуется дефект типа атома внедрения. Если цепочка ведет к поверхности кристалла, последний атом может покинуть твердое тело – см. (1.66).

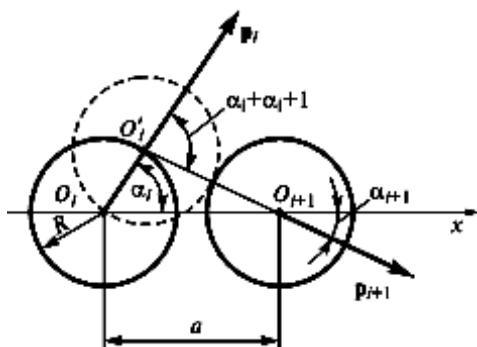


Рис. 1.101. К анализу образования фокусона на примере цепочки шаров

Условие образования фокусона в данном кристаллографическом направлении получают из рассмотрения модели цепочки шаров, последнему из которых  $i$  придан импульс  $\mathbf{p}_i$  под углом  $\alpha_i$  к цепочке (рис. 1.101). Когда центр этого шара окажется в точке  $O'_i$ , произойдет столкновение  $i$ -го и

$(i+1)$ -го атомов, последний получит импульс  $\mathbf{p}_{i+1}$ , направленный по линии  $O'_i O_{i+1}$  под углом  $\alpha_{i+1}$  к оси цепочки. На рис. 1.101 видно, что  $\sin(\alpha_i + \alpha_{i+1})/\sin(\alpha_i) = a/(2R)$ . Отсюда можно получить угол направления импульса  $(i+1)$ -го атома  $\alpha_{i+1}$ : он равен или меньше  $\alpha_i$ , если  $\cos \alpha_i \leq a/(4R)$  – условие, при выполнении которого вектор передаваемого импульса все в большей степени ориентируется по оси цепочки. Из этого условия следует, что наиболее вероятное проявление фокусировки наблюдается при малых значениях  $a$ , т.е. в направлениях наиболее плотной упаковки атомов в кристалле.

### Каналирование ионов

Анизотропия расположения рассеивающих центров в кристаллах приводит к существенной зависимости тормозной способности первичных ионов от направления относительно кристаллографических осей: имеются направления (прямые «каналы» между атомными цепочками), при движении по которым быстрый ион не подходит близко к ядрам атомов решетки, т.е. не испытывает торможения при ион-ионных соударениях. Такое движение – каналиро-

вание – возможно и при вхождении иона в канал не точно по оси, а под небольшим углом  $\varphi < \varphi_{кр}$ , тогда ион многократно отражается от ионов цепочек, совершая поперечное движение, близкое к колебательному (рис. 1.102, 1.78). Взаимодействие в этом случае носит характер упругого отражения от цепочки как целостного непрерывного рассеивающего объекта. Условие применимости непрерывного приближения таково: за время  $\Delta t$  наибольшего сближения быстрого иона с осью он взаимодействует с несколькими атомами, успевая пролететь расстояние, большее межатомного, т.е.  $v_{\parallel} \Delta t > a$ , где  $v_{\parallel} = v \cos \varphi$  – параллельная оси составляющая скорости;  $\Delta t = r_{\min} / v_{\perp}$ ,  $v_{\perp} = v \sin \varphi$ ,  $r_{\min}$  – минимальное расстояние сближения, которое определяют из условия сохранения энергии поперечного движения  $E_{\perp} = E^2 \sin^2 \varphi$ :

$$U'(r_{\min}) = E \sin^2 \varphi,$$

$$U'(r) = \int_{-\infty}^{\infty} U(r) dx / a;$$

здесь  $U'(r)$  – потенциал цепочки;  $U(r)$  – потенциал взаимодействия иона и атома;  $x$  – осевая координата.

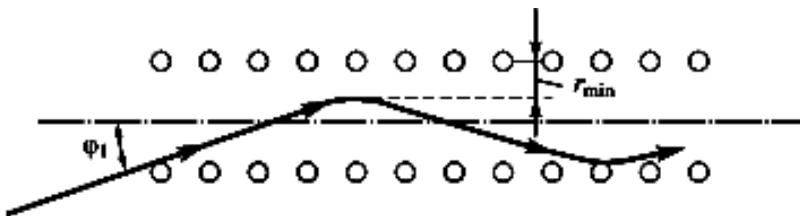


Рис. 1.102. Каналирование ионов в кристалле

*Критический угол каналирования Линдхарда*  $\varphi_{кр}$  определяется таким значением  $\varphi_{кр}$ , при котором  $v_{\parallel} \Delta t = a$ , при этом необходимо задать конкретным видом внутриатомного потенциала  $U(r)$ . При малых углах  $\varphi$  (считая  $\sin \varphi \sim \varphi$ ) для потенциала вида  $U = A/r^2$  (т.е. для не очень больших значений энергии  $E_{\varphi 2} < E_A$ ) из приве-

денных здесь соотношений можно получить выражение для критического угла каналирования:

$$\varphi_{\text{кр}} = \left[ \pi A / (E a^2) \right]^{1/3}, \quad (1.71)^*$$

где фактор  $A = 3,05^{-16} Z_1 Z_2 / (Z_1^{1/2} + Z_2^{1/2})^{2/3}$ . Угол  $\varphi_{\text{кр}}$  растет при уменьшении межатомного расстояния в цепочке, т.е. каналирование происходит преимущественно вдоль кристаллографических направлений с наиболее плотным расположением атомов.

При каналировании параллельно заданной оси возможны два типа траекторий: ограниченные только одним каналом

(гиперканалирование, см. рис. 1.103, а) и неограниченные, со свободным блужданием иона между каналами (см. рис. 1.103, б). При гиперканалировании критические углы вхождения меньше критического угла Линдхарда, поскольку они определяются потенциалом на границе между каналами.

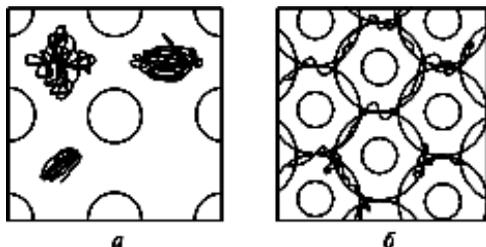


Рис. 1.103. Проекция траектории ионов при каналировании в Cu  $\langle 100 \rangle$  (а) и в Cu  $\langle 110 \rangle$  (б)

### Блокировка

При углах, больших  $\varphi_{\text{кр}}$ , непрерывное приближение становится некорректным; следует рассматривать последовательные рассеяния на атомах цепочки (рис. 1.104). Быстрый ион претерпевает несколько рассеяний на цепочке и затем покидает этот канал. При этом одно или два рассеяния происходят на относительно большие углы (около  $10^\circ$ ), а остальные – на малые (примерно  $1^\circ$ ) с малой потерей энергии. Траектория, конечная энергия и угол вылета при данных  $E$  и  $\psi$  зависят от значения прицельного параметра (т.е. от того, нацелен первичный ион на ядро или между ядрами атомов цепочки), рис. 1.105. При рассеянии непрерывного пучка получаются характерные распределения по энергиям (с двумя пиками,

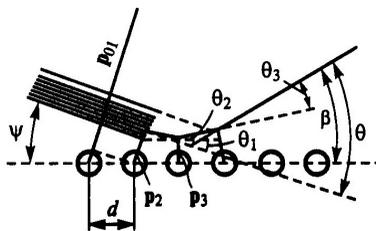


Рис. 1.104. Рассеяние частицы на цепочке атомов

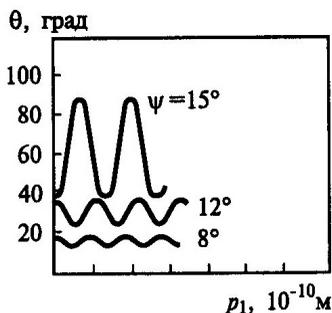


Рис. 1.105. Периодическая зависимость от угла рассеяния  $\theta$  от первого прицельного параметра  $p_1$  для разных углов падения

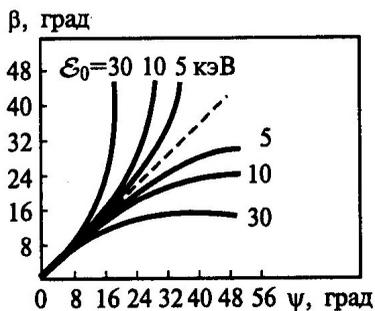


Рис. 1.106. Зависимость максимального и минимального углов вылета  $\beta$  для различных начальных энергий  $E_0$

один из них соответствует одному, другой – двум рассеяниям на большие углы) и по углам (ограниченное как минимальным, так и максимальным углами, рис. 1.106). Ограничение угла вылета сверху объясняется тем, что ион не может подойти к атому на достаточно близкое расстояние из-за отклоняющих малоугловых столкновений с предыдущими атомами цепочки («блокировка на входе»), снизу – из-за отклонения последующими атомами («блокировка на выходе»).

Наличие минимального угла вылета делает практически невозможным движение иона после рассеяния параллельно цепочке: происходит рассеяние на углы порядка соответствующего зеркальному отражению, причем распределение по углам сдвинуто в сторону больших углов рассеяния (см. рис. 1.106).

Ион практически не может выйти в направлении оси канала, т.е. на соответствующем распределении прошедших через кристалл ионов в точках – проекциях кристаллографических направлений – образуются тени (эффект блокирования, рис. 1.107). Более слабые тени образуются на проекциях кристаллографических плоскостей. При наличии многочисленных дефектов решетки

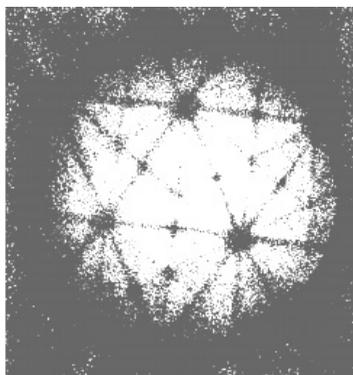


Рис. 1.107. Эффект теней при отражении протонов от монокристалла Au (темные полосы указывают на ослабление интенсивности отраженного пучка ионов вследствие эффекта блокировки входящих ионов атомными плоскостями)

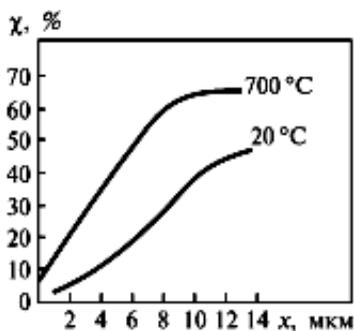


Рис. 1.108. Доля  $\chi$  деканализованных протонов с энергией 1,6 МэВ в Si  $\langle 110 \rangle$  в зависимости от глубины проникновения

эффект блокировки не проявляется. Смазывается картина теней и тепловых колебаний решетки при высоких температурах.

### Деканализирование

По разным причинам частицы могут выходить из режима каналирования (деканализирование), и в идеальном кристалле деканализирование может происходить из-за неупругих рассеяний на электронах, плазмонах и колебаний решетки.

Наличие небольших возмущений энергии поперечного движения деформирует траекторию каналируемой частицы случайной, так что имеется конечная вероятность «диффузии» иона в поперечном направлении, т.е. деканализирования; она увеличивается при росте температуры (рис. 1.108) и числа дефектов структуры.

### Торможение ионов на электронах

При соударениях с электронами быстрые ионы теряют энергию малыми порциями и рассеиваются на малые углы; это диктуется законами сохранения импульса и энергии при парных соударениях тел с резко различающейся массой  $M_2 \gg m_e$ . Поэтому для описания этих процессов применимы понятия о непрерывном торможении.

## Низкоэнергетичные ионы. Модель Фирсова

При малых скоростях  $v_i \ll (e^2/\hbar)Z_2^{2/3} \equiv v_B Z_2^{2/3}$  тормозная способность иона хорошо описывается моделью Фирсова, где передача импульса объясняется тем, что при подходе к атому решетки быстрый ион захватывает электрон, увлекает его с собой, придавая импульс порядка  $m_e v$ , и затем «возвращает» этот электрон атому на возбужденный уровень; в последнем акте импульс отдачи отсутствует.

В модели Фирсова анализируется обмен электронами между атомом и ионом, причем для нахождения  $d(mv)/dt$  рассматривается односторонний поток электронов  $N_e^+$ , которые в ходе своего движения по орбиталим пересекают плоскость, равноудаленную от обоих ядер; в направлении от атома к иону эти электроны приобретают дополнительный импульс (равный  $m_e v_1$ ) и энергию; обратный поток электронов не оказывает воздействия на движение иона. Результирующее соотношение для элементарной порции энергии, теряемой при пролете иона на расстоянии  $R_0$  от атома, имеет вид

$$-\Delta E = (1/2)v_1 \cdot 0,7(Z_1 + Z_2)^{5/3} \left[ 1 + 0,16(Z_1 + Z_2)^{1/3} R_0 \right]. \quad (1.72)^*$$

Существенно, что  $\Delta E$  и  $dE/dx \sim v_1$ . Такая же зависимость от  $v_1$  получается и в других моделях:

$$-dE/dx = \zeta_e 8\pi n Z_1 Z_2 v_1 \left( Z_1^{2/3} + Z_2^{2/3} \right)^{1/3}, \quad (1.73)^*$$

$$\zeta_e \approx Z_1^{1/6} \approx 1 - 2$$

(формула Линдхарда – Шарффа – Шюотта);

$$-dE/dx = 0,32\pi^{7/3} Z_1^2 v_1 n^{2/3} \quad (1.74)^*$$

(формула Хитагавы – Оцуки).

Зависимости от зарядов ядер атомов мишени и быстрого иона в формулах (1.72) – (1.74) несколько различаются между собой и не всегда согласуются с экспериментом.

Для анализа упругого и неупругого торможения часто пользуются подходом, позволяющим описать указанные процессы в универсальных безразмерных единицах энергии  $\epsilon$  и пробега  $\rho$ :

$$\varepsilon = 32,5E_0 \left( \frac{M_2}{M_1 + M_2} \right) \cdot \left[ \frac{1}{Z_1 Z_2 (Z_1^{2/3} + Z_2^{2/3})^{1/2}} \right], \quad (1.75)$$

$$\rho = 2,75 \cdot 10^{-16} R \cdot n_0 \left[ \frac{M_1 M_2}{(M_1 + M_2)^2} \right] \cdot \left[ \frac{1}{(Z_1^{2/3} + Z_2^{2/3})} \right], \quad (1.76)$$

где  $E_0$  – энергия; кэВ,  $R$  – пробег, см;  $n_0$  – плотность атомов среды, см<sup>-3</sup>;  $M_1$ ,  $M_2$  и  $Z_1$ ,  $Z_2$  – массы и атомные номера налетающей частицы и атома мишени соответственно. В этом представлении кривая для упругого торможения  $S_n$  (рис. 1.109) является универсальной для различных комбинаций ион-мишень, а коэффициент пропорциональности в формуле для неупругого торможения

$$-d\varepsilon/d\rho = k_e \varepsilon^{1/2} \quad (1.77)$$

может быть вычислен по формуле:

$$k_e = 0,0793 \cdot \xi_e \left[ \frac{Z_1^{1/2} Z_2^{1/2}}{(Z_1^{2/3} + Z_2^{2/3})^{3/4}} \right] \cdot \left[ \frac{(M_1 + M_2)^{3/2}}{M_1^{3/2} M_2^{1/2}} \right]^{3/2}. \quad (1.78)$$

Сечение упругого торможения часто аппроксимируется формулой:

$$S_n(\varepsilon) = 3,4 \cdot \varepsilon^{6/5} \frac{\ln(\varepsilon + 2,7)}{1 + 6,35 \cdot \varepsilon^{1/2} + \varepsilon \cdot (6,9 \cdot \varepsilon^{1/2} - 1,7)}. \quad (1.79)$$

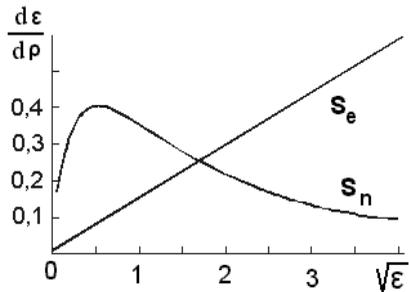


Рис. 1.109. Упругие  $S_n$  и неупругие  $S_e$  ( $k_e = 0,15$ ) потери энергии в безразмерных значениях энергии  $\varepsilon$  и пробега  $\rho$ , в соответствии с (1.75), (1.76) и (1.77)

## Высокоэнергетичные ионы. Формула Бете – Блоха

При высоких скоростях  $v_1 \gg v_B Z_2^{2/3}$  (т.е. скоростях, превышающих скорости и валентных, и внутренних электронов атомов) быстрый ион возбуждает электроны как в парных соударениях (ионизация внутренних оболочек), так и в коллективных процессах (возбуждение плазмонов). Средняя энергия возбуждения  $\Delta E \geq RyZ_2$  определяется внутренними свойствами электронной подсистемы кристалла и не зависит от энергии первичного иона, так что тормозная способность для парных соударений в первом приближении определяется произведением  $\Delta E$  на число рассеивающих атомов и на сечение рассеяния, причем последнее пропорционально квадрату заряда ядра иона и обратно пропорционально квадрату скорости. Вывод дает *формулу Бете – Блоха* (аналогичную формуле для электрон-электронных рассеяний):

$$-dE/dx = \left(4\pi Z_1^2 / v_1^2\right) n \ln\left(2v_1^2 / I\right), \quad (1.80)$$

где  $n = n_2 Z_2$  – плотность электронов.

Как и в указанном случае, она учитывает как парные соударения, так и возбуждение плазмонов, причем парциальные вклады их в (1.79) одинаковы (принцип равномерного распределения).

## Релятивистские ионы

Для случая очень быстрых ионов с  $\beta = v_1/c \leq 1$  формула Бете – Блоха принимает вид (*формула Фано*)

$$-dE/dx = \left(4\pi Z_1 / v_1^2\right) n \left\{ \ln\left(2v_1^2 / I\right) + \ln\left[1 / \left(1 - \beta^2\right)\right] - \beta^2 \right\} \quad (1.81)^*$$

(из-за существенно большей массы покоя ионы гораздо сложнее ускорить до релятивистских скоростей, чем электроны).

## Взаимодействие с соединениями

Как и для электронов, тормозная способность ионов при взаимодействии с веществом, состоящим из атомов различных элементов, равна сумме тормозных способностей каждой из подрешеток:

$$-dE/dx = \sum_i C_i (-dE/dx)_i,$$

суммирование ведут по элементам  $i$ , где  $C_i$  – его парциальная доля.

### Общая картина взаимодействия ионов с твердыми телами

При движении в твердом теле ион отдает энергию ядрам решет- ки и электронам (внутренним и валентным) и возбуждает плазмон- ны – коллективные колебания электронов. Потери энергии на элек- трромагнитное излучение, как правило, малы. Возбуждаются также фононы, образуются экситоны.

Тормозная способность включает электронную и ядерную составляющие (рис. 1.110).

Электронная тормозная способ- ность при малых скоростях ионов  $v_1 \ll v_B Z_2^{2/3}$  связана с возбуждени- ем внешних электронов и пропор- циональна  $v_1$ , при больших – с внутренними электронами и обрат- но пропорциональна  $v_1^2$ , т.е. прохо- дит через максимум при скорости иона, близкой к скорости внутрен- них электронов в атомах  $v_B Z_2^{2/3}$ .

Для легких ионов этот максимум соответствует энергии  $10^4$ – $10^5$  эВ, для тяжелых –  $10^6$ – $10^5$  эВ. Ядерная тормозная способность также про- ходит через максимум, который в соответствии с формулой Линд- харда – Шарффа – Шиотта достигается при энергии иона

$$E_1 \approx 10 \left( Z_1^{2/3} + Z_2^{2/3} \right) Z_1 Z_2 (M_1 + M_2) / M_2$$

( $E_1$  – в электрон-вольтах), что для легких ионов соответствует  $10^2$ ... $10^3$  эВ, для тяжелых –  $10^4$ ... $10^5$  эВ. Нарастание тормозной спо- собности в области малых энергий идет относительно медленно

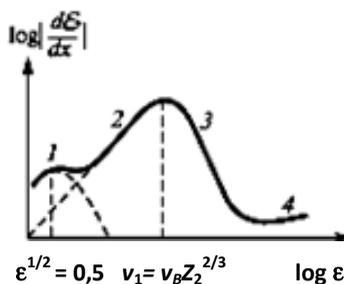


Рис. 1.110. Зависимость средней тормозной способности иона от энергии: 1 – область преобладания ядерных потерь энергии; 2 – область преобладания электронных потерь энергии, формулы (1.72) – (1.74); 3 – формула Бете – Блоха (1.80); 4 – область торможения релятивистских частиц на фононах

(примерно логарифмически, см. рис. 1.110). В результате при малых энергиях основным является рассеяние на ионах решетки, а при больших – на электронном газе. В монокристаллах при движении ионов параллельно кристаллографическим направлениям из-за эффекта каналирования часть ионов проникает на расстояния, существенно превышающие расстояния для других неканализованных ионов или для аморфных веществ: для каналирования ионов менее вероятны столкновения с ядрами атомов решетки и электронами.

При столкновениях с ионами решетки возможны рассеяния на большие углы и передача энергии большими порциями, а торможение на электронах происходит с малыми отклонениями от прямолинейной траектории и почти непрерывными потерями энергии. В результате быстрые ионы обычно между редкими рассеяниями на ионах решетки имеют почти прямолинейную траекторию и тормозятся на электронах, а выбитые по пути относительно медленные ионы образуют зоны радиационных повреждений. Распределение концентрации смещенных атомов по глубине близко к распределению имплантированных ионов (рис. 1.111).

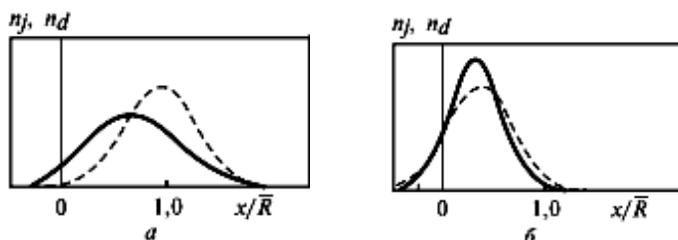


Рис. 1.111. Распределение по глубине внедренных ионов (*штриховые линии*) и смещенных атомов (*сплошные*) при  $M_1/M_2 = 1/4$  (а) и  $M_1/M_2 = 4$  (б)

Число атомов, смещенных первично смещенным атомом,

$$N_d = 0,42 E_{aa} / E^*,$$

где  $E^*$  – пороговая энергия смещения атома при сильном ударе,  $E^* \approx 10 \div 30$  эВ;  $E_{aa}$  – энергия первично смещенного атома, расходуемая в упругих взаимодействиях,

$$E_{aa} = (A'/k_e) \ln [1 + E'_a (A'/k_e + B')],$$

$$A' = 0,45, B' = 0,3; \varepsilon_a = E_a / E_0, E_0 = Z_1 Z_2 e^2 (M_1 / M_2 + 1) / a_{TF};$$

здесь  $E_a$  – энергия первично смещенного атома;  $a_{TF}$  – радиус Томаса – Ферми;  $C_e$  – коэффициент пропорциональности между безразмерной электронной тормозной способностью  $(-\partial\varepsilon/\partial\rho)_e$  и безразмерной скоростью атома  $(\varepsilon)^{1/2}$  (формула (1.77)).

В случае большой дозы облучения (более  $10^{16}$ – $10^{17}$  см<sup>-2</sup>) каскады атом-атомных столкновений могут перекрываться, в результате объемная плотность дефектов достигает насыщения, происходит аморфизация.

### *Релаксация зоны радиационного повреждения*

После прекращения поступательного движения ионов по решетке происходит частичная релаксация из неравновесного состояния. Структура решетки частично восстанавливается в ходе рекомбинации дефектов в значительной степени вследствие диффузии, стимулированной энергией колебаний, возбужденных при торможении иона данного или соседних каскадов. Отвод основной доли энергии из области, прилежащей к каскаду, описывается в рамках теории теплопроводности, однако некоторая ее доля переносится и в виде ударной волны. Взаимное влияние температурных полей соседних каскадов при больших мощностях энерговыклада может приводить к снижению градиентов температуры и более или менее равномерному оплавлению и кипению тела.

### *Глубина проникновения ионов*

Среднюю длину пробега ионов определяют приближенно (при замене дискретных соударений на непрерывное торможение) по формуле

$$R(E_1) = \int_0^{E_1} \left\{ 1 / \left[ (-\partial E / \partial x)_e + (-\partial E / \partial x)_n \right] \right\} dE,$$

где индексами  $e, n$  отмечены тормозные способности ионов на электронах и ядрах решетки. Для вычисления  $R$  можно и не проводить интегрирования, а воспользоваться аппроксимациями;

так, в случае пренебрежимо малых электронных потерь при  $\varepsilon = E_1/E_0 \ll 0,02$

$$\rho = 2A(\varepsilon_1)^3/B, A=0,1412, B=0,4206;$$

при  $0,1 < \varepsilon < 5$

$$\rho = 3,06\varepsilon.$$

Для диапазона энергий  $0,02 < \varepsilon < 10$  с учетом  $(-\partial E/\partial x)_e$  и  $(-\partial E/\partial x)_n$

$$\rho = (2/k_e)(\varepsilon)^{1/2} - 0,9 / \left[ k_e^2 (0,45/k_e + 0,3)^{1/2} \right] \times \\ \times \arctg \left[ (\varepsilon)^{1/2} / k_e^2 (0,45/k_e + 0,3)^{1/2} \right].$$

Поскольку траектории отличны от прямолинейных,  $R(E_1)$  не совпадает в общем случае с расстоянием от поверхности имплантированных быстрых ионов – *средним проективным пробегом*  $R_p$ .

В широком диапазоне значений энергии  $\varepsilon = 2 \cdot 10^{-3} - 10$  расчеты торможения с хаотически расположенными центрами и потенциалом экранирования по Томасу – Ферми приводят к следующим приближенным формулам для  $R_p$ , домноженных на плотность:

$$R'_p = c_1 M_2 \left[ (Z_1^{2/3} + Z_2^{2/3}) E_1 / (Z_1 Z_2) \right]^{2/3} / \rho, \text{ при } 0,002 < E'_1 < 0,1$$

$$R'_p = c_2 M_2 (Z_1^{2/3} + Z_2^{2/3}) E_1 / (Z_1 Z_2 \rho) \quad \text{при } 0,5 < E'_1 < 10;$$

коэффициенты  $c_1$  и  $c_2$  зависят от  $M_2/M_1$  (рис. 1.112);  $E'_1$  – в кэВ,  $R'_p$  – в мкг/см<sup>2</sup>.

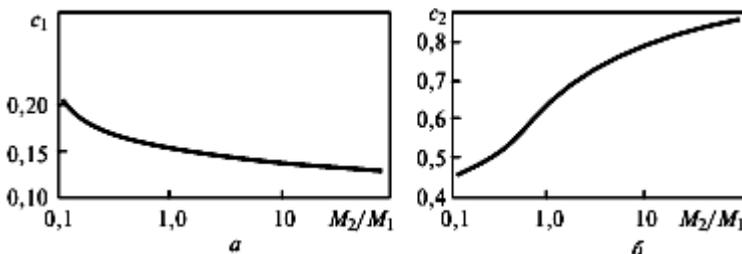


Рис. 1.112. Зависимости  $c_1$  (а) и  $c_2$  (б) от  $M_2/M_1$

Средний квадратичный разброс пробегов  $\Delta R_p$  при пренебрежении электронным торможением можно вычислить по формуле

$$\Delta R_p^2 = R^2 \gamma (n-1) / [n(2n-1)],$$

где  $R$  – траекторный пробег;  $\gamma = 4M_1M_2 / (M_1 + M_2)^2$ ;  $n$  – показатель степенной аппроксимации потенциала.

Зависимость для протонов представлена на рис. 1.113 (для других легких ионов получаются кривые, близкие к ней).

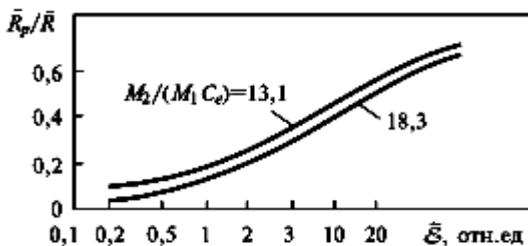


Рис. 1.113. Зависимость  $R_p/R$  от энергии для протонов

Распределение примесей по глубине часто близко к гауссову, которое описывается формулой

$$N(x) = \left[ N_0 / (\sqrt{2\pi} \Delta R_p) \right] \exp \left[ - (x - R_p)^2 / (2 \Delta R_p^2) \right],$$

где  $N_0$  – интегральная доза имплантированных ионов на  $1 \text{ см}^2$ ;  $\Delta R_p$  – среднее квадратичное отклонение проективных пробегов.

В случае распространения пучка ионов по монокристаллу в направлении какой-либо оси вследствие каналирования распределение ионов по глубине имеет два максимума: соответствующий описанному выше случаю (аморфные и поликристаллические мишени) слой у поверхности и глубинный слой каналированных ионов (рис. 1.114); глубина последнего слоя в области роста ( $\partial E / \partial x$ ) пропорциональна скорости иона:

$$R' / R_0 = - \int_0^{E_1} \frac{dE}{(\partial E / \partial x)_e} = \int_0^{E_1} [1 / (k_e E^{1/2})] \frac{1}{N} = 2 E^{1/2} / k_e.$$

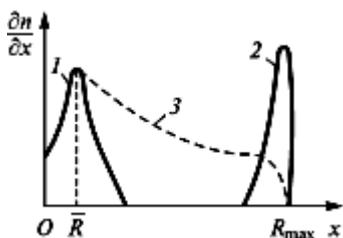


Рис. 1.114. Распределение по глубине ионов, внедренных в ориентированный монокристалл, для хаотической (1) и хорошо каналированной (2) частей пучка, а также с учетом деканалирования (3)

SCATTER. При этом учитываются не обсуждавшиеся ранее эффекты немонотонной зависимости сечений торможения от атомного номера соударяющихся частиц (в основном, эти сечения больше для атомов с большими размерами электронных оболочек). В целом пробеги ионов значительно меньше пробегов электронов, т.е. ионный пучок воздействует на узкий приповерхностный слой (0,01–10 мкм), тогда как электронный пучок при той же энергии может проникать и на значительно большую глубину (до сантиметра и более).

### 1.5.3. Термоядерные и ядерные реакции в твердом теле

При бомбардировке пучками высокоэнергетичных ионов легких элементов в твердом теле могут происходить реакции термоядерного синтеза (рис. 1.115), в большинстве из которых наряду с заряженными частицами образуются и нейтроны. Последние могут приводить и к ядерным реакциям.

При ядерных и термоядерных реакциях образуются гамма-кванты, быстрые нейтроны и заряженные частицы — высокоэнергетичные электроны, позитроны и ионы. Наибольшие сечения взаимодействия с веществом имеют именно заряженные частицы, которые и производят наибольшие радиационные повреждения решетки в окрестности точки реакции. Для гамма-квантов веществ-

Поскольку  $k_e$  не увеличивается с ростом  $Z_1$ , при одной и той же энергии пробеги тяжелых ионов больше (так как меньше скорость и меньше тормозная способность).

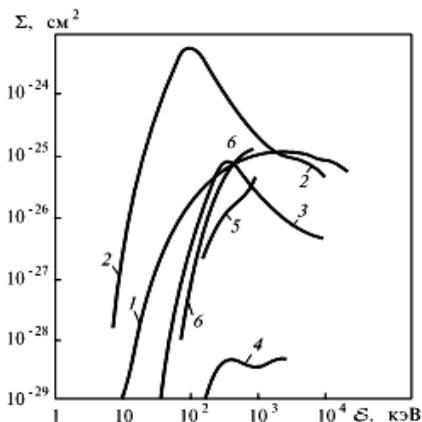
Для расчета проективного пробега и профиля внедрения ионов широко используются хорошо апробированные компьютерные коды, основанные на моделировании методом статистических испытаний (методом Монте-Карло) парных соударений налетающей частицы с атомами среды, рассматриваемой как конденсированный газ: TRIM, SRIM,

во, как правило, прозрачно, и их воздействием на тело, в котором происходят ядерные реакции, часто пренебрегают. Они, однако, влияют на радиационную обстановку в окрестности реактора.

Рис. 1.115. Сечения некоторых термоядерных реакций:

- 1 –  $D + D = {}^3\text{He} + n + 3,3 \text{ МэВ}$ ,
- $D + D = T + p + 4,0 \text{ МэВ}$ ;
- 2 –  $T + D = {}^4\text{He} + n + 17,6 \text{ МэВ}$ ;
- 3 –  ${}^3\text{He} + D = p + {}^4\text{He} + 18,4 \text{ МэВ}$ ;
- 4 –  ${}^3\text{He} + D = {}^5\text{Li} + \gamma^-$ ;
- 5 –  ${}^3\text{He} + T = {}^4\text{He} + p + n^-$ ;
- 6 –  ${}^6\text{Li} + D = {}^7\text{Li} + p + 5,0 \text{ МэВ}$ .

Выделяющаяся в реакции энергия распределяется обратно пропорционально массе образующихся частиц



Взаимодействие нейтронных потоков с веществом сводится, во-первых, к инициации ядерных реакций (при этом нейтроны поглощаются), во-вторых, к упругим и неупругим рассеяниям на ядрах решетки (при этом происходит замедление нейтронов). Закономерности ядерных реакций относятся к ядерной физике и здесь подробно не рассматриваются. Сечения ядерных процессов, как правило, невелики по сравнению с сечениями газокинетических и других, затрагивающих электронные оболочки атомов; об этом свидетельствует, например, значение традиционной для ядерной физики единицы измерения сечений: 1 барн (б) =  $10^{-28} \text{ м}^2$ .

Сечения взаимодействия нейтронов с ядрами зависят от их энергии и от элементарного состава мишени (рис. 1.116).

При неупругом рассеянии нейтронов происходит захват нейтрона и затем распад составного ядра с испусканием нейтрона с меньшей энергией. После эмиссии нейтрона ядро приобретает кинетическую энергию, а также оказывается в возбужденном состоянии, переход из которого в основное состояние сопровождается испусканием гамма-кванта.

При упругом рассеянии также часть энергии нейтрона передается ядру решетки (причем энергетические соотношения такие же, как и при рассеянии иона с массой 1 а.е.м.); основное воздействие на тело также связано с образованием быстрого иона материала решетки и его дальнейшей релаксацией.

При других ядерных реакциях после распада составного ядра получают продукты реакции, отличающиеся от исходных частиц. Далее приведены некоторые характерные значения параметров реакций. Сечения поглощения тепловых нейтронов: H – 6,33 б, C –  $3,8 \cdot 10 \text{ б}$ , N – 1,88 б.

На один поглощенный тепловой нейтрон для Н испускается один фотон с  $\hbar\omega \leq 4,95$  МэВ, для Ве – широкий спектр ( $\hbar\omega < 1$  МэВ – 0,65 фотона; 1... 2 МэВ – 0,6; 2...3 – 0,27; 3...5 – 0,23; 5...7 – 0,25; 7...9 – 0,38; 9...10, 16 – 0,021).

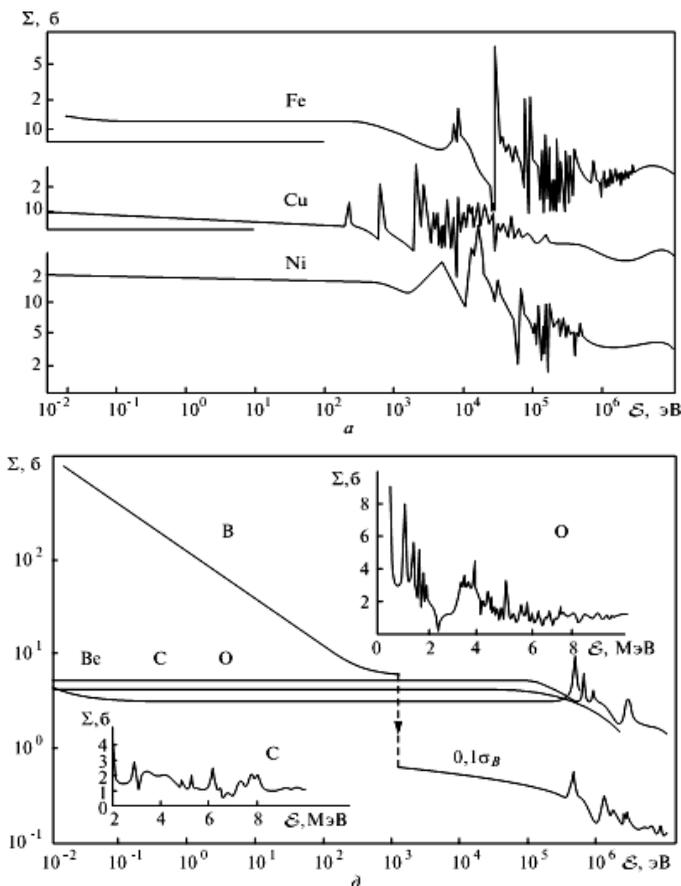


Рис. 1.116. Полные сечения рассеяния и поглощения нейтронов для различных элементов

Сечение реакции на тепловых (300 К) нейтронах  $^{14}\text{H} + n = ^{14}\text{C} + p + 0,626$  МэВ равно 1,75 б;  $^{17}\text{O} + n = ^{14}\text{C} + \alpha + 1,72$  МэВ – 0,5 б; сечение реакции на нейтронах спектра деления  $^{54}\text{Be} + n = ^{54}\text{Mn} + p - 2,93$  МэВ равно 0,011 б (альфа-частица – ядро гелия). Сечение упругого рассеяния тепловых нейтронов на Н – 38 б, С – 4,8 б, N – 10 б. Время замедления нейтронов от 2 МэВ до 0,025 эВ: в Ве –  $6,7 \cdot 10^{-3}$  с, в С (графит) –  $1,5 \cdot 10^{-5}$  с.

Характерные сечения ядерных реакций показаны на рис. 1.17.

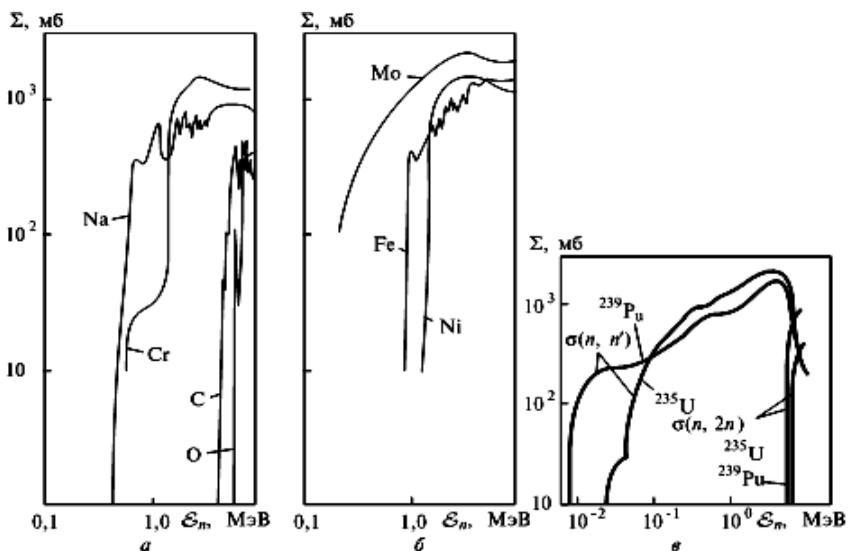


Рис. 1.117. Сечения неупругого рассеяния ( $n, n'$ ) и реакции ( $n, 2n$ ) (а – в)

Итак, для того чтобы учесть возникающие под действием пучков высокоэнергетичных ионов термоядерные и ядерные реакции, а также взаимодействие с твердым телом образующихся нейтронов необходимо сначала определить начальные пространственные и энергетические характеристики рождающихся быстрых заряженных частиц (что включает определение параметров ядерных реакций и описание движения нейтронов среди рассеивающих и поглощающих центров), а затем уже анализировать описанные ранее процессы релаксации заряженных частиц в веществе. Поскольку нейтронные потоки проникают на большие глубины (порядка  $10^1 \dots 10^2$  см), они вызывают радиационные повреждения в объеме (распухание, охрупчивание, радиационную ползучесть и др.). Пучки высокоэнергетичных ионов используют для моделирования воздействия на материалы потоков нейтронов в ядерных и термоядерных реакторах. При этом основным критерием подобия является энергия атома отдачи, рожденного при упругом взаимодействии нейтрона и иона соответствующей энергии и массы. Однако из-за малого пробега ионов по сравнению с нейтронами моделировать таким образом радиационные повреждения в объеме материала затруднительно.

## 1.6. Диэлектрические, оптические и магнитные свойства твердых тел

### 1.6.1. Параметры взаимодействия среды с электромагнитным полем

Для учета взаимного влияния электромагнитного поля (характеризуемого векторами  $\mathbf{E}$ ,  $\mathbf{B}$ ) и среды вводят группу векторов: индукции электрического поля  $\mathbf{D}$ , напряженности магнитного поля  $\mathbf{H}$  и плотности электрического тока  $\mathbf{j}$ , связанных между собой уравнениями Максвелла. Для замыкания системы уравнений используют соотношения, описывающие поведение среды под действием поля. Существует два способа учета этого влияния: мультипликативный (когда свойства среды описываются факторами, связывающими  $\mathbf{j}$  и  $\mathbf{E}$ ,  $\mathbf{D}$  и  $\mathbf{E}$ ,  $\mathbf{B}$  и  $\mathbf{H}$ ) и аддитивный (когда вместо отношений  $\mathbf{E}/\mathbf{D}$  и  $\mathbf{B}/\mathbf{H}$  записывают их разности).

Векторы напряженности и индукции электрического поля  $\mathbf{E}$  и  $\mathbf{D}$  связаны для изотропной диэлектрической среды соотношением

$$\mathbf{D} = \epsilon_0 \mathbf{E} + \mathbf{P} = \epsilon_0 (1 + \chi_e) \mathbf{E} = \epsilon_0 \epsilon \mathbf{E}, \quad (1.82)$$

где  $\mathbf{P}$  – вектор поляризации единицы объема;  $\chi_e$  – диэлектрическая восприимчивость;  $\epsilon$  – относительная диэлектрическая постоянная; в анизотропной среде  $\chi_e$  и  $\epsilon$  являются тензорами. Аналогично, для магнитного поля

$$\mathbf{B} = \mu_0 (\mathbf{H} + \mathbf{M}) = \mu_0 (1 + \chi_m) \mathbf{H} = \mu_0 \mu \mathbf{H}, \quad (1.83)$$

где  $\mathbf{B}$ ,  $\mathbf{H}$  – векторы индукции и напряженности магнитного поля;  $\mathbf{M}$  – намагниченность;  $\chi_m$  – магнитная восприимчивость;  $\mu$  – относительная магнитная проницаемость;  $\mu_0$  – магнитная постоянная.

Выражения (1.82) и (1.83) носят характер не законов, а определений. Для вычисления  $\mathbf{D}$  и  $\mathbf{B}$  необходимо с учетом свойств вещества найти значения  $\epsilon$  и  $\mu$  ( $\mathbf{P}$  и  $\mathbf{M}$ , или  $\chi_e$  и  $\chi_m$ ).

#### *Комплексная диэлектрическая проницаемость*

Быстропеременное электромагнитное поле иначе, чем квазистационарное, взаимодействует с веществом. Смещение зарядов, вызывающее поляризацию, происходит за конечные времена, так что

при высоких частотах состояние среды может «не успевать» подстраиваться под поле; диэлектрическая проницаемость связана с теми механизмами поляризации, которые успевают следить за полем; для наиболее медленных ориентационных процессов критические частоты поля, при превышении которых «отключается» этот процесс, лежат в СВЧ-диапазоне, для ионной поляризации – в инфракрасной, для электронной – в ультрафиолетовой области частот.

Соответствующие значения диэлектрической проницаемости слабо зависят от частоты  $\omega$  излучения между «критическими» частотами и почти скачком снижаются при «выключении» очередного процесса (рис. 1.118).

Из-за инерционности процессов поляризации возникает сдвиг фаз между полем и вектором поляризации, что сопровождается поглощением энергии электромагнитного поля. Это описывают, представляя  $\epsilon$  в виде комплексной величины:

$$\epsilon = \epsilon_1 + i\epsilon_2 .$$

Процессам, аналогичным происходящим в постоянном поле, соответствует действительная часть  $\epsilon_1$ , а диссипативные процессы и сдвиг фаз отражает мнимая составляющая  $i\epsilon_2$ . Применение комплексных чисел здесь объясняется тем, что при колебательных процессах многие функциональные зависимости выражаются через экспоненциальные функции комплексных переменных, описывающих как осцилляции, так и их поглощение или усиление, а экспонента – удобная для аналитических выкладок функция.

В низкочастотном пределе  $\epsilon$  является действительной величиной (см. рис. 1.118). Мнимая часть  $\epsilon_2$  значительна в окрестностях «критических» частот излучения, но мала вдали от этих частот: здесь механизмы поляризации либо слишком быстры, и для них поле квазистационарно, либо слишком медленны, и их можно не учитывать.

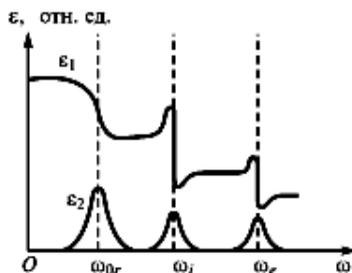


Рис. 1.118. Зависимости действительной ( $\epsilon_1$ ) и мнимой ( $\epsilon_2$ ) частей комплексной диэлектрической проницаемости от частоты

## *Комплексный показатель преломления*

Кроме  $\epsilon$  для описания взаимодействия электромагнитного поля со средой применяют комплексный показатель преломления, который однозначно выражает скорость волны, ее затухание, отражение от границы тела и другие характеристики.

Электромагнитное поле в квазинейтральной изотопной среде описывается решением уравнений:

$$\begin{aligned} \operatorname{rot}\mathbf{E} &= -\partial\mathbf{B}/\partial t, \quad \operatorname{div}\mathbf{B} = 0, \\ \operatorname{rot}\mathbf{B}/(\mu_0\mu) &= \partial(\epsilon_0\epsilon\mathbf{E})/\partial t + \sigma\mathbf{E}, \quad \operatorname{div}\epsilon\epsilon_0\mathbf{E} = 0. \end{aligned} \quad (1.84)$$

Полагая  $\mu = 1$ ,  $\epsilon = \text{const}$ , из (1.84) можно получить, учитывая, что скорость света  $c = (\epsilon_0\mu_0)^{-1/2}$ :

$$\nabla^2\mathbf{E} = \left(\epsilon/c^2\right)\partial^2\mathbf{E}/\partial t^2 + \left[\sigma/(\epsilon_0c^2)\right]\partial\mathbf{E}/\partial t -$$

волновое уравнение, имеющее решение вида

$$\mathbf{E} = \mathbf{E}_0 \exp\left[i(\mathbf{k}\mathbf{r} - \omega t)\right];$$

здесь  $\omega$  – частота электромагнитных колебаний;  $\nabla^2$  – лапласиан;  $i$  – мнимая единица;  $\mathbf{k}$  – волновой вектор,

$$k = (\omega/c)\left[\epsilon + i\sigma/(\epsilon_0\omega)\right]^{1/2}$$

(волновое число  $k$  в общем случае – комплексное). Для вакуума

$$k = \omega/c,$$

что соответствует волне, распространяющейся со скоростью света  $c$ . В среде скорость определяется как  $c/N$ , где  $N$  – комплексный показатель преломления:

$$N = \left[\epsilon + \sqrt{i\sigma}(\epsilon_0\omega)\right]^{1/2}, \quad (1.85)$$

$$N = \tilde{n} + i\tilde{k}. \quad (1.86)$$

Волновое число  $k = \tilde{n}\omega/c + i\tilde{k}\omega/c$ .

## *Коэффициент поглощения*

Коэффициент поглощения  $\alpha$  (доля энергии, поглощаемой при прохождении излучения через прозрачный слой вещества малой единичной толщины) определяется как

$$\alpha = \operatorname{Re}(\mathbf{jE})/|\mathbf{E}|^2 = 2\tilde{n}\tilde{k}\omega/c. \quad (1.87)$$

Если излучение падает нормально на поверхность материала, то отношение комплексных амплитуд отраженной и падающей волн есть

$$E_2/E_1 = (1 - N)/(1 + N),$$

что соответствует вещественному коэффициенту отражения

$$R = |(1 - N)/(1 + N)|^2 = [(\tilde{n} - 1)^2 + \tilde{k}^2] / [(\tilde{n} + 1)^2 + \tilde{k}^2]. \quad (1.88)$$

Из (1.85), (1.86) получают также выражения через  $\tilde{n}$  и  $\tilde{k}$  для диэлектрической проницаемости:

$$\epsilon_1 = \tilde{n}^2 - \tilde{k}^2, \quad \epsilon_2 = 2\tilde{n}\tilde{k}. \quad (1.89)$$

Приведенные зависимости найдены при весьма общих допущениях и верны для самых различных сред (как для газовой плазмы, так и для плазмы твердого тела).

## 1.6.2. Диэлектрические свойства

### *Постоянное поле*

В хороших проводниках с большой электропроводностью  $\sigma \rightarrow \infty$  наличие в среде ненулевого электростатического поля приводит к возникновению токов – движению зарядов, которые стремятся расположиться так, чтобы уменьшить это поле; поэтому внутри проводников при отсутствии токов внешнего поля нет – оно скомпенсировано полем, созданным наведенными поверхностными зарядами. В терминах (1.82) это соответствует  $\mathbf{D} = \mathbf{P}$ ,  $\chi_e \rightarrow \infty$ ,  $\epsilon \rightarrow \infty$ . Для квазинейтральной непроводящей среды взаимодействие ее с внешним электростатическим полем удобнее выражать не через точечные заряды (которые к тому же связаны), а через пары противоположно заряженных частиц – диполи. Количественная характеристика диполя – дипольный момент

$$\mathbf{p} = q\mathbf{R}, \quad (1.90)$$

где  $q$  – заряд каждой из частиц диполя;  $\mathbf{R}$  – расстояние между ними. Поле диполя в вакууме (определенное как сумма кулоновских полей, создаваемых точечными зарядами) выражается как

$$E(r) = \left[ 3(\mathbf{pr})\mathbf{r} - r^2\mathbf{p} \right] / (4\pi\epsilon_0 r^5). \quad (1.91)$$

В реальной среде диполи образуются ионом и связанным с ним электроном, атомами асимметричной молекулы и другими квантово-механическими объектами, в которых заряды делокализованы по пространству; однако электрические поля, создаваемые такими системами, близки к полю (1.91), особенно на значительных расстояниях, что позволяет также характеризовать их постоянным дипольным моментом  $\mathbf{p}$ .

Ориентация диполей во внешнем электростатическом поле вызывает создание на границах тела нескомпенсированных (связанных) зарядов, которые и создают в среде поле, частично компенсирующее внешнее. Поверхностная плотность зарядов

$$\Sigma = (-1/V) \sum_i \mathbf{p}_i \mathbf{n} = -(1/V) \mathbf{Pn},$$

где сумму берут по всем диполям в приповерхностном единичном объеме  $V$ ;  $\mathbf{n}$  – единичный вектор, нормальный к поверхности.

Внутри диэлектрика поле, однако, превышает это ослабленное внешнее поле ( $\mathbf{E}_1 < \mathbf{E}$ ): с любым элементом объема внутри диэлектрика граничат с одной стороны положительные, с другой – отрицательные заряды диполей, поэтому локальное поле в нем

$$\mathbf{E}_л = (\epsilon + 2)\mathbf{E}/3,$$

которое при  $\epsilon \gg 1$  значительно превышает внешнее поле.

В любых атомах (молекулах) в электрическом поле происходит электронная поляризация, причем в случае изотропной среды

$$\mathbf{p} = \alpha \mathbf{E}_л, \quad (1.92)$$

где  $\alpha$  – поляризуемость атомов (молекул), зависящая от их волновых функций. В ионных кристаллах под действием внешнего поля происходит дополнительная к электронной *ионная поляризация* – смещение разноименных ионов в противоположных направлениях; в ковалентных кристаллах она также описывается формулой (1.92), но с другим значением  $\alpha$ .

Суммарный вектор поляризации при применимости (1.92) может быть представлен как

$$\mathbf{P} = \mathbf{E}_л \sum_i N_i \alpha_i / V = [(\epsilon + 2)\mathbf{E}/3] \sum_i N_i \alpha_i / V, \quad (1.93)$$

откуда, принимая во внимание (1.90), получают соотношение Клаузиуса – Мосотти, связывающее атомную поляризуемость и макроскопическую диэлектрическую проницаемость:

$$\sum_i N_i \alpha_i / V = 3\epsilon_0 (\epsilon - 1) / (\epsilon + 2).$$

В асимметричных молекулах, обладающих поляризацией и при отсутствии внешнего поля (рис. 1.119), при его наложении происходит преимущественная ориентация диполей по направлению внешнего поля. Полной ориентации препятствуют, во-первых, кристаллические связи: выбирать приходится среди дискретного числа возможных состояний молекул в кристалле, и процесс ориентации представляется совокупностью скачкообразных переходов. Во-вторых, температурные флуктуации оказывают хаотизирующие воздействия, «размазывая» функцию распределения диполей по дискретным или непрерывным (например, в жидкости или газе) углам (угол между направлениями диполя и внешнего поля). Ориентационная поляризуемость вследствие ориентации диполей дает вектор поляризации

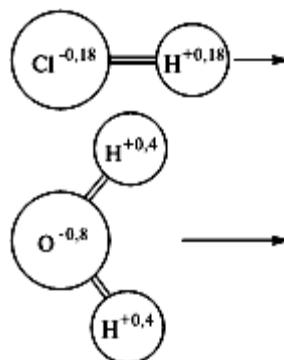


Рис. 1.119. Полярные молекулы (цифрами обозначены эффективные заряды в долях  $e$ )

$$\mathbf{P} = Np^2 \mathbf{E} / (V \cdot 3k_B T),$$

а диэлектрическая восприимчивость с учетом (1.82)  $\chi_{0r} = Np^2 / (V \cdot 3\epsilon_0 k_B T)$ . Суммарную диэлектрическую проницаемость при одновременном проявлении всех механизмов (электронная, ионная, ориентационная поляризуемость) записывают в виде

$$\epsilon = 1 + \chi_e + \chi_i + \chi_{0r}, \quad (1.94)$$

где  $\chi_e$  и  $\chi_i$  связаны с соответствующими векторами поляризации (1.93) соотношениями (1.82). Первые три слагаемых в (1.94) не зависят от температуры, а  $\chi_{0r}$  ей обратно пропорциональна; поэтому в телах из асимметричных молекул, где  $\chi_{0r} \neq 0$ , значение  $\epsilon$  падает с ростом температуры.

## Граничные частоты

Указанные механизмы поляризуемости проявляются в определенных частотных диапазонах: при повышении частоты излучения  $\omega$  последовательно выключаются ориентационная, ионная и электронная составляющие поляризуемости (см. рис. 1.118).

Вероятность перехода молекулы в другую ориентацию за один цикл тепловых колебаний равна относительной части молекул, имеющих достаточную для перехода энергию  $E$ ; характерное время перехода  $t$  пропорционально вероятности перехода за один цикл колебаний и обратно пропорционально частоте колебаний. Так как распределение молекул по энергиям – больцмановское (в пренебрежении изменением плотности состояний при изменении энергии примерно на  $k_B T$ ), характерная частота

$$\omega_{0r} = \omega_D \exp[-E/(k_B T)].$$

Если  $E \ll k_B T$ , то частоты переходов  $\omega_{0r} \approx \omega_D \approx 10^{11} \dots 10^{13}$  с. Однако при  $E \geq k_B T$  инерционность ориентационной поляризуемости резко возрастает и соответствующий предел сдвигается в более длинноволновую область; поэтому при уменьшении температуры для ряда веществ наблюдается резкий спад низкочастотной диэлектрической проницаемости, соответствующий «выключению» ориентационного механизма.

Граничная частота для ионной поляризуемости  $\omega_i$  – собственная частота колебаний атомов в поле действия возвращающих сил; она соответствует длинноволновой граничной частоте оптических колебаний (см. разд. 1.2).

Частота  $\omega_e$ , соответствующая границе электронной поляризуемости, связана с колебательными движениями валентных электронов в атомах; аппроксимируя действующую на «отклонившийся» на  $\Delta x$  электрон «возвращающую силу»  $\mathbf{F}_e$  в виде  $\mathbf{F}_e = -C_e \Delta x$ , получают собственную частоту колебаний  $\omega_{0r} = (C_e/m_e)^{1/2}$  (где  $C_e$  связана со стационарной поляризуемостью атомов  $\alpha_{0r}$ ). При  $\omega \cong \omega_{0r}$  значительно изменяется высокочастотная электронная поляризуемость  $\alpha_e$ , однако критические изменения в диэлектриче-

ской проницаемости, связанной с  $\alpha_e$  соотношениями Клаузиуса – Мосотти, происходят при частоте  $\omega_e$  несколько сдвинутой в длинноволновую область:

$$\omega_e = \left[ \omega_{e0}^2 - e^2 n_e / (3m_e \epsilon_0) \right]^{1/2}.$$

Значения  $\omega_{0r}$  лежат обычно в радиоволновом,  $\omega_i$  – в инфракрасном,  $\omega_e$  – в ультрафиолетовом диапазонах спектра.

### *Пьезоэлектричество и электрострикция*

В некоторых молекулах кристаллов, которые можно представить как несколько расположенных под углом диполей, при сжатии или растяжении возникает электрическая поляризация, т.е. электростатическое поле; и наоборот: при наложении внешнего электрического поля происходит сжатие (растяжение) образца (рис. 1.120).

Причина пьезоэффекта – поворот диполей при деформации, в результате которого суммарный дипольный момент становится не равен нулю, и поворот диполей в электрическом поле, дающий растяжение молекулы в одном направлении и сжатие – в другом. Наиболее силен пьезоэффект в сегнетовой соли  $\text{Na-KCuH}_4\text{O}_6 \cdot 4\text{H}_2\text{O}$ , значительно слабее – в кварце  $\text{SiO}_2$ .

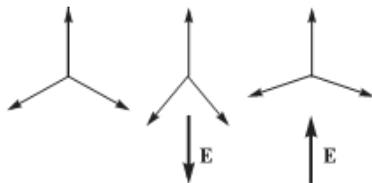


Рис. 1.120. Деформация молекул под действием электрического поля

Для любого ионного кристалла вне зависимости от того, является он пьезоэлектриком или нет, в электрическом поле наблюдается намного меньшая по величине деформация, пропорциональная не  $E$ , как при пьезоэффекте, а  $E^2$ . Это явление (**электрострикция**) связано с нарушением закона Гука (см. разд. 1.2). Если деформация решетки вызвана изменением температуры, то явление возникновения поляризации называют пироэлектрическим эффектом.

### *Сегнетоэлектрики*

Сегнетоэлектрики – пьезоэлектрики, у которых даже при отсутствии деформации имеются ненулевые дипольные моменты, причем упорядоченное расположение диполей более энергетически выгодно, чем неупорядоченное. При повышении температуры выше точки Кюри вследствие тепловых колебаний упорядоченное расположение диполей нарушается, тогда разрушается сегнетоэлектрическое состояние. Большие значения объемной поляризации имеют такие кристаллы, как  $\text{BaTiO}_3$  ( $P = 0,26 \text{ Кл/м}^2$ ,  $T_C = 393 \text{ К}$ ) и  $\text{KNbO}_3$  ( $P = 0,3 \text{ Кл/м}^2$ ,  $T_C = 710 \text{ К}$ ). Кристалл сегнетоэлектри-

ка не обязательно проявляет макроскопические признаки объемной поляризации, поскольку он разделен на множество доменов (областей) с различными направлениями поляризации; толщина переходных слоев (доменных стенок) составляет одно-два межатомных расстояния. При наличии внешнего электрического поля домены с направлением поляризации, близким к направлению  $E$ , растут за счет доменов с другими направлениями. Сегнетоэлектрики при температуре выше  $T_C$ , когда спонтанная поляризация отсутствует, обладают очень высокой диэлектрической постоянной (так, для керамики  $\text{BaSrTiO}_3$   $\epsilon = 6 - 10$ ).

### *Электреты*

Электреты – постоянно поляризованные диэлектрики, способные длительно сохранять наэлектризованное состояние и создавать электрическое поле в окружающей среде (электрические аналоги постоянных магнитов). Электреты изготовляют из расплавов различных органических и неорганических диэлектриков охлаждением в сильном электрическом поле. Они могут оставаться поляризованными длительное время – от нескольких часов до нескольких лет, однако у некоторых веществ со временем направление поляризации может измениться на противоположное.

## 1.6.3. Оптические свойства твердых тел

### *Взаимодействие излучения со свободными электронами в металлах. Низкочастотное излучение*

В широком диапазоне энергии квантов (от длинноволновой части спектра до ультрафиолетовой) оптические свойства металлов связаны с наличием в зоне проводимости большого количества квазисвободных электронов (как в газовой плазме). Металлы обладают высокой электропроводностью; это позволяет пренебречь величиной  $\epsilon$  в формуле для комплексного показателя преломления (1.85), так что вещественная и мнимая части показателя преломления равны по абсолютной величине:

$$\tilde{n} + i\tilde{k} = \left[ \sigma / (2\omega\epsilon_0) \right]^{1/2} (1 + i). \quad (1.95)$$

Наиболее важное следствие, вытекающее отсюда, состоит в том, что отражательная способность твердого тела становится очень большой. Из формул (1.88), (1.95) следует

$$R \approx 1 - 2(2\epsilon_0\omega/\sigma)^{1/2} \quad (1.96)$$

(соотношение Хагена – Рубенса). Отклонение от идеальной отражательной способности пропорционально  $(2\epsilon_0\omega/\sigma)^{1/2}$ , оно намного меньше единицы даже в той области, где  $\omega$  приближается к инфракрасным частотам.

Коэффициент поглощения  $\alpha$  – см. (1.87) – почти не зависит от  $\omega$  и пропорционален  $a$ .

### Высокочастотные излучения

Если электрическое поле меняется столь быстро, что электроны не успевают претерпевать соударения, т.е. если  $\omega\tau > 1$  (где  $\tau$  – время свободного пробега свободных электронов в классической формуле для электропроводности  $\sigma = ne^2\tau/m^*$ , то возникает частотная зависимость электропроводности  $\sigma$ . В некоторых достаточно общих допущениях для этого случая на основе анализа кинетического уравнения Больцмана можно получить

$$\sigma(\omega) = \sigma(0)(1 + i\omega\tau) / (1 + \omega^2\tau^2), \quad (1.97)$$

где  $\sigma(0)$  – обычная статическая электропроводность металла. В высокочастотном пределе значение  $\varepsilon$  можно считать приближенно равным единице, поскольку описываемая этим фактором поляризация среды неэффективна из-за инерционности (оптическим частотам соответствуют быстропеременные поля). Тогда, подставив (1.97) в (1.85), (1.86), получают

$$\tilde{n}^2 - \tilde{k}^2 = 1 - \varepsilon_0^{-1}\sigma(0)\omega\tau / [\omega(1 + \omega^2\tau^2)] = 1 - (\omega_{pl}\tau)^2 / [1 + (\omega\tau)^2], \quad (1.98)$$

$$2\tilde{n}\tilde{k} = \varepsilon_0^{-1}\sigma(0)\omega\tau / [\omega(1 + \omega^2\tau^2)] = (\omega_{pl}/\omega)\omega_{pl}\tau / [1 + (\omega\tau)^2], \quad (1.99)$$

где  $\omega_{pl} = (n_e e^2 / \varepsilon_0 m_e)^{1/2}$  – плазменная частота (здесь  $n_e$  – концентрация).

Анализ (1.98), (1.99) показывает, что высокочастотная часть спектра разбивается на две подобласти: *область релаксации* с  $\omega$ , лежащей в пределах  $1/\tau < \omega < \omega_{pl}$ , и *область ультрафиолетовой прозрачности* с  $\omega > \omega_{pl}$ . В области релаксации  $\alpha \approx 1/(\omega^2\sigma)$ .

$$R \approx 1 - 2/(\omega_{pl}\tau) \leq 1.$$

В коротковолновой области  $\omega > \omega_{pl}$  вещественная часть становится положительной, отражательная способность спадает до нуля,  $\alpha$  спадает примерно как  $\omega_{pl}^2/(\omega^2\tau\varepsilon)$  (рис. 1.121).

### Межзонные переходы в металлах

Внутризонные переходы, описываемые рассмотренной ранее моделью свободных электронов, доминируют в некоторых простых металлах (рис. 1.122). Однако даже для них уже заметно влияние межзонных переходов, т.е. переходов с одной ветви дисперсионной зависимости  $E = E(k)$

на другую: в алюминии такой переход приводит к снижению отражательной способности при  $\hbar\omega = 1,4$  эВ.

Межзонные переходы в металлах влияют на оптические характеристики в широкой области спектра. С увеличением энергии квантов эффективное число электронов, участвующих в фотопроцессах (в пересчете на один атом), сначала постоянно и близко к числу свободных электронов (так, для Ag и Си – порядка единицы), а затем, при превышении порогового значения для прямого перехода на другую ветвь зависимости  $E = E(k)$ , оно плавно нарастает: в фотопроцессы включаются другие валентные электроны (например, для Ag и Си – 3d-электроны) (рис. 1.123).

При малых, допороговых энергиях квантов преобладают описанные ранее внутризонные переходы (поглощение свободными электронами).

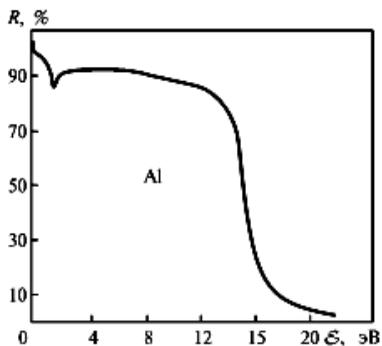


Рис. 1.122. Коэффициент отражения Al

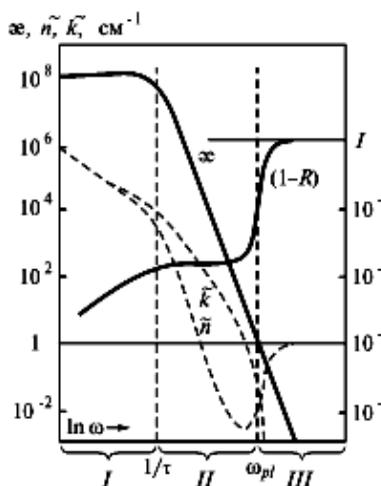


Рис. 1.121. Оптические характеристики металлов: I – область Хагена – Рубенса; II – область релаксации; III – область ультрафиолетовой прозрачности

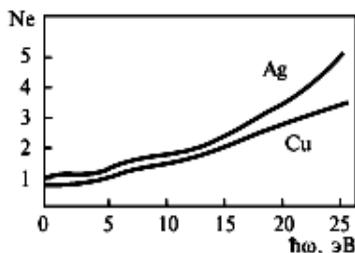


Рис. 1.123. Эффективное число электронов на один атом, дающих вклад в оптические свойства, в зависимости от энергии

Пороговую энергию отсчитывают на дисперсионной зависимости  $E = E(k)$  по вертикали (т.е. при постоянстве  $k$ ) от самого высокого занятого электронного состояния (вблизи уровня Ферми) до нижнего свободного состояния (рис. 1.124). При запороговых значениях энергии квантов становятся возможными переходы из состояний под уровнем Ферми в состояния над ним. Поглощение, отражение и другие оптические характеристики для ме-

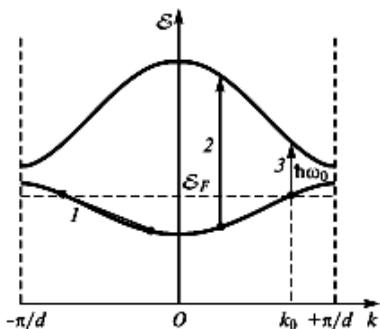


Рис. 1.124. Внутризонные (1) и межзонные (2, 3) переходы в металлах (2 – заповоговые, 3 – приповоговые значения энергии квантов)

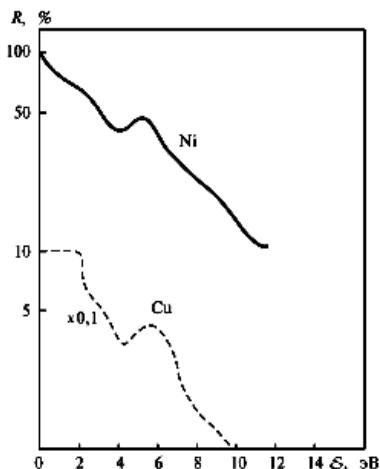


Рис. 1.125. Коэффициенты отражения для  $d$ -переходных металлов

ни. Переходы между внутренними уровнями и разрешенными зонами (валентной и проводимости) дают полосы поглощения в рентгеновском диапазоне, причем разница между металлами и диэлектриками для этого фотопроцесса незначительна: большую роль играет внутреннее строение атомов. У легких элементов с малым числом внутренних электронных орбиталей наиболее глубокие уровни по энергии соответствуют области вакуумного ультрафиолета и мягкого рентгена ( $\hbar\omega \cong 100 \dots 1000$  эВ). Тяжелые элементы с большим зарядом ядра имеют более широкий энергетический

диапазон при этом определяются как внутризонными, так и межзонными переходами, так что комплексная диэлектрическая проницаемость может быть представлена как

$$\epsilon_1 = \epsilon_1^f + \epsilon_1^b, \quad \epsilon_2 = \epsilon_2^f + \epsilon_2^b,$$

где  $\epsilon_1^f$  и  $\epsilon_2^f$  определяются из соотношений для газа свободных электронов, а  $\epsilon_1^b$  и  $\epsilon_2^b$  описывают вклад межзонных переходов. В соответствии с соотношениями (1.88), (1.89) эти переходы вносят вклад не только в поглощение, но и в изменение коэффициента отражения.

В переходных металлах уровень Ферми пересекается  $d$ -состояниями, и переходы между различными полосоми включаются уже при малых значениях энергии квантов (например, для Ni при  $\hbar\omega_0 = 0,3$  эВ), и в этом случае  $R \sim 0,3 \dots 0,5$  (рис. 1.125), т.е. в коротковолновой области  $\hbar\omega > \hbar\omega_0$  переходные металлы плохо отражают свет.

#### Межзонные переходы в рентгеновском спектре

При больших энергиях квантов ( $\hbar\omega \geq 10^2 \dots 10^4$  эВ) становятся возможными прямые переходы с участием низколежащих зон внутренних электронов, представляющих собой несколько уширенных атомарных уровней.

спектр внутренних уровней, от слабосвязанных внешних до сильно притягиваемых к ядру внутренних электронов. Поэтому именно тяжелые элементы непрозрачны в области жесткого излучения и используются в качестве экранов для радиационной защиты.

### Межзонные переходы в неметаллах

Поглощение, связанное с межзонными переходами, начинается при энергии  $\hbar\omega = \Delta E_g - \hbar\omega_{pl} - E_{ex}$ , где  $\Delta E_g$  – ширина запрещенной зоны (с учетом непрямых переходов);  $\hbar\omega_{pl}$  – энергия фонона, который может быть поглощен при переходе;  $E_{ex}$  – энергия связи экситона, который может образоваться в результате перехода; эти граничные процессы имеют место при поглощении фотона и фонона с возбуждением электрона из верха валентной зоны на экситонный уровень. Вероятности таких процессов (непрямых межзонных переходов, рис. 1.126) зависят от числа фононов, т.е. от  $T$ . При энергиях  $\hbar\omega = \Delta E_g + \hbar\omega_{pl} - E_{ex}$  включаются процессы с возбуждением фонона, образуются «пороги». При повышении энергии квантов в поглощение включаются прямые переходы, имеющие значительно большую вероятность; пороговое значение  $\hbar\omega$  равно расстоянию  $E_g^*$  по вертикали (т.е. при постоянном  $\mathbf{k}$ ) между максимумом валентной зоны и нижней ветвью зоны проводимости за вычетом  $E_{ex}$ . При высоких температурах  $\propto$  пропорционально  $(\hbar\omega - E_g^*)^{1/2}$ , с понижением температуры проявляется экситонный пик.

Спектр поглощения за порогом определяется в основном прямыми межзонными переходами, причем пики и пороги на зависимостях для коэффициентов поглощения проявляются при тех энергиях фотона, где подобные пики и пороги имеются на объединенной плотности состояний.

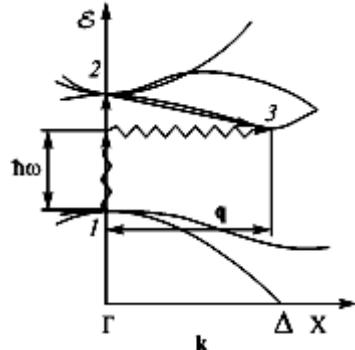


Рис. 1.126. Непрямой межзонный переход в Si с поглощением фотона с энергией  $\hbar\omega$  и поглощением (или испусканием) фонона с импульсом  $q$ : 1 – начальное, 2 – промежуточное, 3 – конечное состояние электрона

### Поглощение свободными носителями заряда в полупроводниках

Такое поглощение аналогично обратному тормозному поглощению в плазме; как и в этом случае, оно существенно в длинноволновой (инфракрасной) области спектра. Для коэффициента поглощения  $\propto = \omega\varepsilon_2/c$

$$\alpha = (1/c) \left( \omega_{pl}^2 / \omega_\tau \right) \omega_\tau^2 / \left( \omega_\tau^2 + \omega^2 \right).$$

При высоких частотах ( $\omega \gg \omega_{pl}, \omega_\tau$ )  $\epsilon' \ll \epsilon''$  и  $\epsilon' \cong \epsilon_L = 1 + \alpha_i + \alpha_e$ .  
 В области частот, где отсутствует дисперсия

$$\alpha = (1/c) \omega_{pl}^2 \omega_\tau / \omega^2$$

(формула Друде для коэффициента поглощения электронами проводимости), рис. 1.127.

Отклонения от классической модели Друде описываются в терминах комплексного удельного сопротивления  $\rho = 1/\sigma$ : в этой модели  $\rho(\omega)$  распадается на два члена, один из которых не зависит от частоты и определяется расстоянием, а другой не зависит от рассеяния – инерционный член

$$\rho(\omega) = \omega_\tau / \left( \epsilon_0 \omega_{pl}^2 \right) - i\omega / \left( \epsilon_0 \omega_{pl}^2 \right).$$

Кроме поглощения взаимодействие длинноволнового излучения с носителями заряда в полупроводнике приводит к отражению в соответствии с законом Хагена – Рубенса (1.96) (как и в металле), но коэффициент отражения здесь зависит от степени легирования (рис. 1.128).

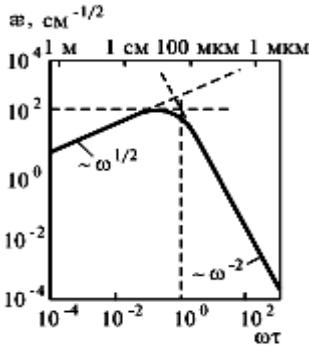


Рис. 1.127. Поглощение Друде свободными носителями в полупроводнике (Ge)

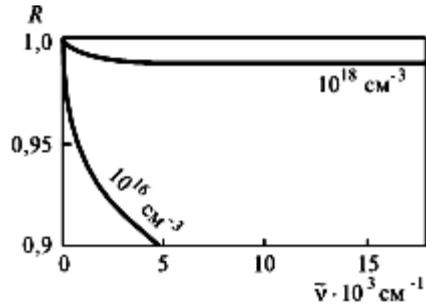


Рис. 1.128. Коэффициент отражения Ge при разных степенях легирования

### Примесное поглощение

Если примесный атом, создающий уровень в запрещенной зоне, нейтрален, то под действием кванта излучения электрон из валентной зоны может быть заброшен на акцепторный уровень или с донорного уровня – в зону проводимости. Такие переходы аналогичны фотоионизации в плазме и сопровождаются поглощением в области частот  $\omega \geq E_i / \hbar$ , где  $E_i$  – рас-

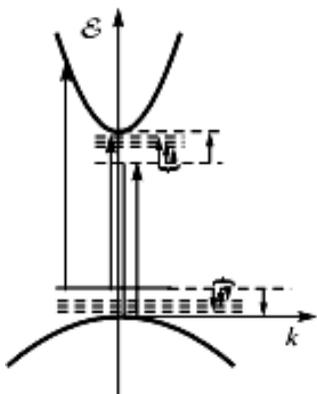


Рис. 1.129. Схема возможных оптических переходов в примесном кристалле

стояние от примесного уровня до границы запрещенной зоны. Спектр такого перехода представляет собой ступеньку, простирающуюся за пороговое значение  $\hbar\omega = E_i$  в область больших энергий; как правило, сечение перехода максимально у порога.

У примесного атома могут возникать возбужденные состояния. Переходы между ними, между основным и возбужденными состояниями могут давать вклады в виде линий. Переходы между указанными уровнями и зонами (валентной проводимости) дают вклады в виде ступенек. К указанным состояниям и переходам нейтрального атома примеси добавляются спектры ионизованных примесных атомов.

Часто соответствующие линии сильно уширены, а края ступенек размыты (при росте концентрации примеси линии превращаются в полосы и зоны, см. разд. 1.1). Вклады уровней примеси пропорциональны заселенности этих уровней; если  $E_i \ll \Delta E_g$ , то при  $k_B T \approx E_i$  и  $k_B T > E_i$  происходит их ионизация, т.е. заселенность резко падает, и пропадает соответствующий вклад в спектры.

На рис. 1.129 видно, что одни переходы (длинные стрелки) имеют энергию, близкую к  $\Delta E_g$ , а другие (короткие стрелки) – намного меньше. Соответствующие вклады лежат вблизи порога фундаментального поглощения  $\hbar\omega = \Delta E_g$  (ближний инфракрасный и видимый диапазоны) и в далекой инфракрасной области спектра.

### Экситоны

Экситоны также имеют ряд уровней (основное и возбужденное состояния), расположенных у дна зоны проводимости, и дают подобные вклады в двух областях спектра – при  $\hbar\omega \leq \Delta E_g$  (образование экситона при фотовозбуждении электрона валентной зоны) и в далеком инфракрасном диапазоне (фотораспад экситона с образованием свободных носителей заряда). Кроме уровней структурных дефектов, примесных, экситонных могут образовываться уровни комплексов – примесь-экситон и т.п.

В сильнолегированных вырожденных полупроводниках уровень Ферми расположен в глубине зоны проводимости (на  $\Delta E$ ). В этом случае невозможны переходы на занятые разрешенные уровни края этой зоны, т.е. видимый край фундаментального поглощения смещается в противоположном направлении – в сторону больших энергий квантов (примерно на  $\Delta E$ ).

## Взаимодействие излучения с фононами

При взаимодействии кванта света с кристаллической решеткой возможны два механизма. В первом, однофононном, механизме каждый падающий в кристалл фотон создает один фонон, причем, поскольку импульс фотона близок к нулю, создается фонон тоже с нулевым импульсом, т.е. один из оптических (поперечный или продольный) фононов (энергия акустического фонона при  $\mathbf{k} = 0$  равна нулю). Во втором механизме каждый поглощенный фотон может привести к излучению или поглощению двух, трех и более как оптических, так и акустических фононов, сумма импульсов которых близка к нулю, а сумма энергий равна энергии фотона.

В области частот, где вносит вклад однофононное поглощение (однофононный резонанс, полоса остаточных лучей), т.е. в далекой инфракрасной области спектра, имеется связанный с этим процессом пик поглощения, а спектр отражения имеет отчетливо выраженные особенности, изменяясь почти от нуля до 100 %. Этот частотный интервал определяется значениями энергии оптических  $LO$ - и  $TO$ -фононов при  $\mathbf{k} \cong 0 - \hbar\omega_L$  и  $\hbar\omega_T$ . В простейшем приближении одномерной двухатомной цепочки ионного кристалла, взаимодействующего со знакопеременным электрическим полем, можно показать, что

$$\varepsilon(\omega) = \varepsilon(\infty) \left[ 1 - \frac{(\omega_L^2 - \omega_T^2)}{(\omega^2 - \omega_T^2)} \right],$$

где  $\varepsilon(\infty)$  – высокочастотная диэлектрическая проницаемость,  $\varepsilon(\infty) = \varepsilon(\omega \gg \omega_L)$ . В интервале частот  $\omega_T < \omega < \omega_L$  показатель преломления  $N$  является чисто мнимой величиной, а коэффициент нормального отражения  $R = \left| \frac{N-1}{N+1} \right|^2 = 1$ , т.е. кристалл отражает все падающее излучение (рис. 1.130, а). При учете первого из ангармонических членов в законе межатомного взаимодействия частотная зависимость  $\varepsilon(\omega)$  принимает вид (рис. 1.130, б)

$$\varepsilon(\omega) = \varepsilon(\infty) \left[ 1 - \frac{(\omega_L^2 - \omega_T^2)}{i\omega\gamma(\omega^2 - \omega_T^2)} \right] = \varepsilon_1 + i\varepsilon_2.$$

### Многофононное поглощение

Аналогичные качественно, но более слабые пики поглощения и такие же особенности спектра отражения, как при однофононном поглощении, наблюдаются при частотах, соответствующих многофононному поглощению; эти частоты  $\omega_i$  лежат по обе стороны от  $\omega_T$ :  $\omega_i > \omega_T$  при испускании нескольких фононов;  $\omega_i < \omega_T$ , когда при поглощении фотона наряду с испусканием фононов поглощается один или несколько тепловых фононов

Частоты  $\omega_i$  и волновые числа всех частиц, участвующих в акте взаимодействия, таковы, что выполняются законы сохранения энергии и квази-

импульса (с учетом процессов переброса). Вероятность многофононных процессов растет с увеличением равновесного числа фононов, т.е. с ростом температуры.

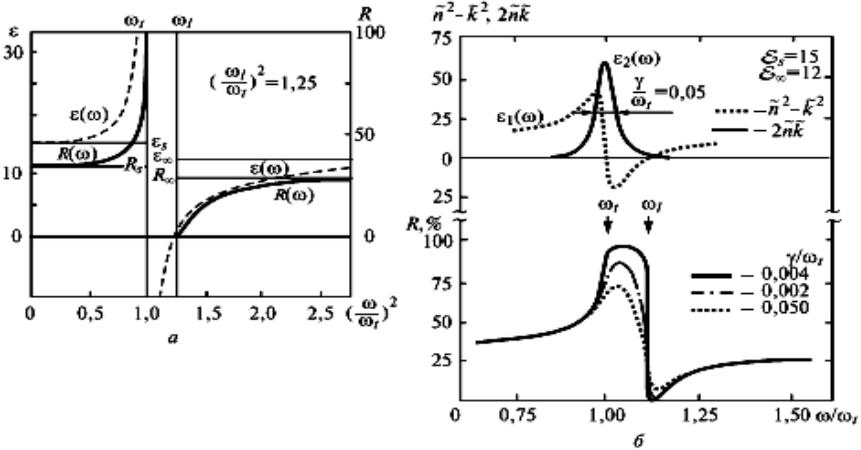


Рис. 1.130. Коэффициент отражения и диэлектрическая проницаемость в области полосы остаточных лучей без учета (а) и с учетом (б) диссипации энергии

### Плазмон-фононный резонанс

В том случае, когда плазменная частота  $\omega_{pl}$  близка к  $\omega_L$  и  $\omega_T$ , длинноволновая ( $\mathbf{k} \rightarrow 0$ ) диэлектрическая проницаемость взаимодействующей системы  $LO$ -фононы-плазмоны принимает вид

$$\varepsilon(\omega) = \varepsilon(\infty) + [\varepsilon(0) - \varepsilon(\infty)] \omega_T^2 / \left( \omega_T^2 + \omega^2 + i\gamma\omega \right) - \omega_{pl}^2 \varepsilon(\infty) / [\omega(\omega + i/\tau)], \quad (1.100)$$

где  $\gamma^{-1}$  и  $\tau$  – времена жизни фононов и плазмонов соответственно, эффективно учитывающие затухание этих элементарных возбуждений;  $\varepsilon(0)$  – низкочастотная диэлектрическая проницаемость. Особенности в спектрах возникают при переходе  $\varepsilon(\omega)$  через нуль; при  $\gamma = \tau^{-1} = 0$  из (1.100) можно получить, что это происходит при частотах  $\omega_+$  и  $\omega_-$ , определяемых как

$$\omega_{\pm}^2 = 0,5 \left\{ \omega_{pl}^2 + \omega_L^2 \pm \left[ (\omega_{pl}^2 + \omega_L^2)^2 - 4\omega_{pl}^2 \omega_T^2 \right]^{1/2} \right\}.$$

При малых концентрациях носителей  $\omega_{pl} \ll \omega_T$  высокочастотная ветвь соответствует  $LO$ -фонон-поляритонам ( $\omega_+ \cong \omega_L$ ), а низкочастотная – плазмон-поляритонам, экранированным низкочастотной диэлек-

трической проницаемостью

$$\varepsilon(0): \omega_- \approx \omega_{pl}^2 \omega_T^2 / \omega_L^2 = \omega_{pl}^2 \varepsilon(\infty).$$

При  $\omega_{pl} \gg \omega_T$  высокочастотная ветвь  $\omega_+$  имеет в основном плазмон-поляритонный характер,  $\omega_+ \approx \omega_{pl}$ , а низкочастотная соответствует  $LO$ -фонон-поляритонам, экранированным свободными носителями заряда так, что  $\omega_- \approx \omega_T$ . В ветви  $\omega = \omega_T$  атомы и электроны колеблются в фазе, а в ветви  $\omega = \omega_-$  – в противофазе.

#### Результирующие спектры неметаллов

На рис. 1.131 показаны спектры отражения  $R(\omega)$  и поглощения  $\varkappa(\omega)$ . В первом интервале взаимодействие света с кристаллом обусловлено переходами электронов из нижних зон в свободные состояния зоны проводимости (пик 1 соответствует энергии  $d$ -зоны), во втором – со свободными электронами в зонах (подобно металлам). В третьем интервале основной механизм взаимодействия – межзонные вертикальные и невертикальные (с участием фононов) переходы. Кроме того, в спектрах поглощения достаточно чистого кристалла на границе третьего и четвертого интервалов (на краю основного поглощения) возможно возникновение экситонной линии 10 (или водородоподобной серии линий), линии 11, вызванной оптическим возбуждением комплексов, а также примесной полосы 12.

Пики 2, 3, 4 соответствуют энергиям прямых (вертикальных) переходов между экстремальными точками зон. В четвертом интервале основной вклад дают внутризонные переходы (сплошной спектр 19, плазменный минимум 5 вблизи плазменного края  $\delta$ ) и фотоионизация примесных центров (совокупность линий 13). В пятом интервале и прилегающих к нему областях главный механизм – взаимодействие с колебаниями решетки кристалла (однофононный резонанс) – это полоса остаточных лучей 8 с минимумом 7. Справа и слева от полосы 8 в спектре поглощения могут возникать

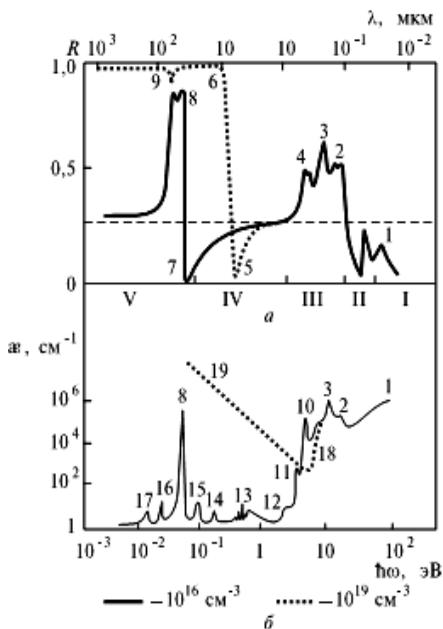


Рис. 1.131. Схематические спектры отражения (а) и поглощения (б) чистого (сплошная линия) и сильнолегированного (пунктир) полупроводника с долей ионности в связях

более слабые линии, обязанные своим происхождением испусканиям или поглощениям нескольких фононов (колебаний решетки) под действием кванта света. Пики 14, 15 соответствуют суммарному механизму, когда под действием фотона испускается несколько фононов, а пики 16, 17 – разностному механизму, когда под действием кванта света одновременно испускаются и поглощаются два или более фононов.

Спектры отражения и поглощения в четвертом и пятом интервалах чувствительны к примесям и свободным носителям в кристалле. Край основного поглощения 18 у образца с большой концентрацией свободных носителей сдвигается в коротковолновую сторону, полосы 10, 11, 12 маскируются сильным поглощением свободными носителями. Полоса остаточных лучей в спектре отражения образца с большой концентрацией свободных носителей также маскируется сильным (как в металлах) отражением и поглощением свободных носителей. Энергия, при которой возникают особенности 5 и 6, непосредственно связана с концентрацией и эффективной массой носителей заряда в кристалле.

#### 1.6.4. Магнитные свойства твердых тел

Магнитные свойства твердых тел определяются в основном ориентацией постоянных магнитных диполей, создаваемых элементарными токами в электронных оболочках атомов. Согласно закону Ампера, магнитный момент кругового витка с током, моделирующего электрон, движущийся по орбите со средним радиусом  $r$  и угловой частотой  $\omega$ :

$$\mu = er^2\omega/2.$$

Волновая природа электрона приводит к квантованию момента количества движения электрона  $m_e r^2 \omega$ , который (момент) кратен  $\hbar$ , откуда следует, что магнитный момент, связанный с движением одного электрона, должен быть кратным магнетону Бора:  $\mu_B = \hbar e / (2m_e)$ :

Магнитный момент, связанный со спином электрона, также можно считать равным  $\mu_B$ . В многоэлектронных атомах полный магнитный момент  $\mu$  является векторной суммой элементарных моментов, связанных как со спинами, так и с орбитальными движениями; в не целиком заполненных электронных оболочках  $\mu$  может быть отличен от нуля, тогда атом и представляет собой магнитный диполь.

С существованием в твердом теле постоянных магнитных диполей связаны магнитные свойства парамагнетиков, антиферромагнетиков, ферромагнетиков.

Магнитная восприимчивость  $\chi_m$  устанавливает связь между внешним магнитным полем и магнитным полем атомов тела. Знак и величина  $\chi_m$  указывают на характер магнитных свойств вещества. В соответствии с этим можно выделить три основных типа тел: парамагнетики ( $\chi_m \approx 10^{-6} \dots 10^{-7}$ ); ферромагнетики, а также ферри-магнетики и антиферромагнетики ( $\chi_m$  до  $10^2 \dots 10^3$ ); диамагнетики ( $\chi_m \approx -10^{-4} \dots 10^{-9}$ ).

### Парамагнетизм

Парамагнетизм имеет место, когда магнитные моменты в отсутствие внешнего магнитного поля расположены хаотически. В магнитном поле диполи стремятся к упорядочению, причем магнитная восприимчивость  $\chi_m$  положительна (поле увеличивается) и обратно пропорциональна температуре:

$$\chi_m = C/T, \quad C = \mu_0 \mu^2 n / (3k_B)$$

(закон Кюри); здесь  $C$  – константа Кюри;  $n$  – концентрация атомов;  $\mu$  – полный магнитный момент атома. Тепловые движения препятствуют упорядочению, значения  $\chi_m$  у парамагнетиков намного меньше единицы.

### Антиферромагнетики

У антиферромагнетиков наиболее энергетически выгодна противоположная ориентация соседних магнитных диполей (рис. 1.132, б), так что суммарный магнитный момент при низких температурах оказывается мал.

При повышении  $T$  до температуры Нееля  $T_N$  уменьшается роль взаимодействия между соседними диполями, магнитная восприимчивость возрастает. При  $T > T_N$  спины становятся «свободными», и антиферромагнетики реагируют на внешнее магнитное поле как парамагнетики с температурной зависимостью по модифицированному закону Кюри:

$$\chi_m = C / (T + \theta),$$

где  $\theta$  – постоянная для данного вещества величина.

## Ферримагнитные материалы

Ферримагнитные материалы также имеют наиболее энергетически выгодное противоположное расположение магнитных диполей, но разнонаправленные магнитные моменты не равны друг другу, и состояние с наименьшей энергией обладает ненулевым магнитным моментом  $M_s$ . При нагревании ферримагнетика  $M_s$  уменьшается, и при  $T > T_F$  тело ведет себя как парамагнетик, но с нелинейной температурной зависимостью  $\chi_m$  (рис. 1.132, *з*).

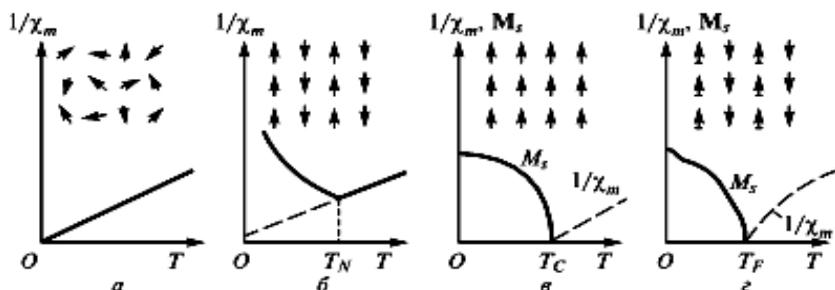


Рис. 1.132. Возможное низкотемпературное упорядочение соседних диполей и соответствующее поведение спонтанной намагниченности и (или) восприимчивости для парамагнетика (*а*), антиферромагнетика (*б*), ферромагнетика (*в*), ферримагнетика (*з*)

К ферримагнетикам относятся, в частности, ферриты – вещества типа  $MO-Fe_2O_3$ , где  $M$  – двухвалентный металл; они обладают при хороших магнитных свойствах высоким электросопротивлением (около  $10^7$  Ом · м) и прямоугольной петлей гистерезиса, что определяет их широкое применение в электронике.

## Ферромагнетики

Ферромагнетики характеризуются наличием минимальной энергии при параллельном расположении магнитных диполей. Индукция возникающих спонтанных магнитных полей  $\mathbf{B}$  достигает нескольких тесла, что объясняет широкое применение ферромагнетиков при создании магнитных систем. При  $T > T_C$  (где  $T_C$  – температура Кюри, при которой происходит хаотизация направлений магнитных диполей) ферромагнитные материалы ведут себя подобно парамагнетикам, а температурная зависимость  $\chi_m$  описывается законом Кюри – Вейсса:

$$\chi_m = C/(T - T_n), \quad (1.101)$$

$$T_n = \text{const} \geq T_C.$$

Момент каждого диполя  $\mu$ , выраженный в единицах  $\mu_B$ , для большинства ферромагнетиков определяется спинами непарных электронов в атоме и примерно равен их числу. Орбитальное движение дает обычно относительно небольшой вклад.

Образец ферромагнетика может в целом оказаться немагнитным, так как возможна хаотическая ориентация магнитных доменов – областей с магнитными диполями, параллельными друг другу (или насыщение энергетического спектра магнонов), – диполи разориентированы. Разделяются магнитные домены переходными областями – *стенками Блоха*, в которых происходит довольно плавный (на размерах порядка сотен атомов) поворот ориентации магнитных диполей (рис. 1.133). При включении внешнего магнитного поля блоховские стенки движутся так, что растут домены с направлениями магнитных диполей, близкими к направлению внешнего поля, – образец намагничивается. При сильных полях происходит также поворот доменов; при еще более сильных полях имеет место насыщение – все магнитные диполи ориентированы вдоль внешнего магнитного поля, многократно усиливая его:

$$\mathbf{V}_{\text{max}} = \mu_0 (\mathbf{H} + \mathbf{M}_s),$$

где  $\mathbf{M}_s$  – индукция насыщения. При снятии внешнего магнитного поля остается намагниченность, связанная с преимущественной ориентацией диполей. Периодическое изменение знака внешнего поля приводит к известной петле гистерезиса.

### Диамagnetики

Каждому электрону, движущемуся по «атомарной орбите», присущ диамagnetизм – небольшая по значению отрицательная магнитная восприимчивость, индуцируемая внешним магнитным полем; диамagnetный эффект проявляется лишь, когда полный маг-

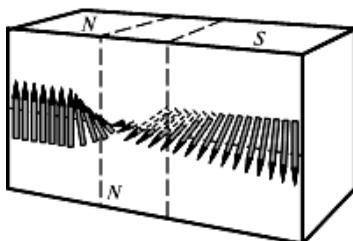


Рис. 1.133. Поворот направления спина в пределах толщины блоховской стенки, разделяющей магнитные домены

нитный момент атома (или иона в кристалле) равен нулю, т.е. все электроны спарены, и перечисленные ранее эффекты не имеют места. Причина в том, что вследствие наложения внешнего магнитного поля при изменении магнитного потока через «контур» (образованный электронной орбитой) индуцируется «электрический ток» (изменение скорости орбитального движения электрона), который в соответствии с правилом Ленца направлен так, что препятствует увеличению магнитного потока, т.е. уменьшает внешнее магнитное поле. В результате в среде возникает диамагнитная восприимчивость

$$\chi_D = -\sum_e \mu_0 e^2 \langle r_e^2 \rangle / (6m_e);$$

здесь суммирование проводят по всем (валентным и внутренним) электронам всех атомов, находящихся в единице объема;  $\langle r_e^2 \rangle$  – средний квадрат расстояния от ядра для данного электрона.

#### *Магнитные свойства аморфных металлов*

Наибольший интерес представляют магнитные свойства аморфных сплавов переходных (Mn, Fe, Co, Ni, ...) и редкоземельных (Eu, Gd и т.д.) металлов с другими металлами и металлоидами. При достаточно высоких температурах эти сплавы находятся в парамагнитном состоянии. Температурные зависимости магнитной восприимчивости хорошо описываются законом Кюри – Вейсса (1.101). При температуре ниже соответствующей критической в них возникает магнитное упорядочение. Магнитное упорядочение аморфных сплавов может быть ферромагнитным, антиферромагнитным, а также ферримагнитным. В ряде случаев наблюдается состояние спинового стекла. Спиновое стекло характеризуется замораживанием спиновых магнитных моментов в случайных направлениях при температуре ниже некоторой характеристической. Заметим, что состояние спинового стекла обнаружено также и в некоторых кристаллах.

Во многих случаях аморфные металлические сплавы упорядочены как ферромагнетики, несмотря на то, что их кристаллические аналоги являются антиферромагнитными. Это свидетельствует о том, что при аморфизации структуры изменяется характер обменного взаимодействия. Разупорядочение атомной структуры приводит к уменьшению длины свободного пробега электронов проводимости, которая в аморфных металлах и сплавах может иметь порядок межатомного расстояния, что значительно снижает вклад обменного взаимодействия через электроны проводимости.

## 1.7. Свойства границы твердого тела. Контактные явления

### 1.7.1. Структура и потенциальный рельеф границы твердых тел

#### *Структура поверхностей кристаллов*

При образовании кристалла его свободные поверхности стремятся образовывать определенным образом ориентированные плоскости. Причина в том, что при образовании поверхности в результате скола кристалла затрачиваемая (поверхностная) энергия пропорциональна числу обрываемых связей, и наиболее вероятны сколы по плоскостям, соответствующим минимальному числу этих связей (рис. 1.134). Энергетически невыгодно также образование острых углов: при постоянном объеме срезание этих углов уменьшает площадь поверхности.

#### *Поверхность ковалентных кристаллов. Реконструкция*

В ковалентных кристаллах поверхностная энергия в несколько раз меньше суммарной энергии разрыва связей вследствие реконструкции поверхности, заключающейся в том, что одна часть оборванных связей насыщается за счет ухода электронов с другой части связей. Одни из поверхностных атомов при этом смещаются в глубь тела, другие – в противоположном направлении, таким образом, ранее «равноправные» атомы на поверхности становятся различными, т.е. снижается порядок симметрии атомов на поверхности (рис. 1.135).

Перед реконструкцией на поверхности имеются гибридные (см. разд. 1.1) состояния оборванных связей с энергией, лежа-

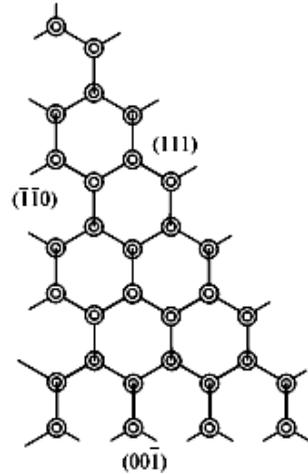


Рис. 1.134. Наиболее вероятные плоскости скола кристалла со структурой алмаза (плоскость чертежа (110))

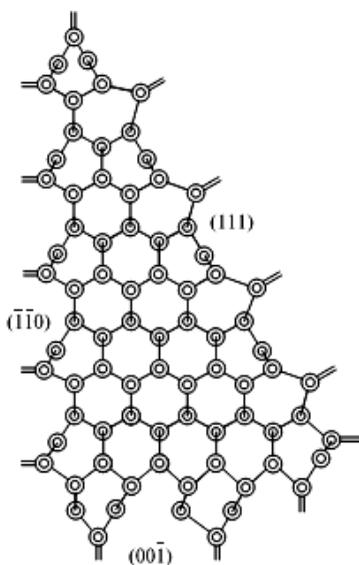


Рис. 1.135. Реконструкция поверхности ковалентного кристалла со структурой алмаза (гибридизованные состояния, занятые двумя электронами, изображены двойными линиями)

числом положительных и отрицательных зарядов (так, для структуры KCl – поверхность (100)). Реализуется обычно последняя ориентация. Основной вклад в поверхностную энергию связан с увеличением электростатической энергии в расчете на один ион. Так, для поверхности (100) кристалла со структурой KCl расчеты дают поверхностную энергию  $E_n = 0,0422z^2e^2 / (4\pi\epsilon_0a^2)$ , где  $z$  – полный целочисленный заряд иона.

### *Поверхность металлов. Силы зеркального изображения*

Потенциал внутри твердого тела в среднем всегда положителен (относительно потенциала на бесконечности в вакууме). Причина

щей вблизи запрещенной зоны объемных состояний или в ней самой. В результате реконструкции эти состояния расщепляются на заполненные, уходящие в глубь валентной зоны состояния, и свободные, оказывающиеся в зоне проводимости.

### *Поверхность ионных кристаллов*

Модель структуры поверхности ионных кристаллов можно получить, если мысленно за некоторой кристаллической плоскостью удалить все ионы. При анализе возможных поверхностей скола нужно учитывать наличие зарядов у различных атомов решетки: при разрезе плоскостью могут образоваться поверхности, несущие очень большой поверхностный заряд; могут образовываться и квазинейтральные поверхности с одинаковым

заключается в существенно различной массе частиц: тяжелые ионы локализованы в малых областях пространства, тогда как волновые функции электронов (особенно валентных) занимают относительно большие объемы, выходят за границу распределения положительного заряда и создают дипольный слой, определяя потенциал. Из уравнения Пуассона  $\nabla^2 U = -n_q e / \epsilon_0$

(где  $n_q$  – плотность зарядов) получается «перевес» вклада ионов над электронами (рис. 1.136). Таким образом, твердое тело является для электронов трехмерной потенциальной ямой, на границах которой существует потенциальная ступенька высотой 1...10 эВ.

Форму потенциала в металле вблизи поверхности (рис. 1.137) можно представить следующим образом. В нулевом приближении электронная плотность одинакова для ячеек Вигнера – Зейтца как приповерхностных атомов, так и атомов в глубине образца (рис. 1.138).

Следующее приближение учитывает распространение волновой функции электронов за пределы граничных ячеек, причем получающаяся граница электронной плотности оказывается сглаженной, почти не модулированной с периодом решетки. Возникает «атомно-гладкая» поверхность электронного газа, поэтому при качественном описании граничных эффектов используют так называемую модель желе, в которой положительный заряд ионов  $n(x)e$  считается равномерно распределенным по полупространству.

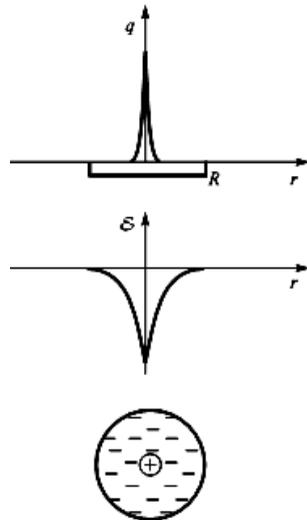


Рис. 1.136. Распределение потенциала в системе: точечный ион – равномерно делокализованный по шару радиусом  $R$  электрон

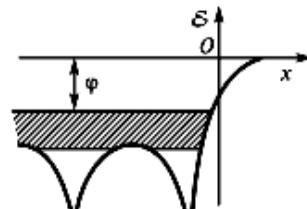


Рис. 1.137. Потенциал вблизи границы металла (заштрихована зона проводимости)

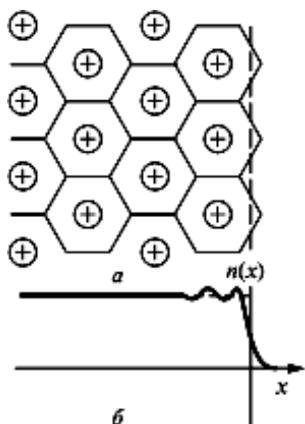


Рис. 1.138. Структура приповерхностной области металла: *a* – поверхность твердого тела как разрез, проведенный по поверхностям ячеек Вигнера – Зейтца (*штрихами* изображена идеально гладкая поверхность); *б* – поведение электронной плотности вблизи поверхности

Потенциал ионной составляющей  $U(x)$  определяют из уравнения Пуассона  $\nabla^2 U(x) = -n(x)e/\epsilon_0$  (где  $n(x) = n_i$  при  $x \leq 0$ ,  $n(x) = 0$  при  $x > 0$ ;  $n_e = n_i$  – средняя плотность зарядов в глубине тела), а распределение электронной плотности  $n_e = n_e(x)$  – из уравнения Шредингера для электрона на указанном потенциальном рельефе. Эта модель из всех параметров металла содержит только электронную плотность  $n_e$  и не учитывает других особенностей. Модель желе описывает появление дипольного слоя на границе, что отражается на потенциальной диаграмме (см. рис. 1.137) наличием ступеньки высотой в 5...10 эВ.

В следующих приближениях учитывается неоднородность распределений потенциала (учет влияния структуры решетки и валентности атомов  $z$ ).

В металлах электронный газ вырожден, уровень Ферми значительно выше дна потенциальной ямы, однако ниже уровня вакуума. Если пренебречь анизотропией и неоднородностью потенциального рельефа, считая дно потенциальной ямы гладким, а электроны металла квазисвободными, то получается *модель Зоммерфельда* (рис. 1.139).

Форма потенциала у границы металла вне условной геометрической границы электронного газа с хорошей точностью определяется *силами зеркального изображения*. Электрон, покинувший металл, создает вокруг себя электростатическое поле, возмущенное близким присутствием металлической поверхности: электрическое поле может быть только нормально к ней. Конфигурация силовых линий соответствует половине поля диполя (рис. 1.140). Между электроном и его «зеркальным изображением» действует сила ку-

лоновского притяжения  $F = e^2 / [4\pi\epsilon_0 (2x)^2]$ , а создаваемый ею потенциал

$$U(x) = \int_x^{\infty} F dx = -e^2 / (4\pi\epsilon_0 \cdot 4x).$$

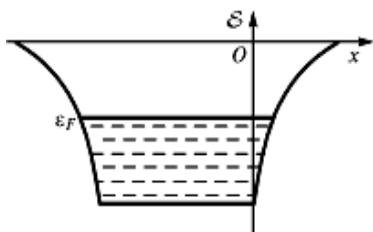


Рис. 1.139. Модель Зоммерфельда (штриховкой обозначена область валентной зоны, занятой электронами)

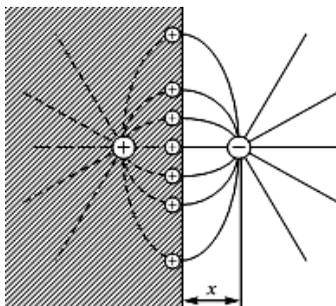


Рис. 1.140. К анализу сил зеркального изображения

### Электронная зонная структура поверхности

Существование поверхности, даже абсолютно правильной, является нарушением трансляционной симметрии, что сказывается на дисперсионных зависимостях для электронов.

Приграничные атомы имеют несимметричное окружение и поэтому иную электронную структуру, чем атомы в объеме. Качественно влияние этого фактора можно проанализировать на основе одномерного уравнения Шредингера на потенциале, образованном цепочкой прямоугольных ям (модель Кронига – Пенни), но с конечной длиной цепочки и с изменяющейся на концах высотой барьеров. В отличие от периодического поля (модель Кронига – Пенни) появляются добавочные электронные состояния, волновые функции которых локализованы вблизи поверхности и экспоненциально спадают при удалении от нее (уровни Тамма) (рис. 1.141, 1.142).

При образовании поверхности объемного кристалла вероятность нахождения электрона на объемных уровнях металла в приповерхностной области может измениться вследствие интерференции падающих на поверхность и отраженных от нее потоков электронов.

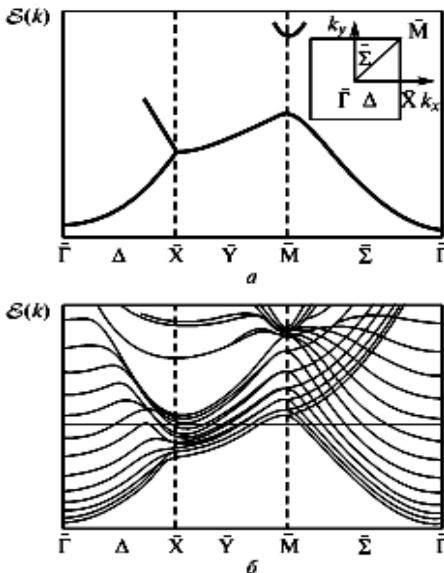


Рис. 1.141. Зонная структура Li: *a* – в плоскости (001) ОЦК-решетки; *б* – пленки лития, состоящей из 13 атомных слоев

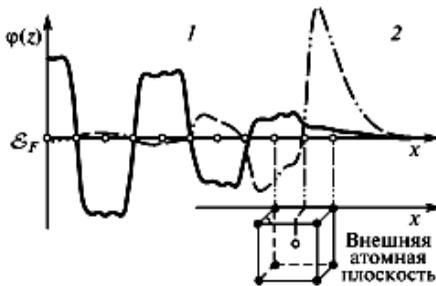


Рис. 1.142. Волновые функции объемного (1) и поверхностного (2) состояний для плоскости (001) Li

динаты  $\mathbf{r}$  фигурирует номер атомного слоя, показали, что в окрестности дна зоны  $W_b$  ЛПС поверхностного атомного слоя ( $S = 1$ ) ведет себя как  $(E - W_b)^{3/2}$  (рис. 1.143), то же справедливо и в отно-

Поэтому если для характеристики электронной структуры всего кристалла в целом вводят понятие плотности состояний  $g(E) = \sum_{\alpha} \delta(E - E_{\alpha})$ , где

$\alpha$  – индекс, нумерующий разрешенные уровни энергии  $E_{\alpha}$ , то при описании электронной структуры приповерхностного слоя целесообразно использовать локальную плотность состояний (ЛПС), определяемую в точке пространства  $r$  с учетом статического веса каждой собственной функции системы:

$$g(\mathbf{r}, E) = \sum_{\alpha} |\psi_{\alpha}(\mathbf{r})|^2 \delta(E - E_{\alpha}),$$

где  $\psi_{\alpha}(\mathbf{r})$  – амплитуда вероятности нахождения электрона, имеющего координату  $\mathbf{r}$ , на уровне  $E_{\alpha}$ .

Расчет и сравнение друг с другом объемной плотности состояний  $g(E)$  и ЛПС  $g(\mathbf{r}, E)$ , в которой в качестве координаты

шении второго ( $S = 2$ ), третьего ( $S = 3$ ) слоев. Однако с увеличением номера слоя  $S$  такое поведение становится все менее выраженным, и в пределе  $S \rightarrow \infty$  получается объемная плотность состояний, которая ведет себя в окрестности дна зоны как  $(E - W_b)^{1/2}$ . Аналогичное поведение имеет место в окрестности потолка зоны. Закон трех вторых для поверхностных атомных слоев на краю зоны металла отражает лишь тот факт, что вероятность нахождения электрона в приповерхностной области на уровнях в окрестности дна или потолка зоны меньше, чем для электрона в объемных слоях металла.

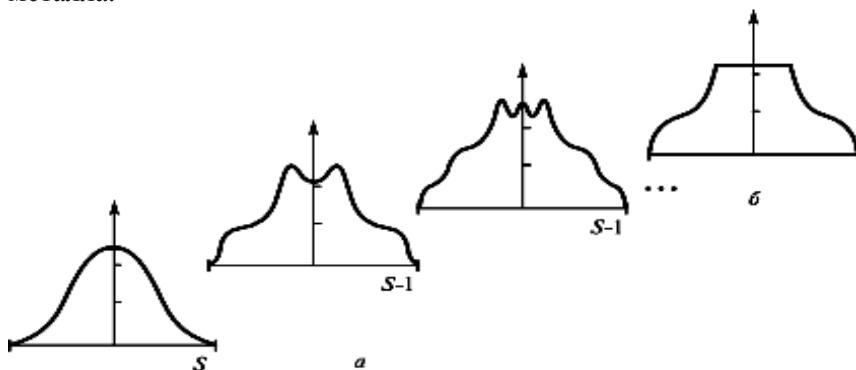


Рис. 1.143. Разрешенная по слоям ЛПС для трех верхних поверхностных плоскостей в модели сильной связи (а) в сравнении с объемной плотностью состояний (б)

Таммовские состояния (ТС) разделяют на собственные и несобственные. Первые относятся к чистым поверхностям, тогда как вторые возникают только в том случае, если на поверхности адсорбировались инородные атомы. Очевидно, в последнем случае поверхностного возмущения, сформировавшегося в результате релаксации идеальной и чистой поверхности (собственной релаксации), недостаточно, и лишь адсорбция частиц доводит его до значения, необходимого для образования ТС на данной грани. Часть ЛПС (см. рис. 1.143), отвечающая ТС, довольно быстро убывает с номером слоя, однако формально она присутствует в выражении для ЛПС с произвольно большим номером атомного слоя. Это показывает, что таммовский уровень точно так же, как и любой другой, принадлежит всему кристаллу, и с увеличением номера слоя очень

быстро (экспоненциально) уменьшается лишь вероятность нахождения на нем электрона. Поэтому о таммовских уровнях часто говорят как о чисто поверхностных состояниях.

При рассмотрении цепочки, в которой поверхность ассоциируется с крайним атомом, решение задачи об определении спектра электронных уровней энергии при наличии поверхностного возмущения приводит к тому, что ТС получается как дискретный уровень, отщепившийся от объемной зоны металла, что связано с невозможностью движения электрона вдоль поверхности. При решении же задачи о полупространственном кристалле с бесконечной плоской поверхностью, вдоль которой электрон может двигаться, часть ЛПС, отвечающая ТС, обладает конечной шириной и может частично перекрываться с интервалом объемных состояний (см. рис. 1.144).

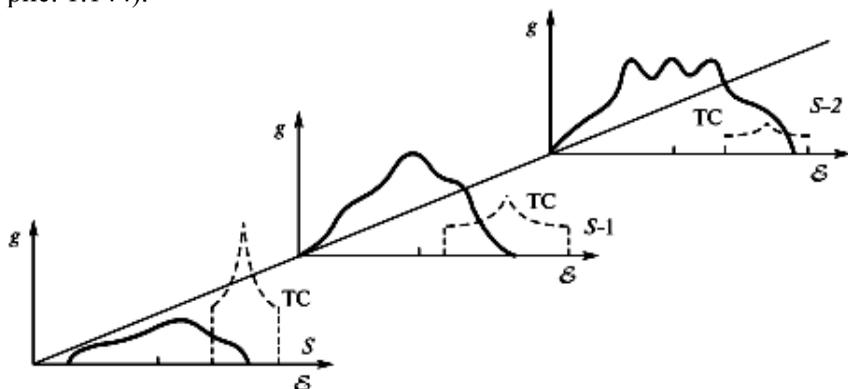


Рис. 1.144. Разрешенная по слоям ЛПС для трех слоев в модели сильной связи с учетом поверхностного возмущения

Примером таких состояний служат *состояния Шокли*, соответствующие оборванным ковалентным связям, находящиеся у уровня Ферми и примерно наполовину заполненные, что обеспечивает их участие в поверхностной электропроводности. Однако в случае реконструкции поверхности эти состояния расщепляются на заполненные, уходящие в глубь валентной зоны, и свободные, оказавшиеся в зоне проводимости.

### Поверхностные квазичастицы

Поскольку потенциальные характеристики для поверхностных атомов и электронов существенно отличаются от объемных, возникают поверхностные элементарные возбуждения, или поверхностные квазичастицы, с количественно иными свойствами, нежели чем у квазичастиц в глубине тела.

#### Поверхностные фононы

Одной из простейших моделей поверхностных квазичастиц может служить одномерная модель поверхностных фононов. В ней рассматриваются колебания одномерной конечной цепочки с незакрепленными концами, составленной из атомов, взаимодействующих по закону Гука. Прямое решение уравнений, аналогичных (1.25), указывает на существование «поверхностной» моды колебаний – частоты, для которой амплитуды смещений атомов экспоненциально спадают при удалении от незакрепленных концов, т.е. соответствующие фононы локализованы на границе тела. Частота колебаний в этой моде  $\omega_s$  лежит в запрещенной зоне между полосами акустических и оптических колебаний; например, при двухатомном базисе

$$\omega_s = \sqrt{C(m+M)/(mM)}.$$

#### Поверхностные поляритоны и плазмоны

Поверхностные поляритоны можно описать, рассматривая распространение электромагнитных волн на границе раздела двух сред (с диэлектрическими проницаемостями  $\varepsilon_a(\omega)$  и  $\varepsilon_b(\omega)$ ). Такие колебания влияют, например, на оптические свойства в инфракрасном диапазоне для кристаллов диэлектриков малых размеров (порошки, тонкие пленки, кристаллиты). Дисперсионное уравнение поверхностных поляритонов

$$c^2 k^2 / \omega^2 = \varepsilon_a(\omega) \varepsilon_b(\omega) / [\varepsilon_a(\omega) + \varepsilon_b(\omega)]$$

отличается от такового для однородной среды  $c^2 k^2 / \omega^2 = \varepsilon(\omega)$ .

В частном случае поверхностных плазмон-поляритонов зависимость  $\varepsilon_b = \varepsilon_b(\omega)$  описывается формулой Друде (см. разд. 1.6):

$$\varepsilon_b(\omega) = \varepsilon(\infty) \left( 1 - \omega_{pl}^2 / \omega^2 \right), \quad \omega_{pl}^2 = ne^2 / [\varepsilon_0 \varepsilon(\infty) m^*].$$

При малых  $k$  ( $k \geq \omega_p/c$ ) поляритон близок к фотону, а при больших – к поверхностному плазмону. В пределе  $k \gg \omega_p/c$  энергия поверхностного плазмона стремится к  $\hbar\omega_{ps} = \hbar\omega_{pl} / [1 + 1/\varepsilon(\infty)]^{1/2}$ . Для границы металла и диэлектрика (полупроводника) с проницаемостью  $\varepsilon'(\infty)$  поверхностные

плазмоны имеют энергию  $\hbar\omega_{ps} \approx \hbar\omega_{pm} / [1 + 1/\varepsilon'(\infty)]^{1/2}$ , где  $\omega_{pm}$  – плазменная частота для электронов в металле. Для границы с вакуумом ( $\varepsilon'(\infty) = 1$ ) энергия поверхностного плазмона  $\hbar\omega_{ps} \approx \hbar\omega_{pm} / (2)^{1/2}$ . В трехслойной системе (металл – пленка диэлектрика толщиной  $L$  – вакуум)

$$\omega_{ps} = \omega_{pm} \left\{ [\varepsilon(\infty) + \text{th}(kL)] / \left[ 2\varepsilon(\infty) + (1 + \varepsilon^2(\infty) \text{th}(kL)) \right] \right\}^{1/2}.$$

В таких системах энергия поверхностного плазмона намного меньше  $\hbar\omega_{pm}$  (т.е. порядка нескольких электрон-вольт). Поверхностные плазмоны связаны с осцилляциями плотности заряда, сосредоточенного непосредственно на поверхности (соответствующие решения получают при рассмотрении уравнения Пуассона совместно со вторым законом Ньютона). Они проявляются, например, в спектрах отражения полупроводников и металлов, вызывая особенности при  $\hbar\omega \approx \hbar\omega_{ps}$ .

### *Поверхностные магныны*

В магнитных материалах при  $T < T_C$  направления магнитных моментов атомов упорядочены вследствие обменного взаимодействия, что приводит к появлению магнонов. На поверхности возбуждаются спиновые волны (магноны) с количественно отличающимися от объемных характеристиками (рис. 1.145).

### *Реальные поверхности, адатомы*

Как правило, атомно-чистая поверхность кристалла имеет многочисленные дефекты типа одноатомных ступеней с уступами, вакансий на поверхности, атомов на ступени, выходов дислокаций, а реальные поверхности имеют также адатомы – адсорбированные чужеродные атомы (на ступени, на уступах) и образованные ими одноатомные пятна (рис. 1.146).

Все эти дефекты создают уровни, расположенные в запрещенной зоне кристалла, как акцепторные, так и донорные; соответствующие им электронные состояния локализованы не только по энергии, но и в пространстве – они сосредоточены лишь на самой поверхности раздела полупроводника с вакуумом или газом.



Рис. 1.145. Дисперсионные зависимости поверхностных и объемных магновов

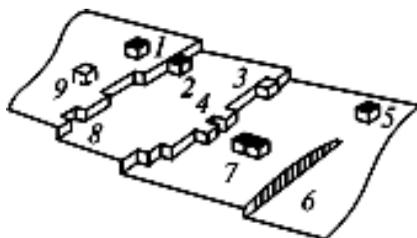


Рис. 1.146. Схема реальной поверхности: 1 – адсорбированный атом; 2 – адсорбированный атом на уступе; 3 – атом на конце уступа; 4 – атом внутри уступа; 5 – атом на ступени; 6 – выход винтовой дислокации; 7 – пара адсорбированных атомов; 8 – вакансия в уступе; 9 – вакансия в ступени

### *Адаптомы на поверхности ковалентных кристаллов*

Адаптомы на поверхности ковалентных кристаллов вступают в химическую связь с незаполненными орбиталями, устраняя причину реконструкции. Так, атом Н на поверхности (111) Si, располагаясь над поверхностным атомом, отдает свой электрон для насыщения оборванной связи. При неполном покрытии поверхности ( $\theta = N_a/N_{a0} < 1$ , где  $\theta$  – степень покрытия;  $N_a$  – число адатомов на единице поверхности;  $N_{a0}$  – их число при моноатомном покрытии) адатомы стремятся собираться в пятна с  $\theta = 1$ , оставляя часть поверхности атомарно чистой ( $\theta = 0$ ), т.е. реконструированной: такое расположение энергетически выгоднее хаотического.

### *Адсорбция на металлической поверхности*

При адсорбции на металлической поверхности анализ проводят в рамках модели желе; первоначально узкие энергетические уровни свободного атома в результате взаимодействия с металлом уширяются, образуя более или менее широкие полосы. Электроны адатомов могут туннелировать в металл и обратно, их волновые функции искажаются (рис. 1.147), уширенные уровни дают вклад в энергетическое распределение плотности электронных состояний металла.

Соответствующие пики в распределении называют *резонансами*. В зависимости от положения резонанса относительно  $E_F$  в ячейке адатом будет в большей или меньшей степени ионизован: заполнена будет та часть состояний адатома, которая лежит ниже уровня Ферми, при этом заряд адатома может стать положительным или отрицательным. Например, адатом Cl на Al образует резонанс под уровнем Ферми (так как энергия ионизации, определяющая положение резонанса, у Cl больше работы выхода – расстояния от энергии Ферми до уровня вакуума  $E = 0$ ).

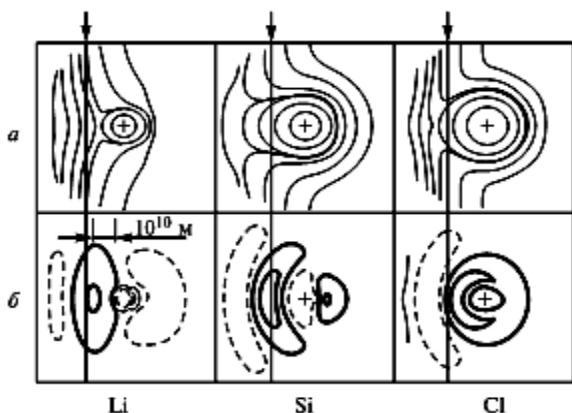


Рис. 1.147. Контуры постоянной электронной плотности для атомов, адсорбированных на поверхности Al; *a* – полная плотность; *b* – разность полной плотности и суперпозиции плотностей для свободных атомов и для чистой поверхности металла (*прямая линия* – поверхность желе)

Все соответствующие состояния оказываются занятыми, что характерно не для атома, а для иона  $\text{Cl}^-$  с заполненными неоподобными оболочками  $1s^2 2s^2 2p^6$  (см. рис. 1.147). Противоположная ситуация создается при адсорбции Li, дающего резонанс над уровнем Ферми и образующего ион  $\text{Li}^+$  с гелиоподобной оболочкой  $1s^2$  (см. рис. 1.147). Для пары Al-Si ситуация иная: хотя  $3s$ -уровень Si расположен низко,  $3p$ -уровень находится у  $E_F$ , т.е. шесть уровней  $p$ -резонанса  $3p^6$  заполнены наполовину: заняты только состояния, образующие химическую связь. При этом часть заряда локализована между атомом и металлом (заряд на связи, рис. 1.147).

## 1.7.2. Работа выхода и электронное сродство

Для выхода из тела электрона, обладающего минимальной кинетической энергией (т.е. расположенного у дна потенциальной ямы), должна быть затрачена энергия, соответствующая высоте потенциального барьера у границы  $U_0$  (полная работа выхода). В металлах при  $T = 0$  К электроны заполняют все энергетические уровни вплоть до уровня Ферми, поэтому минимальная энергия, необходимая для удаления самого быстрого электрона, равна  $U_0 - E_F$ . Работу, которую необходимо совершить для удаления электрона с энергией, соответствующей  $E_F$ , на такое расстояние от тела, где можно пренебречь его воздействием на частицу, называют *термодинамической работой выхода* (или работой выхода)  $\phi = U_0 - E_F$ . При  $T > 0$  К в металле появляются электроны на уровнях выше  $E_F$ , но и в этом случае  $\phi$  отсчитывают от  $E_F$ ; выход электронов, например с  $E < E_F$ , нарушает равновесие в кристалле и вызывает переход быстрых электронов на освободившиеся уровни с выделением энергии и нагревом кристалла. Таким образом, затраченная работа не является работой выхода в чистом виде, часть ее расходуется на нагрев тела.

Эмиссия электронов с  $E > E_F$  вызывает переход оставшихся электронов на более высокие уровни с отбором энергии от решетки и ее охлаждением, т.е. удаление электрона из тела происходит частично и за счет внутренней энергии кристаллов. Значения  $\phi$  зависят от внутренней структуры тела и от условий на его поверхности.

Для полупроводников помимо термодинамической работы выхода различают *электронное сродство*  $\chi$  (или внешнюю работу выхода), равное минимальной энергии, которую следует сообщить электронам дна зоны проводимости для их удаления из кристалла (рис. 1.148).

На энергетической диаграмме  $\chi$  есть разность энергий, соответствующих уровням вакуума и дна зоны проводимости (около 1...6 эВ). Электронное сродство также зависит от внутренней структуры тела и условий на его поверхности. На высоту потенциального барьера (следовательно,  $\chi$  и  $\phi$ ) существенное влияние оказывают плотность и расположение атомов на гранях, наличие на

поверхности адатомов примесей, которые вследствие ионизации или поляризации полем решетки создают у ее границы двойной слой электрических зарядов, искажающих форму потенциального барьера.

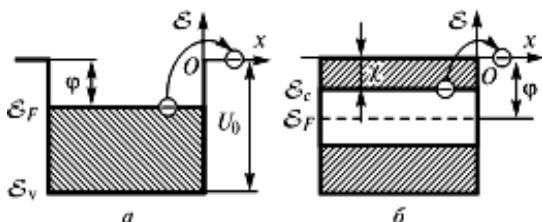


Рис. 1.148. Потенциальная диаграмма для поверхности металла (а) и полупроводника (б)

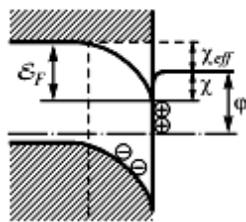


Рис. 1.149. Поверхность полупроводника *p*-типа с отрицательным электронным сродством

Если покрыть поверхность монослоем электроположительных атомов, образующих на поверхности слой положительного заряда, поле которого скомпенсирует поле на границе, создающее потенциальную ступеньку, можно существенно понизить электронное сродство (до значений порядка 0,5 эВ для GaAs-Cs и GaP-Cs). Достижение такого состояния, когда эффективное электронное сродство становится меньше нуля, возможно при наличии вблизи поверхности изгиба зон, обусловленного электрическим зарядом на поверхности полупроводника *p*-типа (рис. 1.149).

Поле положительного поверхностного заряда проникает в глубь полупроводника на расстояние порядка радиуса Дебая (на больших расстояниях поле экранируется перераспределением зарядов: положительно заряженные дырки отталкиваются от поверхности, и остается обедненный дырками слой некомпенсированного отрицательного заряда ионов акцепторной примеси, который вместе с поверхностным зарядом образует дипольный слой). Наличие поля в полупроводнике вызывает изменение электрического потенциала в приповерхностной обедненной области, что эквивалентно изгибу краев зон, эффективное электронное сродство в объеме равно разности электронного сродства на поверхности и величины изгиба зон  $\Delta U$  :

$$\chi_{eff} = \chi - \Delta U .$$

Если величина  $\Delta U > \chi$ , то  $\chi_{eff} < 0$  и барьер, препятствующий выходу электронов из зоны проводимости в объеме полупроводника в вакуум, отсутствует. Для поверхности  $p$ -GaAs, покрытой Cs,  $\Delta U = 0,5$  эВ, т.е.  $\chi_{eff} = 0$ . Активирование с образованием на поверхности слоя CsO еще сильнее снижает  $\chi$ , так что  $\chi_{eff}$  становится отрицательным (в таком случае образует слой отрицательных ионов под поверхностным слоем ионов Cs<sup>+</sup>, так что дипольный момент и его влияние на  $\chi$  увеличиваются). Свободный выход возбужденных электронов из зоны проводимости в вакуум становится энергетически возможным.

### *Изотермическая и адиабатическая работа выхода*

Работа выхода  $\phi$ , строго говоря, – среднее изменение суммарной энергии тела при электронной эмиссии в пересчете на один электрон:

$$\phi = -dE_{\Sigma}/dN_e, \quad (1.102)$$

где  $N_e$  – число электронов в теле. Она равна разности между химическими потенциалами электрона вне и внутри твердого тела. Для полупроводников  $E_F$  лежит ниже дна зоны проводимости, т.е.  $\chi < \phi$ . Определение  $\phi$  по (1.102) оказывается неоднозначным и зависит от различных возможных условий выхода электронов из тела; например, в суммарную энергию  $E_{\Sigma}$  входит омический нагрев решетки в результате перетекания поверхностных зарядов, создающих поле сил зеркального изображения. Если переход происходит адиабатно (энтропия  $S = \text{const}$ ), то в общем случае меняются энергия и температура системы; если же температура  $T$  поддерживается постоянной, как, например, при термоэмиссии, то  $dS \neq 0$ . В первом случае работа выхода  $\phi = \phi_S$  совпадает (по модулю) с *электрохимическим потенциалом*  $E_0$  (по определению  $E_0$ ):

$$E_0 = (\partial E_{\Sigma} / \partial N_e)_{S, V = \text{const}} = -\phi_S,$$

где  $V$  – удельный объем. Во втором случае  $\phi = \phi_T$  (*ричардсоновская работа выхода*) выражается через  $\phi_S$ :

$$\begin{aligned}
\varphi_T &= (\partial E_\Sigma / \partial N_e)_{T, V=\text{const}} = - \left[ (\partial F / \partial N_e)_{T, V=\text{const}} + T (\partial S / \partial N_e)_{T, V=\text{const}} \right] = \\
&= - \left[ (\partial E_\Sigma / \partial N_e)_{S, V=\text{const}} - T (\partial^2 F / \partial N_e \partial T)_{T, V=\text{const}} \right] = \\
&= \left( -\varphi_S - T (\partial E_0 / \partial T)_{N, V=\text{const}} \right) = \varphi_S - T (\partial \varphi_S / \partial T)_{N, V=\text{const}} ,
\end{aligned}$$

где  $F$  – свободная энергия; при записи используют термодинамические тождества:

$$\begin{aligned}
F &= E_\Sigma - TS, \quad (\partial F / \partial N_e)_{T, V=\text{const}} = (\partial E_\Sigma / \partial N_e)_{S, V=\text{const}} , \\
S &= -(\partial F / \partial T)_{N, V=\text{const}} ,
\end{aligned}$$

$\varphi_T$  и  $\varphi_S$  на величину  $T (\partial \varphi_S / \partial T)$ , что составляет в относительных величинах порядка процентов  $10^{-2}$ , однако влияние поправок к  $\varphi$  на эмиссионные характеристики оказывается весьма заметным.

Температурные изменения  $\varphi_S$  связаны с зависимостью  $E_F = E_F(T)$ : во-первых, из-за свойств функции Ферми – Дирака, во-вторых, так как  $N_e$  уменьшается с ростом  $T$  из-за температурного расширения, что уменьшает  $E_F$  и увеличивает  $\varphi_S$ . Противоположное влияние на  $\varphi_S$  оказывает снижение дна потенциальной ямы при разрежении атомных слоев у поверхности (уменьшение поверхностной плотности слоя отрицательного заряда). Эффективная температурная зависимость  $\varphi$  существует и при больших значениях крутизны плотности состояний  $\partial g(E = E_*) / \partial E$ , где  $E_*$  – энергия электронов до эмиссии; если, например при нагреве, электроны заселяют область с повышенной плотностью состояний, т.е.  $(\partial g(E) / \partial E) > 0$ , это действует как повышение уровня Ферми. Значение соответствующей поправки при разных видах эмиссии определяется разными значениями  $E_*$  и обсуждается далее.

Для металлов температурный коэффициент  $\alpha \equiv \partial \varphi / \partial T \approx \approx 10^{-5}$  В/град, а для полупроводников –  $10^{-4} \dots 10^{-3}$  В/град.

Для разных граней монокристаллов коэффициент  $\alpha$  может различаться не только по величине, но и по знаку. Для ферромагнетиков коэффициент  $\alpha$  имеет скачок в точке Кюри. Например, для Ni  $\Delta \alpha \equiv (0,99 \pm 0,17) \cdot 10^{-5}$  В/град.

Положение уровня  $E_F$  и в собственном, и в примесном полупроводниках в широком диапазоне изменения  $T$  линейно зависит от температуры, т.е. зависимость  $\varphi(T)$  для полупроводников является линейной функцией  $T$ .

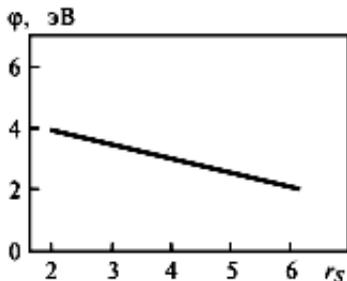


Рис. 1.150. Зависимость работы выхода от  $r_S$  ( $4\pi r_S^3 n_e = 1$ )

В модели желе (для простых металлов) зависимость  $\varphi$  от единственного параметра  $r_S$  показана на рис. 1.150. Примерно одинаковое значение работы выхода имеют элементы групп:

- IIA: для Sr-Ba  $\varphi = 2,5$  эВ;
- IIIA: для Sc-Y-La-Cd  $\varphi = 3,3$  эВ;
- IVB: для Cu-Ag-Au  $\varphi = 4,4$  эВ;
- IVB: для Si-Ge-C  $\varphi = 4,8$  эВ.

Для элементов 4-го большого периода: Fe-Co-Ni-Cu  $\varphi = 4,3...4,4$ .

Работа выхода уменьшается последовательно в зависимости от положения элементов в периодах. Так, в периоде IIIB для B-Al-Ga-Yb-Te  $\varphi = 4,5...3,7$  эВ; в IVB для Ge-Sn-Pb-Si  $\varphi = 4,8...4,0$  эВ (рис. 1.151).

Для редкоземельных элементов  $\varphi = 3,0...3,3$  эВ; для Y, Eu, Pr и Sm – 2,5 эВ. Минимальное значение работы выхода имеет Cs,  $\varphi = 1,81$ , максимальное – Pt,  $\varphi = 5,32$ .

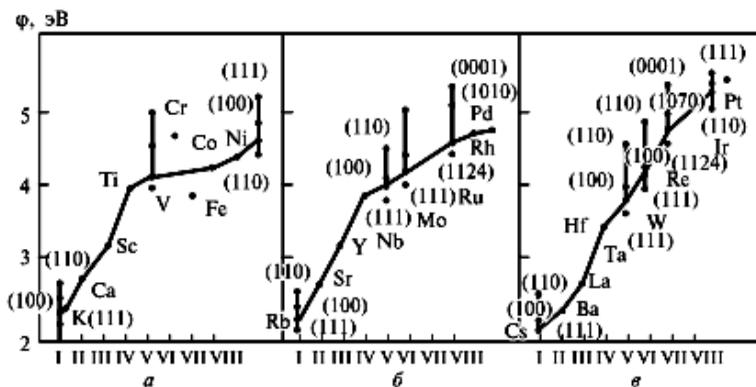


Рис. 1.151. Работа выхода электрона основных плоскостей монокристаллов 4-го (а), 5-го (б), 6-го (в) периодов периодической системы элементов

Оксиды щелочных и щелочно-земельных металлов, например BaO, SrO, CaO и др., имеют значение  $\phi < 1,0$  эВ; вольфраматы щелочно-земельных металлов типа  $Me_3WO_6$  и вольфраматы бария имеют значения  $\phi$  в пределах 1,0...2,0 эВ. Так как  $\phi$  зависит от межъядерного расстояния (см. рис. 1.150), очевидно, что она будет различной для разных плоскостей кристаллической решетки; как правило, меньшая плотность упаковки соответствует меньшему значению  $\phi$ . Рекомендованные значения  $\phi$  для некоторых материалов газоразрядной техники приведены в табл. П.1.1 прил. 1.

### Влияние поверхностных моноатомных пленок на работу выхода

При адсорбции на поверхности кристалла слоя атомов с относительно слабосвязанными валентными электронами (Cs, Ba, K, Th и др.) на поверхности образуется дипольный слой (рис. 1.152), что приводит к уменьшению  $\phi$ , т.е. смещение волновой функции электрона адатома в кристалле уменьшает граничный отрицательный заряд от электронного облака. Снижение работы выхода

$$\Delta\phi = 4\pi N p_a,$$

где  $N$  – поверхностная плотность адатомов;  $p_a$  – дипольный момент адатома. Значение  $p_a$  уменьшается с ростом  $N$ , так как уменьшается плечо диполя (каждый адатом притягивается большим числом отрицательных зарядов); максимум  $N p_a$  достигается не при моноатомном покрытии (степень покрытия  $\theta = 1$ ), а при  $\theta = 0,7$  (рис. 1.153,

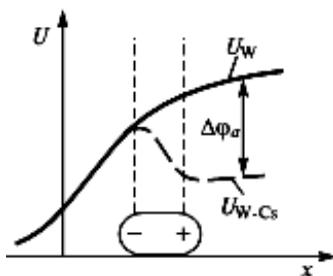


Рис. 1.152. Изменение профиля потенциала при адсорбции Cs на поверхности W

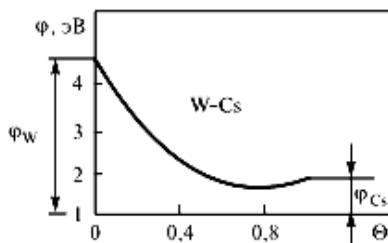


Рис. 1.153. Зависимость  $\phi$  системы W-Cs для различных степеней покрытия

табл. П.1.2 прил. 1). При  $\theta > 2$  работа выхода поверхности уже не зависит от  $\theta$  и равна работе выхода материала покрытия. Аналогичные явления происходят при адсорбции атомов металлов на поверхности полупроводника.

При покрытиях, у которых превышен предел насыщения, для ряда ковалентных полупроводников поверхностные состояния системы адсорбат-полупроводник частично заполнены таким образом, что уровень Ферми на поверхности расположен в запрещенной зоне примерно на  $1/3$  ее ширины от вершины валентной зоны.

Cs-О-активирование предпочтительнее для создания более устойчивого покрытия, чем монослой Cs, для существования которых требуется поддержание контролируемой среды.

При одновременной или последовательной адсорбции атомов Cs и O последний внедряется в поверхность кристаллической решетки под слой Cs, так что создаются диполи с большим моментом, чем при отсутствии O, вследствие чего работа выхода в минимуме снижается на большую величину. Так,  $\phi$  для грани (211) W достигает минимального значения 1,1 эВ при одинаковых степенях покрытия поверхности Cs и O, равных половине монослоя для каждого. Аналогичные эффекты наблюдаются при адсорбции Cs и O на некоторых полупроводниках (например, на грани (100) Si  $\phi$  снижается с 4,5 до 0,9 эВ).

У других полупроводников (например, GaAs) наименьшие значения  $\phi = 0,6...0,7$  эВ наблюдаются, когда структура получающихся слоев соответствует оксиду Cs<sub>2</sub>O.

Покрытие поверхности статистически неравномерно, и работа выхода меняется по поверхности, что проявляется в описанном далее эффекте «поля пятен».

Значения  $\phi$  для ряда пар адсорбент – адсорбат приведены в табл. П.1.3 прил. 1.

### 1.7.3. Контактные явления. Контактная разность потенциалов

При контакте двух разнородных металлов 1 и 2 с работами выхода  $\phi_1 < \phi_2$  ( $E_{F1} < E_{F2}$ ) (рис. 1.154, а) электроны преимущественно перетекают из металла 1 на свободные и ниже расположенные уровни металла 2. В состоянии равновесия уровни Ферми у обоих

тел выравниваются, при этом между точками  $\sigma$  и  $\varepsilon$  вакуума у поверхности соприкасающихся тел (вне линии контакта) устанавливается разность потенциалов  $U_k$ , называемая *внешней контактной разностью потенциалов*:

$$U_k = \varphi_2 - \varphi_1.$$

Выравнивание  $E_F$  в металлах обеспечивается переходом части электронов ( $\Delta n_e \sim 2 \cdot 10^6 \text{ см}^{-3}$ ) из приповерхностного слоя, т.е. концентрация электронного газа ( $n_e \sim 10^{24} \text{ см}^{-3}$ ) не отличается от невозмущенной и проводимость контакта не отличается от металлической.

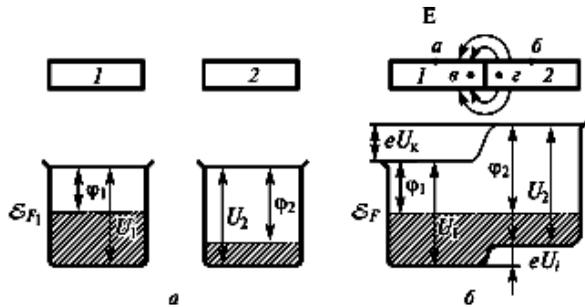


Рис. 1.154. Потенциальные диаграммы контакта металл-металл до (а) и после (б) контакта

Для возникновения внешней контактной разности потенциалов (КРП) не обязательно приводить тела в непосредственный контакт. Достаточно создать условия для обмена электронами, например в результате термоэлектронной эмиссии. В цепи, состоящей из последовательно включенных металлических проводников, значение  $U_k$  между крайними телами не зависит от работ выхода промежуточных (рис. 1.155).

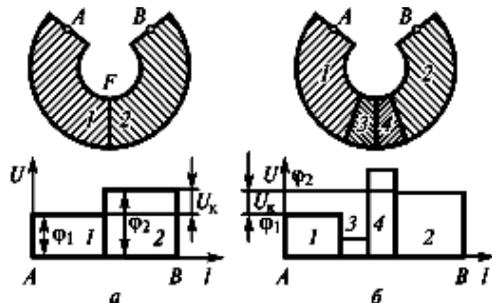


Рис. 1.155. К определению контактной разности потенциалов в цепи, образованной двумя (а) и более (б) различными металлами (1–4)

После выравнивания уровней  $E_F$  обмен электронами определяется разностью кинетических энергий электронов, находящихся на уровне Ферми, т.е.  $E_{F1} - E_{F2}$ . Более быстрые электроны переходят из первого тела во второе (так как  $E_{F1} > E_{F2}$ ), создавая вдоль линии контакта *внутреннюю контактную разность потенциалов*:

$$U_i = (U_1 + U_k - U_2) = (E_{F1} > E_{F2}).$$

Значения  $E_{F1}$  и  $E_{F2}$  определяются концентрациями электронов проводимости; следовательно,  $U_i$  создается при диффузии электронов из металла с большей концентрацией электронного газа. В равновесии диффузионный ток равен встречному дрейфовому току, создаваемому полем  $U_i$ .

Положение уровня Ферми в металле хотя и слабо, но зависит от температуры, поэтому зависит от температуры и  $U_i$ , если считать постоянной электронную концентрацию  $n_{e1}$ ,  $n_{e2}$ , то

$$U_i = \left[ (E_{F02} - E_{F01}) + \left( \pi^2 / 12 \right) (k_B T) (1/E_{F02} - 1/E_{F01}) \right],$$

где  $E_{F01} = E_{F1} |_{T=0}$ ;  $E_{F02} = E_{F2} |_{T=0}$ . Однако в реальных телах еще большее влияние на  $E_F$  (и на  $U_i$ ) оказывают другие факторы, например, изменение электронной концентрации вследствие температурного расширения решетки (см. разд. 1.2). В металлах  $U_i$  не превышает примерно  $10^{-2}$  В, тогда как  $U_k$  может достигать нескольких вольт. Между электродами  $U_k$  может существенно влиять на работу низковольтных газоразрядных устройств (особенно если значения работы выхода изменяются со временем из-за напылений, адсорбции газов и т.д.).

## Глава 2. ЭМИССИЯ ЗАРЯЖЕННЫХ ЧАСТИЦ С ПОВЕРХНОСТИ ТВЕРДЫХ ТЕЛ

---

### 2.1. Термоэлектронная эмиссия

#### 2.1.1. Электроны в металлах

«Электронный газ» в металлах можно рассматривать в приближении свободных электронов зоны проводимости, возникающей при обобществлении валентных электронов атомов при сближении атомов на расстояния, когда перекрываются электронные облака отдельных атомов. Сплошная зона проводимости возникает из-за расщепления энергетических уровней электронов отдельных атомов в силу запрета нахождения электронов в одинаковом квантовом состоянии. Так как число атомов велико, то расщепленные уровни электронов образуют непрерывную энергетическую полосу, называемую *зоной проводимости*, в которой электроны можно считать свободными, т.е. не привязанными к какому-либо атому. С другой стороны, оставшиеся без электрона атомы, т.е. ионы, играют роль нейтрализующего электроны фона, так что электронный газ и ионы кристаллической решетки можно считать плазмой.

Расстояние между ионами:  $\frac{1}{n^{1/3}} \approx \frac{1}{(10^{27})^{1/3}} = 10^{-9}$  м стано-

вится меньше длины волны де Бройля электрона:  $\lambda_e = \frac{h}{m_e v_e} \approx \frac{6,6 \cdot 10^{-34} \text{ Дж} \cdot \text{с}}{\sqrt{1,38 \cdot 10^{-23} \cdot 300 \cdot 9 \cdot 10^{-31} \text{ кг}}} \approx 10^{-8}$  м. Следовательно, электрон

нельзя считать частицей, т.е. плазма является квантово-вырожденной, подчиняющейся уже не классической статистике Максвелла – Больцмана, а статистике Ферми – Дирака. При этом электрон необходимо описывать волновой функцией:

$$\psi(\vec{r}, t) = \psi_k(\vec{r}) \cdot \varphi(t) = \frac{1}{V^{1/2}} \exp(i\vec{k}\vec{r}) \exp(-i\omega t),$$

где  $\vec{k} = \frac{2\pi}{L}(n_x, n_y, n_z)$  – волновой вектор,  $n_x, n_y, n_z$  – целые по-

ложительные или отрицательные числа;  $V = L^3$  – объем металла;  $\omega$  – частота волны. Волновая функция имеет смысл вероятности нахождения электрона в данной точке в данный момент времени (квадрат модуля этой функции равен плотности электронного облака). Энергия электрона в состоянии  $\Psi_k$ :  $E_k = \frac{p_k^2}{2m_e} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m_e}$ . Функ-

ция распределения Ферми – Дирака, т.е. число частиц в одном состоянии:  $f(E) = \frac{1}{1 + \exp\left(\frac{E - E_F}{kT}\right)}$  (рис. 2.1). Импульс электрона

можно выразить через квантовое число  $\vec{s}$ :  $\vec{p} = \frac{h}{L}\vec{s}$ , так что компо-

ненты импульса  $p_x = \frac{h}{L}s_x$ ,  $p_y = \frac{h}{L}s_y$ ,  $p_z = \frac{h}{L}s_z$ , где  $s_x, s_y, s_z$  –

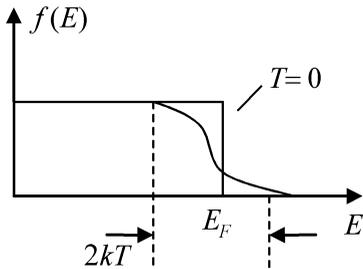


Рис. 2.1. Функция распределе-  
ния Ферми – Дирака

целье положительные или отрица-  
тельные числа. Элементарный куб-  
ик в импульсном пространстве  
имеет объем  $\frac{h^3}{L^3}$ , поэтому число  
возможных квантовых состояний в  
интервале  $dp_x dp_y dp_z$  равно

$\frac{L^3}{h^3} dp_x dp_y dp_z$ . При  $T = 0$  все элек-

троны находятся внутри так называемой сферы Ферми (рис. 2.2). Если учесть принцип Паули и две возможные ориентации спина,

то число состояний в сфере Ферми:  $2 \left(\frac{L^3}{h^3}\right) \cdot \frac{4}{3} \pi p_F^3 = N$ , следова-

тельно,  $p_F = h \left(\frac{3n_0}{8\pi}\right)^{1/3}$ , где  $n_0 = \frac{N}{V}$ . Тогда энергия Ферми равна:

$$E_F = \frac{p_F^2}{2m_e} = \frac{\hbar^2}{2m_e} \cdot \left(\frac{3n_0}{8\pi}\right)^{2/3} = \frac{\hbar^2}{2m_e} (3\pi^2 n_0)^{2/3}. \quad \text{Энергия Ферми не за-}$$

висит от объема металла, а зависит от концентрации свободных электронов. На первый взгляд, странный вывод. При росте  $V$  число  $N$  растет, казалось бы, должно расти число уровней и, значит, повышаться верхний уровень  $E_F$ , но  $E_F$  не зависит от общего числа уровней. Это связано с тем, что уменьшается расстояние между уровнями  $\Delta E = \frac{E_F}{N/2}$  («2» – с учетом спина) и

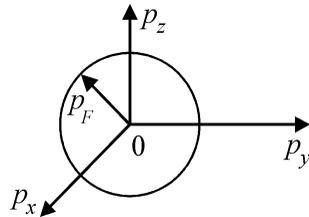


Рис. 2.2. Сфера Ферми в импульсном пространстве

зона проводимости при  $N \rightarrow \infty$  становится сплошной. Число частиц с энергией не больше  $E$  определим из соотношения:

$$E = \frac{\hbar^2}{2m_e} (3\pi^2 n)^{2/3}, \quad \text{следовательно-}$$

$$\text{но, } n(E) = \frac{1}{3\pi^2} \left(\frac{2m_e E}{\hbar^2}\right)^{3/2}.$$

Тогда плотность электронов в импульсном пространстве, т.е. распределение по энергии

$$\rho(E) = \frac{dn}{dE} = \frac{1}{2\pi^2} \left(\frac{2m}{\hbar^2}\right)^{3/2} \cdot E^{1/2}.$$

С учетом распределения Ферми – Дирака распределение электронов по энергии имеет вид

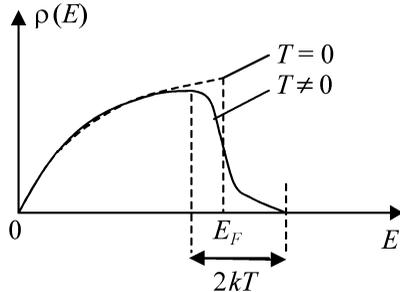


Рис. 2.3. Функция распределение электронов по энергии

$$\rho(E) = \frac{1}{2\pi^2} \left(\frac{2m}{\hbar^2}\right)^{3/2} \frac{E^{1/2}}{1 + \exp\left(\frac{E - E_F}{kT}\right)} \quad (\text{рис. 2.3}).$$

## 2.1.2. Плотность термоэмиссионного тока

Испускание электронов нагретыми проводящими материалами называется *термоэлектронной эмиссией*. Это явление было обнаружено в 1883 г. Эдисоном. Аналитический расчет плотности термоэмиссионного тока можно получить исходя из модели Зоммерфельда о нахождении электронов в металле как в потенциальной яме. При абсолютном нуле температуры энергия электронов металла не может быть больше энергии Ферми, поэтому ни один электрон не может выйти из металла, а функция распределения обрывается при  $E_F$  (см. рис. 2.3). При  $T > 0$  обрыв сглаживается, появляется «хвост» функции распределения электронов с энергиями больше  $E_F$ , именно у этих электронов, количество которых экспоненциально растет с ростом температуры поверхности, появляется ненулевая вероятность преодоления потенциального барьера на границе металла. Поэтому термоэмиссионный ток заметен только для нагретых тел. Как известно из электростатики, на электрон вне металла около его поверхности действует сила со стороны наведенного симметрично поверхности положительного заряда:

$$F(x) = -\frac{e^2}{4x^2}$$
 – так называемая сила «электрического изображения», которая стремится вернуть вылетевший электрон обратно в металл.

Зависимость потенциальной энергии можно выразить соотношением:  $U(x) = E_F + e\phi_a - \frac{e^2}{4x}$ . Те электроны, которые имеют перпендикулярную к поверхности составляющую энергии больше высоты потенциального барьера, будут уходить на бесконечность, т.е. эмитироваться с поверхности (рис. 2.4).

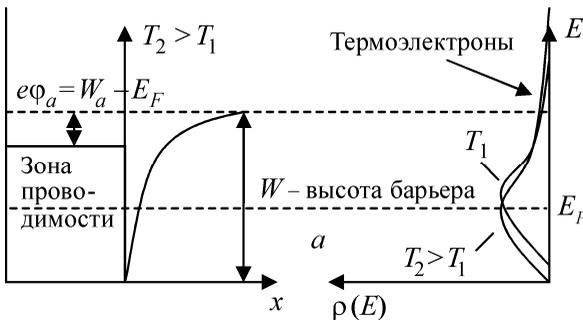


Рис. 2.4. Энергетическая диаграмма, поясняющая механизм термоэмиссии

Таким образом, термоэмиссионный ток обусловлен «хвостом» функции распределения. При низких температурах таких электронов пренебрежимо мало. С ростом температуры «хвост» удлиняется, термоэмиссия растёт.

Подсчитаем количество электронов с импульсами от  $p_x$  до  $p_x + dp_x$  в единице объема:

$$\begin{aligned} dn_x &= \frac{2}{h^3} dp_x \int_{-\infty}^{+\infty} \int dp_y dp_z f(p_x, p_y, p_z) = \\ &= \frac{2}{h^3} dp_x \int_{-\infty}^{+\infty} \int dp_y dp_z \frac{1}{1 + \exp\left(\frac{E - E_F}{kT}\right)} = \\ &= \frac{2}{h^3} dp_x \int_{-\infty}^{+\infty} \int dp_y dp_z \frac{1}{1 + \exp\left(\left(\frac{p_x^2 + p_y^2 + p_z^2}{2m_e} - E_F\right) / kT\right)}. \end{aligned}$$

Для вычисления этого интеграла перейдем к полярной системе координат:  $p_y^2 + p_z^2 = \rho^2$ ,  $dp_y dp_z = \rho d\rho d\phi$ , тогда

$$dn_x = \frac{2}{h^3} dp_x \int_0^{\infty} \rho d\rho \int_0^{2\pi} \frac{d\phi}{1 + \exp\left(\frac{\rho^2 - 2m_e E_F + p_x^2}{2m_e kT}\right)}.$$

Обозначим  $\frac{\rho^2}{2m_e kT} = x$ ,  $\frac{p_x^2 - 2m_e E_F}{2m_e kT} = \theta$ ,

тогда  $dn_x = \frac{4\pi m_e kT}{h^3} dp_x \int_0^{\infty} \frac{dx}{1 + \exp(x + \theta)}$ .

Умножим числитель и знаменатель дроби под интегралом на  $\exp(-x - \theta)$ :

$$dn_x = -\frac{4\pi m_e kT}{h^3} dp_x \int_0^{\infty} \frac{d(\exp(-x - \theta))}{1 + \exp(-x - \theta)}.$$

Введем переменную  $\xi = \exp(-x - \theta)$ , тогда:

$$dn_x = -\frac{4\pi m_e kT}{h^3} dp_x \int_{\exp(-\theta)}^0 \frac{d\xi}{\xi + 1} = \frac{4\pi m_e kT}{h^3} dp_x \ln(1 + \exp(-\theta)) =$$

$$= \frac{4\pi m_e kT}{h^3} dp_x \ln\left(1 + \exp\left(-\frac{E_x - E_F}{kT}\right)\right).$$

Плотность термоэмиссионного тока, находим как количество всех электронов, падающих на поверхность металла на  $1 \text{ см}^2$  за  $1 \text{ с}$  и имеющих энергию  $E_x \geq W_a$ , где  $E_x = \frac{p_x^2}{2m_e}$ ,  $dE_x = \frac{p_x dp_x}{m_e}$ :

$$j_t = \int_{W_a}^{\infty} ev_x dn_x = \int_{W_a}^{\infty} e \frac{p_x}{m_e} dn_x =$$

$$= \int_{W_a}^{\infty} \frac{e}{m_e} p_x \frac{4\pi m_e kT}{h^3} dp_x \ln\left(1 + \exp\left(-\frac{E_x - E_F}{kT}\right)\right) =$$

$$= \frac{4\pi m_e kT}{h^3} \int_{W_a}^{\infty} \ln\left(1 + \exp\left(-\frac{E_x - E_F}{kT}\right)\right) dE_x.$$

При  $E_x > W_a$   $E_x - E_F \gg kT$ , используем приближение  $\ln(1 + \alpha) \approx \alpha$  при  $\alpha \rightarrow 0$ :

$$j_T \approx \frac{4\pi m_e ekT}{h^3} \int_{W_a}^{\infty} \exp\left(-\frac{E_x - E_F}{kT}\right) dE_x = \frac{4\pi m_e ekT}{h^3} \exp\left(-\frac{W_a - E_F}{kT}\right).$$

В итоге получим:

$$j_T = A_0 \cdot T^2 \exp\left(-\frac{e\varphi_a}{kT}\right) - \quad (2.1)$$

это формула Ричардсона – Дэшмана,  $A_0 = \frac{4\pi m_e ek^2}{h^3} = 120 \frac{A}{\text{см}^2 \cdot \text{град}^2}$  – универсальная постоянная Ричардсона;  $e\varphi_a = W_a - E_F$  – работа выхода.

Необходимо учесть прозрачность барьера  $\bar{D}$  и температурную зависимость работы выхода. При изменении температуры вследст-

вие изменения концентрации электронов  $n_0$  меняется  $E_F$ . Это можно учесть, введя температурный коэффициент работы выхода

$\alpha = e \frac{d\varphi}{dT} \Big|_{T=T_0}$ , тогда  $e\varphi_a(T) = e\varphi_a(T_0) + \alpha(T - T_0)$ . Как известно,

работа выхода может увеличиваться, или уменьшаться с ростом температуры в зависимости от металла. При расширении металла уменьшается плотность зарядов, обуславливающих скачок потенциала на границе, поэтому с ростом температуры уменьшается глубина потенциальной ямы и понижается уровень Ферми в металле. Если с ростом температуры уровень Ферми падает быстрее, чем глубина потенциальной ямы, то работа выхода будет увеличиваться. Если уровень Ферми понижается медленнее, то работы выхода уменьшается. Поэтому коэффициент  $\alpha$  для различных материалов может быть как больше, так и меньше нуля и имеет значения  $|\alpha| \sim 10^{-5} \div 10^{-4} \frac{\text{эВ}}{\text{град}}$ . С учетом этого формула для плотности термоэмиссионного тока примет вид

$$j_T = \bar{D} \cdot A_0 e^{-a/k} T^2 \exp\left(-\frac{e\varphi_a}{kT}\right) = A \cdot T^2 \exp\left(-\frac{e\varphi_a}{kT}\right), \quad (2.2)$$

где  $A = \bar{D} \cdot A_0 e^{-a/k}$  – постоянная Ричардсона, которая, так же как работа выхода, определяется для каждого материала экспериментально и приводится в таблицах специализированной литературы по эмиссионной электронике. Значения постоянной Ричардсона  $A$  для разных металлов изменяются от 15 до 350 А/(см<sup>2</sup> · К<sup>2</sup>).

### 2.1.3. Распределение термоэлектронов по энергиям. Средняя энергия термоэлектронов

Число электронов, имеющих импульсы от  $p_x$  до  $p_x + dp_x$ :

$$dn_x = \frac{4\pi m_e kT}{h^3} \ln\left(1 + \exp\left(-\frac{E_x - E_F}{kT}\right)\right) dp_x.$$

Так как термоэлектроны – это электроны, которые имеют импульсы, удовлетворяющие условию:  $\frac{p_x^2}{2m_e} \geq W_a$ , следовательно:

$$\frac{p_x^2}{2m_e} - E_F \geq W_a - E_F = e\varphi_a \gg kT,$$

поэтому

$$dn_x \approx \frac{4\pi m_e kT}{h^3} \exp\left(-\frac{E_x - E_F}{kT}\right) dp_x.$$

Пусть  $v'_x$  – скорость термоэлектрона в вакууме. Тогда:

$$\frac{m_e v_x'^2}{2} = \frac{m_e v_x^2}{2} - W_a, \text{ т.е. } \frac{p_x^2}{2m_e} = \frac{p_x'^2}{2m_e} + W_a, \text{ где } p_x' = m_e v_x'^2.$$

Число электронов, эмитированных с единицы поверхности в единицу времени и имеющих энергию от  $E'_x$  до  $E'_x + dE'_x$ :

$$\begin{aligned} dN &= v'_x dn_x = p'_x \cdot dp'_x \cdot \frac{4\pi m_e kT}{h^3} \cdot \exp\left(\frac{E_F}{kT}\right) \exp\left(-\frac{\frac{mv_x'^2}{2} + W_a}{kT}\right) = \\ &= \frac{4\pi m_e kT}{h^3} \cdot \exp\left(-\frac{e\varphi_a}{kT}\right) \cdot \exp\left(-\frac{E'_x}{kT}\right) dE'_x. \end{aligned}$$

Учтем, что

$$j_T = \frac{4\pi m_e k^2 T^2}{h^3} \cdot \exp\left(-\frac{e\varphi_a}{kT}\right),$$

тогда

$$dN = \frac{j_T}{ekT} \exp\left(-\frac{E'_x}{kT}\right) dE'_x = \frac{N}{kT} \exp\left(-\frac{E'_x}{kT}\right) dE'_x,$$

где  $N = \frac{j_T}{e}$ . Следовательно, функция распределения электронов в вакууме по составляющей кинетической энергии, обусловленной движением перпендикулярно плоскости катода:

$$f(E_x) = \frac{1}{N} \frac{dN}{dE_x} = \frac{1}{kT} \exp\left(-\frac{E_x}{kT}\right) -$$

это *модифицированное распределение Максвелла*. Для компонент энергии  $E_y$  и  $E_z$  максвелловское распределение, так как в этих направлениях электроны не преодолевают потенциального барьера:

$$f(E_y) = \frac{\exp\left(-\frac{E_y}{kT}\right)}{\sqrt{4\pi kT} \sqrt{E_y}}, \quad f(E_z) = \frac{\exp\left(-\frac{E_z}{kT}\right)}{\sqrt{4\pi kT} \sqrt{E_z}}.$$

Средняя энергия движения электронов в перпендикулярном направлении к плоскости катода:

$$\begin{aligned} \bar{E}_x &= \int_0^{\infty} E_x f(E_x) dE_x = kT \int_0^{\infty} \xi \exp(-\xi) d\xi = \\ &= kT \left( -\exp(-\xi) \cdot \xi \Big|_0^{\infty} + \int_0^{\infty} \exp(-\xi) d\xi \right) = kT. \end{aligned}$$

Тогда полная средняя энергия термоэлектронов, с учетом

$$\bar{E}_z = \bar{E}_y = \frac{kT}{2\sqrt{\pi}} \int_0^{\infty} \sqrt{\xi} \exp(-\xi) d\xi = \frac{1}{2} kT, \text{ будет равна:}$$

$$\bar{E} = \bar{E}_x + \bar{E}_y + \bar{E}_z = 2kT.$$

Возможна достаточно простая экспериментальная проверка распределения электронов по энергиям *методом задерживающего поля*. Для этого нужно приложить не ускоряющее электроны электрическое поле, а тормозящее (рис. 2.5). В этом случае до анода дойдут только те электроны, скорость  $v_x$  которых удовлетворяет

условию:  $\frac{1}{2} m v_x^2 \geq -eU_a$ . Тогда полный ток на анод площади  $S$ :

$$\begin{aligned} I_a &= Se \int_{\sqrt{\frac{2eV_a}{m_e}}}^{\infty} v_x dn = Se \int_{\sqrt{\frac{2eV_a}{m_e}}}^{\infty} \exp\left(-\frac{E_x}{kT}\right) \frac{dE_x}{kT} = \\ &= S j_T \exp\left(\frac{eU_a}{kT}\right) = I_T \exp\left(\frac{eU_a}{kT}\right). \end{aligned}$$

Из этого соотношения:

$$\ln I_a = \ln I_T + \frac{e}{kT} U_a = \ln I_T + \frac{11600}{T} U_a.$$

Линейная зависимость  $\ln I_a(U_a)$  в области отрицательных  $U_a$  (см. рис. 2.5) может служить экспериментальным доказательством максвелловского распределения термоэлектронов.

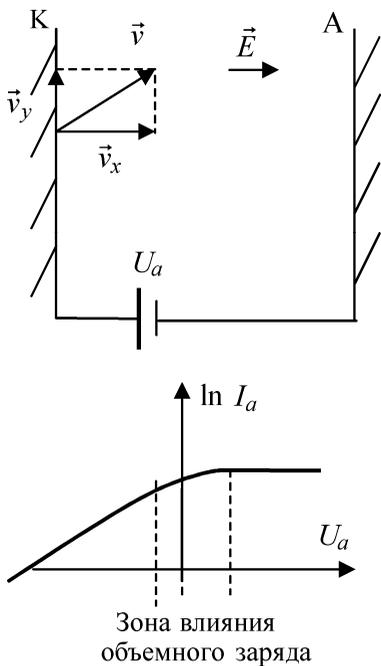


Рис. 2.5. Определение энергетического распределения термоэлектронов методом задерживающего поля

Эксперименты подтверждают то, что эмитированные электроны имеют распределение Максвелла, причем температура электронов, определенная по максвелловскому распределению, равна температуре эмиттера. Поэтому начальные энергии эмитированных электронов (с учетом того, что  $1 \text{ эВ} \approx 11600 \text{ К}$ ) можно считать нулевыми по сравнению с энергиями, приобретаемыми в ускоряющей разности потенциалов в несколько вольт. Однако для охлаждения поверхности эмиттера эта энергия существенна, к тому же каждый электрон помимо тепловой энергии уносит из металла энергию, равную работе выхода, так что удельная мощность поверхностного охлаждения  $w = -(j_T/e)(2kT_S + e\phi_a)$ .

### 2.1.4. Экспериментальное определение термоэлектронных характеристик вещества

#### Метод прямой Ричардсона

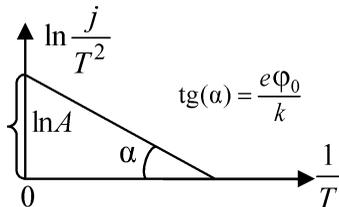


Рис. 2.6. Определение термоэлектронных характеристик методом прямой Ричардсона

Если для некоторого материала катода измерить для различных температур величины плотностей тока, то можно построить график зависимости  $\ln \frac{j}{T^2}$  как функцию от  $\frac{1}{T}$  (рис. 2.6). Графиком этой зависимости, согласно (2.2), будет являться

прямая, так как  $\ln \frac{j_T}{T^2} = \ln A - \frac{e\phi_0}{kT}$ , тангенс угла наклона прямой равен  $e\phi_0/k$ . Прямая отсекает на оси абсцисс значение  $\ln A$ .

### Калориметрический метод

При уходе с поверхности один электрон уносит из металла энергию  $\varepsilon = e\phi_0 + 2kT$ . Полная энергия, уносимая электронами в единицу времени с единичной площади поверхности:

$$Q = \varepsilon \cdot \frac{j_T}{e} = j_T \left( \phi_a + \frac{2kT}{e} \right).$$

Если на анод подано запирающее напряжение (рис. 2.7), то электроны ничего не уносят и потери мощности на омический нагрев идут на излучение.

При  $j_T = 0$ :  $RI^2 = S\alpha\sigma_{St}T^4$ , где  $R$  – сопротивление катода;  $S$  – площадь катода;  $\alpha$  – коэффициент серости;  $\sigma_{St}$  – константа Стефана – Больцмана. При  $j_T \neq 0$  энергия, выделяющаяся в катоде, расходуется не только на тепловое излучение, но и на термоэмиссию. Чтобы сохранить температуру катода потребуется увеличить ток:  $I + \Delta I$ , т.е. при  $j_T \neq 0$  тепловой баланс имеет вид:

$$R(I + \Delta I)^2 = S\alpha\sigma_{St}T^4 + I_a \cdot \left( \phi_a + \frac{2kT}{e} \right), \quad \text{или} \quad RI^2 + 2RI\Delta I + \Delta I^2 = S\alpha\sigma_{St}T^4 +$$

$$+ I_a \left( \phi_a + \frac{2kT}{e} \right). \quad \text{Считая, что } \Delta I \ll I, \text{ получаем: } 2RI\Delta I =$$

$$= I_a \left( \phi_a + \frac{2kT}{e} \right), \text{ т.е. } e\phi_a = \frac{2RI\Delta Ie}{I_a} - 2kT. \text{ Таким образом, по изме-}$$

нению тока для сохранения заданной температуры определяем работу выхода. В отличие от метода прямых Ричардсона, в котором определяемое значение может быть не точным из-за зависимости работы выхода от температуры, определяемая калориметрическим методом работа выхода не зависит от характера ее температурной зависимости.

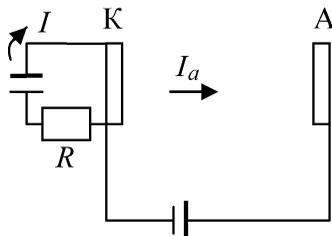


Рис. 2.7. Определение работы выхода калориметрическим методом

## Метод контактной разности потенциалов

Для определения работы выхода некоторого металла измеряется контактная разность потенциалов между данным металлом и металлом, работа выхода которого известна. На границе контакта двух различных материалов (граница А на рис. 2.8), возникает внутренняя контактная разность потенциалов, так как из-за свободного перетекания электронов из одного металла в другой в контактирующих участках устанавливается общий химический потенциал или единый уровень Ферми.

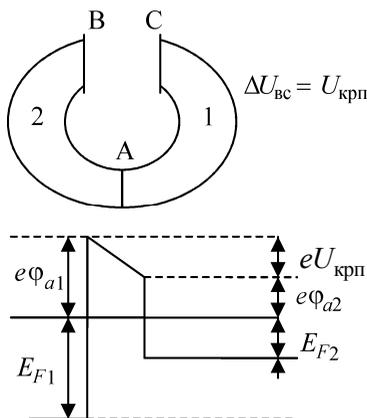


Рис. 2.8. Определение работы выхода по контактной разности потенциалов

В результате в месте соприкосновения устанавливается внутренняя контактная разность потенциалов

$$U_{\text{вн}} = \frac{1}{e}(E_{F1} - E_{F2}),$$

а между границами соприкосновения металла с вакуумом (границы В и С на рис. 2.8) устанавливается внешняя контактная разность потенциалов  $U_{\text{крп}} = \varphi_{a1} - \varphi_{a2}$ , причем до более высокого потенциала заряжается металл с меньшей работой выхода.

Таким образом, если известны работы выхода одного материала

можно найти работу выхода другого металла, если измерить их контактную разность потенциалов. Для измерения контактной разности потенциалов можно использовать метод смещения вольт-амперных характеристик (ВАХ).

В случае, если катод и анод изготовлена из одного материала  $U_{\text{крп}} = 0$  (сплошная линия ВАХ на рис. 2.9). В случае разных материалов к внешней разности потенциалов  $U_a$  добавляется ( $\varphi_{aA} < \varphi_{aK}$ ) или вычитается ( $\varphi_{aA} > \varphi_{aK}$ ) контактная разность потенциалов  $U_{\text{крп}}$ . В результате по смещению ВАХ определяется

$$U_{\text{крп}}.$$

Значения работы выхода наиболее часто используемых для термокатодов металлов приведены в табл. 2.1.

Таблица. 2.1

**Работа выхода поликристаллических металлов**

Работа выхода	Ir	W	Mo	Ta	C	La	Th	Ba	Cs
$e\phi_a$ , эВ	4,7	4,54	4,3	4,12	4,1	3,3	3,3	2,49	1,81

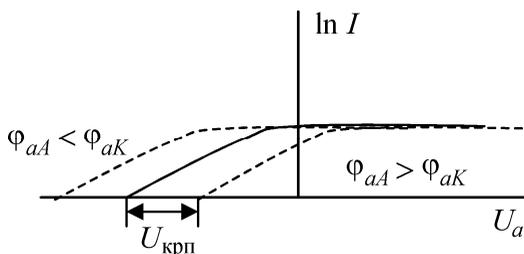


Рис. 2.9. Определение контактной разности потенциалов методом смещения вольт-амперных характеристик

### 2.1.5. Эффект Шоттки

При отсутствии (или пренебрежимо малой) напряженности ускоряющего электроны внешнего электрического поля эмитированные электроны создают около поверхности отрицательный пространственный заряд, ограничивающий ток термоэмиссии. Поэтому при слабом внешнем ускоряющем электрическом поле в режиме ограничения тока объемным зарядом плотность тока на анод определяется законом «3/2», т.е. ток на анод зависит от напряжения на аноде  $j_a \propto U_a^{3/2}$ . При дальнейшем увеличении  $U_a$  объемный заряд у катода исчезает и, казалось бы, ток должен выйти на насыщение, при котором все эмитированные электроны уходят на анод. Однако, как показали эксперименты, при дальнейшем увеличении  $U_a$ , при напряженностях поля больше  $10^4$  В/см ток эмиссии продолжает медленно расти ( $\propto \exp(E^{1/2})$ ). Рост электронного тока эмиссии под действием внешнего электрического поля вследствие уменьшения работы выхода электрона из твердого тела из-за понижения в поле потенциального барьера (рис. 2.10)  $\phi_E = \phi_a - \Delta\phi_{ш}$  называется эф-

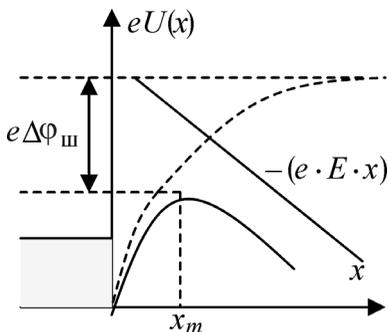


Рис. 2.10. Форма потенциального барьера во внешнем поле

фактом Шоттки. В присутствии у поверхности металла внешнего электрического поля меняется форма потенциального барьера (см. рис. 2.10), который теперь описывается в виде:

$$eU(x) = E_F + e\varphi_a - \frac{e^2}{4x} - eEx.$$

Найдем положение максиму-

ма:  $eU'(x) = \frac{e^2}{4x_m^2} - eE = 0$ , отку-

да  $x_m = \frac{1}{2}\sqrt{e/E}$ . Чем сильнее

электрическое поле, тем ближе к поверхности находится макси-

мум:  $x_m \left[ \overset{\circ}{\text{Å}} \right] = \frac{1,9}{\sqrt{E \left[ \overset{\circ}{\text{В/Å}} \right]}}$ .

Значение потенциала в максимуме:

$$eU(x_m) = E_F + e\varphi_a - \frac{e^2\sqrt{E}}{2\sqrt{e}} - \frac{e^{3/2} \cdot \sqrt{E}}{2} = E_F + e\varphi_a - e^{3/2}\sqrt{E}.$$

Следовательно, изменение работы выхода:  $e\Delta\varphi_{\text{ш}} = e^{3/2}\sqrt{E}$ ,

$$e\Delta\varphi_{\text{ш}} [\text{эВ}] = 3,79 \sqrt{E \left[ \overset{\circ}{\text{В/Å}} \right]}.$$

С учетом этого плотность термоэмиссионного тока при наличии электрического поля:

$$j_{T\text{ш}} = j_T \cdot \exp\left(\frac{e^{3/2} \cdot E^{1/2}}{kT}\right). \quad (2.3)$$

Этот ток в присутствии внешнего сильного ускоряющего электрического поля целиком будет приходить на анод

$j_a = j_T \cdot \exp\left(\frac{e^{3/2} \cdot E^{1/2}}{kT}\right)$ . Прологарифмируем это соотношение:

$\ln j_a = \ln j_T + \frac{e^{3/2}}{k} \frac{\sqrt{E}}{T}$ . Таким образом, при наличии сильного электрического поля логарифм плотности тока можно описать зависимостью  $\ln j_a = A + B\sqrt{U_a}$ , где  $U_a$  – ускоряющее напряжение на аноде,  $B = \text{tg}\alpha = \frac{e^{3/2}}{kT}$  (рис. 2.11).

Нелинейность и периодичность экспериментальной зависимости  $\ln j_a = f(\sqrt{U_a})$  при больших напряжениях, т.е. больших  $E$ , связана с тем, что ширина потенциального барьера уменьшается с увеличением  $E$ , отражение электронных волн от потенциального барьера (за счет интерференции отражающихся от двух плоскостей) имеет периодическую зависимость от толщины барьера.

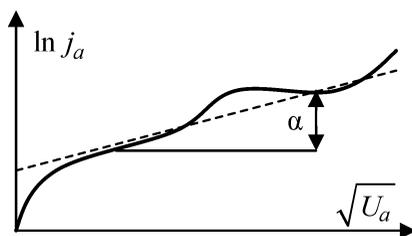


Рис. 2.11. Зависимость плотности тока на анод от ускоряющего напряжения

### 2.1.6. Влияние поверхностной неоднородности материала катода

Тугоплавкие металлы, использующиеся в качестве термокатодов, такие, как вольфрам, тантал, молибден (W, Ta, Mo), кристаллизуются в объемно-центрированную кубическую (ОЦК) решетку. Плотность атомов в разных гранях – различная, она определяется расстоянием между атомами. Например, расстояние между точками  $AE = \sqrt{\frac{a^2}{2} + \frac{a^2}{4}} = \frac{a\sqrt{3}}{2}$  меньше, чем между  $AD = a$  (рис. 2.12). Следовательно, плотность атомов в плоскости грани  $AA_1C_1C$  больше, чем в плоскости  $AA_1D_1D$ . Поверхность металла можно представить в виде зубцов различных граней кристалла, выставленных в вакуум.

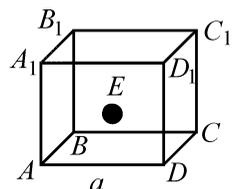


Рис. 2.12. Объемно-центрированная кубическая решетка

Если соседствуют участки с разной плотностью атомов, то такие участки обладают разной работой выхода электронов, так как уровень заполнения электронного облака проводимости зависит от концентрации ионов нейтрализующего фона. Например, на участке 2 (рис. 2.13) с гранями, содержащими больше атомов, электроны будут ближе находиться к поверхности и, тем самым, будут в большей степени компенсировать положительные заряды зубцов,

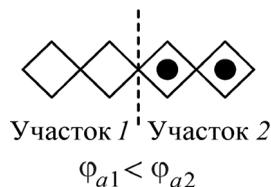


Рис. 2.13. Поверхность металла с участками разной структуры

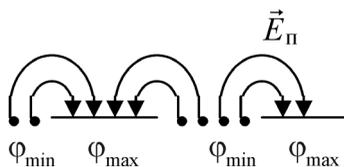


Рис. 2.14. Участки поверхности с разными работами выхода

создающих вытягивающее поле, по сравнению с участком 1. Другими словами, можно сказать, что электроны легче удерживаются в плоскости граней, содержащих большую концентрацию атомов, т.е. на участке 2 работа выхода электронов будет больше, чем на участке 1. Тогда поверхность даже чистого металла можно рассматривать как пятнистую с областями, обладающими различной работой выхода.

Между этими областями возникает контактная разность потенциалов, создающая над незаряженной металлической поверхностью электрическое поле. Это поле можно назвать *полем пятен*  $\vec{E}_\Pi$  (рис. 2.14). Оно направлено таким образом, чтобы сдерживать электроны, эмитированные пятнами с малой работой выхода и ускорять электроны на участках с большой работой выхода. Таким образом, коллективное действие плазмы металла стремится нивелировать возникающие неоднородности. При этом изменяется потенциальная энергия:

$$eU = W_F + e\phi_a - \frac{e^2}{4x} - eEx \pm eE_\Pi x_\Pi.$$

Таким образом, для эмиссии электронов с участков с  $\Phi_{\min}$  возникает дополнительный потенциальный барьер величиной

$\Delta U = \int_0^{\infty} E_{\Pi} dx$  (рис. 2.15). Среднее значение  $\bar{\varphi}$  определяем из соотношения:

$$I = I_{\max} + I_{\min} = S \cdot A \cdot T^2 \cdot \exp\left(-\frac{e\bar{\varphi}}{kT}\right),$$

тогда 
$$\bar{\varphi} = -\frac{kT}{e} \ln\left(\frac{S_{\min}}{S} \exp\left(-\frac{e\varphi_{\min}}{kT}\right) + \frac{S_{\max}}{S} \exp\left(-\frac{e\varphi_{\max}}{kT}\right)\right).$$

Надо учесть, что  $x_{\Pi} < x$  (область действия поля пятен меньше области действия внешнего электрического поля). На больших расстояниях внешнее электрическое поле возьмет свое и «загнет» ход кривой потенциальной энергии. Поэтому максимум все равно будет, причем

$$\Delta U_1 = \int_0^{x_{\text{кр}}} (E_{\Pi} - E) dx,$$

где положение максимума определяется из соотношения  $E_{\Pi}(x_{\text{кр}}) = E$ . При дальнейшем увеличении внешнего электрического поля  $\Delta U_1$  падает, и термоэмиссионный ток резко возрастает.

Этот эффект получил название *аномального эффекта Шоттки*. Это аномальное увеличение тока прекратится, как только  $\Delta U_1 = 0$ , т.е.  $E_{\Pi} = E$ . При дальнейшем увеличении  $E$  эмиссия с областей, имеющих  $\varphi_{\min}$ , будет происходить независимо от пятен с  $\varphi_{\max}$ , увеличение тока термоэмиссии будет соответствовать снижению работы выхода по нормальному эффекту Шоттки:

$$(e\varphi_{aE}) = e\varphi_{\min} - e^{3/2} E^{1/2}.$$

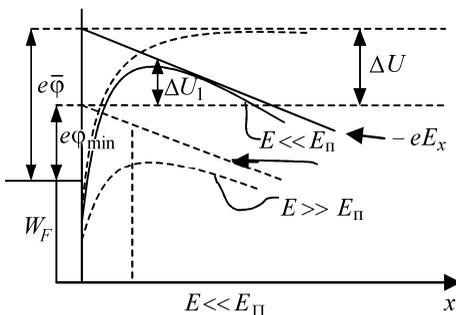


Рис. 2.15. Потенциальная диаграмма для пятен с  $\varphi_{\min}$

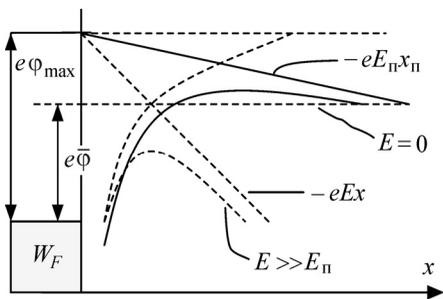


Рис. 2.16. Потенциальная диаграмма для пятен с  $\Phi_{\max}$

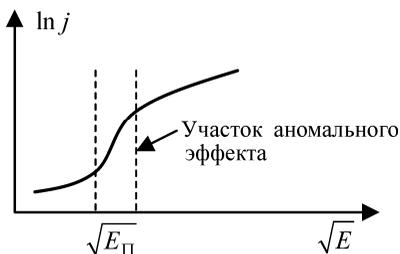


Рис. 2.17. Зависимость термоэлектронного тока от напряженности электрического поля

что  $E_{II} = \frac{\delta\phi}{\delta y}$ , можно оценить характерный размер пятен  $\delta y$ . Следует иметь в виду, что наличие пятен с разной работой выхода деформирует прямую Ричардсона зависимости  $\ln \frac{j_T}{T^2} = f\left(\frac{1}{T}\right)$  (см. рис. 2.16), так как при низких температурах эмиссия идет в основном с областей с  $\Phi_{\min}$ , при высоких подключаются области с  $\Phi_{\max}$ .

### 2.1.7. Пленочные катоды. Эффективные термокатоды

В начале прошлого века металлургами было найдено, что добавка тория (в виде оксида) значительно улучшает механические свойства вольфрама. В 1913 г. Ленгмюр и Роджерс обнаружили,

Поле пятен понизит барьер для пятен с  $\Phi_{\max}$  (рис. 2.16), но в случае  $E \gg E_{II}$  пятна с  $\Phi_{\max}$  также перестанут замечать поле пятен  $E_{II}$ , и увеличение термотока будет соответствовать нормальному эффекту Шоттки во внешнем электрическом поле:

$$(e\phi_{aE}) = e\phi_{\max} - e^{3/2} E^{1/2}.$$

По экспериментальной зависимости  $\ln j(\sqrt{E})$  можно определить порядок электрических полей пятен  $E_{II}$ , а скачок  $\Delta(\ln j)$  имеет порядок разности работ выхода  $\delta\phi = \phi_{\max} - \phi_{\min}$ :  $\Delta(\ln j) = \frac{e\delta\phi}{kT}$  (рис. 2.17). Учитывая,

что вольфрамовый катод с примесью оксидов тория  $\text{ThO}_2$  (0,5 – 1,5 % по весу) после соответствующей термической обработки дает эмиссионные токи в  $10^5$  больше, чем чистый вольфрам. Термическая обработка происходит в три этапа:

1) кратковременное (15 мин) прокаливание при температуре  $T > 2600$  К, при котором происходит восстановление части оксида тория в металлический торий  $\text{ThO}_2 \rightarrow \text{Th} + \text{O}_2$ ;

2) длительное прогревание при температуре  $T \sim 2000 - 2300$  К, при этом происходит диффузия тория к поверхности (активирование катода);

3) снижение температуры до  $T < 1800$  К, когда прекращается диффузия тория.

Атомы тория находятся на поверхности W в виде диполей, так как работа выхода для тория меньше, чем для W. Поэтому валентные электроны атомов тория оказываются затянутыми в решетку вольфрама. Электрическое поле диполей понижает потенциальный барьер, в результате работа выхода для  $W + \text{Th}$  понижается по сравнению с чистым W:

$$\Delta\phi = \phi_W - \phi_{W+\text{Th}} = 4\pi n_d p_d,$$

где  $n_d$  – число диполей на  $1 \text{ см}^2$ , а  $p_d$  – дипольный момент (рис. 2.18). Пусть  $n_1$  – плотность монослоя (максимальная плотность покрытия),  $\theta = \frac{n_d}{n_1}$  – степень покрытия. При  $\theta = 0$

$$j = j_W = A_W T^2 \exp\left(-\frac{e\phi_W}{kT}\right),$$

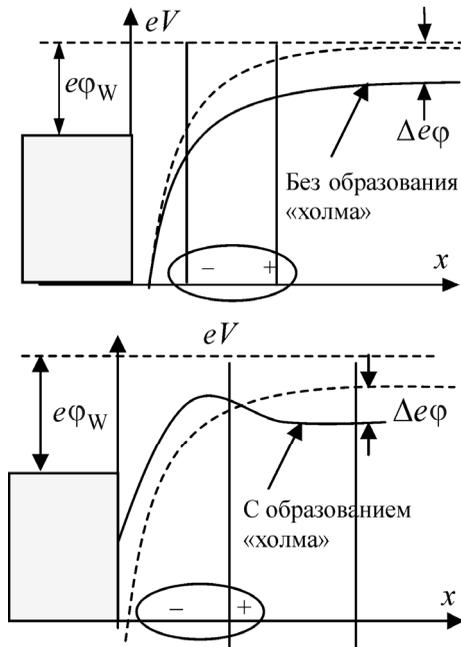


Рис. 2.18. Потенциальная диаграмма для пленочного катода

$$\ln\left(\frac{j_W}{T^2}\right) = \ln A_W - \frac{e\varphi_W}{kT}.$$

При полном покрытии  $\theta = 1$

$$j = j_1 = A_1 T^2 \exp\left(-\frac{e\varphi_1}{kT}\right), \quad \ln\left(\frac{j_1}{T^2}\right) = \ln A_1 - \frac{e\varphi_W}{kT} + \frac{e\Delta\varphi_{\max}}{kT}.$$

При какой-то степени покрытия  $\theta$

$$j = j_\theta = A_\theta T^2 \exp\left(-\frac{e\varphi_\theta}{kT}\right), \quad \ln\left(\frac{j_\theta}{T^2}\right) = \ln A_\theta - \frac{e\varphi_W}{kT} + \frac{e\theta\Delta\varphi_{\max}}{kT}.$$

Полагая  $\ln A_W = \ln A_1 = \ln A_\theta$ , найдем степень покрытия:

$$\theta = \frac{\ln \frac{j_\theta}{T^2} - \ln \frac{j_W}{T^2}}{\ln \frac{j_1}{T^2} - \ln \frac{j_W}{T^2}} = \frac{\ln\left(\frac{j_\theta}{j_W}\right)}{\ln\left(\frac{j_1}{j_W}\right)}. \quad \text{Так, экспериментально по термоэмис-$$

сионному току можно определять степень покрытия. Степень покрытия зависит от двух конкурирующих процессов: диффузии тория к поверхности и испарения с поверхности. Можно определить равновесную степень покрытия (рис. 2.19). Диффузионный ток пропорционален, согласно закону Фика, градиенту концентрации тория в металле:

$$J = -D\nabla n \approx -D(n_S - n_0) = D(n_0 - n_S) \approx Dn_0 \quad (n_0 \gg n_S),$$

где  $n_0$  – плотность атомов тория в объеме;  $n_S$  – плотность атомов

тория на поверхности. Таким образом,  $\left(\frac{dn_S}{dt}\right)_D = D_0 n_0 \exp\left(-\frac{E_d}{kT}\right)$ ,

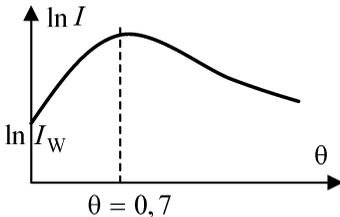


Рис. 2.19. Зависимость тока от степени покрытия

так что график зависимости:

$$\ln\left(\frac{dn_S}{dt}\right)_D = \ln(D_0 n_0) - \frac{E_d}{kT}$$

будет являться «прямой диффузии» (рис. 2.20).

Скорость уменьшения атомов тория на поверхности определяется теплотой испарения  $L_{Th}$ , так что

$$\left(\frac{dn_S}{dt}\right)_V = B_0 \theta \exp\left(-\frac{L_{Th}}{kT}\right), \quad (2.4)$$

где  $B_0 = \text{const}$ , следовательно, график зависимости

$\ln\left(\frac{dn_S}{dt}\right)_V = \ln(B_0 \theta) - \frac{L_{Th}}{kT}$  будет являться «прямой испарения» (рис.

2.20). Пересечение прямой диффузии и прямой испарения определяет равновесную температуру. Для каждой температуры существует своя равновесная концентрация, когда прямая испарения будет пересекать прямую диффузии именно в этой точке, так что

$\left(\frac{dn_S}{dt}\right)_V = \left(\frac{dn_S}{dt}\right)_P$ , т.е.  $n_S = \text{const}$ . И наоборот, для каждой степени

покрытия существует своя равновесная температура, которую можно определить как координату точки пересечения прямых (см. рис. 2.20).

Пленочные катоды могут быть получены не только в результате диффузии атомов примеси на поверхность, но и нанесением пленок на поверхность из газовой фазы.

Щелочные металлы легко отдают свои валентные электроны на обобществление в металле. Если поверхность вольфрама контактирует с парами цезия или бария, то поверхность покрывается атомами щелочного металла. Работа выхода щелочного металла (см. табл. 2.1) существенно меньше работы выхода вольфрама, поэтому катоды W-Cs и W-Ba будут давать существенно больший термоток, чем чистый вольфрам.

Равновесная толщина покрытия определяется приходом на поверхность плотности потока атомов щелочного материала и уходом с поверхности атомов цезия в процессе испарения. Число атомов Cs, падающих на единицу поверхности в единицу времени:

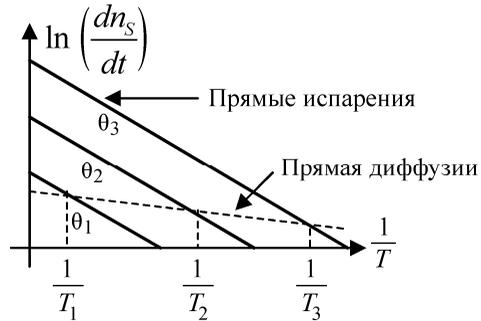


Рис. 2.20. Зависимость равновесной концентрации от температуры

$$j_{Cs} = \frac{1}{4} n_{Cs} \langle v \rangle = \frac{P_{Cs}}{\sqrt{2\pi m k T_{Cs}}},$$

где  $\langle v \rangle = \sqrt{8kT/\pi m}$  – среднеарифметическая скорость атомов цезия;  
 $P_{Cs} = n_{Cs} k T_{Cs}$  – давление паров цезия.

Скорость ухода с поверхности атомов цезия в процессе испарения определяется теплотой испарения  $Q_{Cs} : \frac{dn_s}{dt} = C_0 \theta_{Cs} \exp\left(-\frac{Q_{Cs}}{kT}\right)$ . Приравнивая эти скорости, получим равновесную степень покрытия. Для катодов W-Cs и W-Wa характерна S-образная зависимость термотока от температуры катода (рис. 2.21), которая влияет на толщину покрытия. При низких температурах катод покрыт сравнительно толстым слоем щелочного металла. С ростом температуры катода равновесная степень покрытия будет за счет испарения уменьшаться. Минимальное значение работы выхода достигается при степени покрытия  $\theta_{Cs} = 0,7$ . Так, при адсорбции 0,7 монослоя Cs на W работа выхода  $e\phi_a = 1,45$  эВ, а уже при двух монослоях  $e\phi_a$  соответствует работе выхода адсорбированного элемента (1,81 эВ для Cs). Таким образом, высокоэффективные пленочные катоды в случае использования цезия или бария создаются адсорбцией из паровой фазы, в случае использования тория – термодиффузией атомов из объема вольфрамового катода после специальной термической обработки. Широкое использование торированного вольфрама объясняется еще и тем, что такой материал обладает значительно лучшими механическими свойствами, чем чистый W, который весьма хрупок.

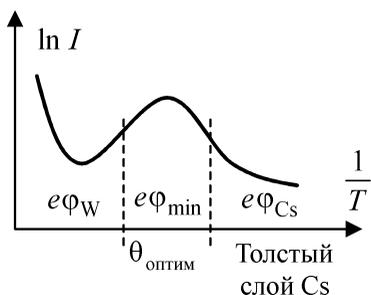


Рис. 2.21. Зависимость равновесной концентрации от температуры

образная зависимость термотока от температуры катода (рис. 2.21), которая влияет на толщину покрытия. При низких температурах катод покрыт сравнительно толстым слоем щелочного металла. С ростом температуры катода равновесная степень покрытия будет за счет испарения уменьшаться. Минимальное значение работы выхода достигается при степени покрытия  $\theta_{Cs} = 0,7$ . Так, при адсорбции 0,7 монослоя Cs на W работа выхода  $e\phi_a = 1,45$  эВ, а уже

при двух монослоях  $e\phi_a$  соответствует работе выхода адсорбированного элемента (1,81 эВ для Cs). Таким образом, высокоэффективные пленочные катоды в случае использования цезия или бария создаются адсорбцией из паровой фазы, в случае использования тория – термодиффузией атомов из объема вольфрамового катода после специальной термической обработки. Широкое использование торированного вольфрама объясняется еще и тем, что такой материал обладает значительно лучшими механическими свойствами, чем чистый W, который весьма хрупок.

## Оксидные катоды

Еще большей эмиссионной способностью при пониженных температурах (рис. 2.22) обладают оксидные катоды, представляющие собой металл (чаще всего W) с нанесенным на него слоем  $\sim 1$  мкм (это уже не одноатомная пленка)

оксида (BaO, SrO, CaO). Оксидный катод чаще всего применяется в бытовой технике, осциллографах, кинескопах, СВЧ-лампах благодаря малой работе выхода (1,2 эВ). Высокая эмиссионная способность оксидов была открыта еще в 1904 г. Долгое время это не находило объяснения. Квантовая теория металла стала складываться только в 1928 – 1930 гг. Фактически оксиды представляют собой диэлектрики, но после активирования (прогрева, при котором кислород уходит, и часть оксидов восстанавливается до металла) слой превращается в полупроводник *n*-типа с очень высокой эмиссионной способностью. Это происходит следующим образом. После прокаливания на поверхности соль карбоната бария разлагается, оставляя на поверхности оксиды:  $BaCO_3 = CO_2 + BaO$ . Получающиеся таким образом оксидные катоды не активированы. Оксидное покрытие является диэлектриком, поэтому обладает плохими термоэмиссионными свойствами. Процесс активации состоит в нагревании до температуры порядка 1200 К. В результате кислород уходит из покрытия, а часть молекул оксида бария восстанавливается до металлического бария, атомы которого находятся внутри кристаллов оксидов. Появление в слое свободного бария сопровождается образованием в решетке BaO пустых кислородных узлов, вблизи которого возможно закрепление электрона на примесном уровне, лежащем чуть ниже зоны проводимости (рис. 2.23). При нагреве электроны с этих примесных уровней переходят в зону проводимости, затем из зоны проводимости в вакуум.

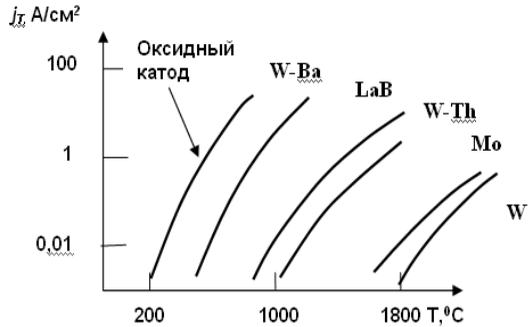


Рис. 2.22. Характеристики термоэмиссионных катодов

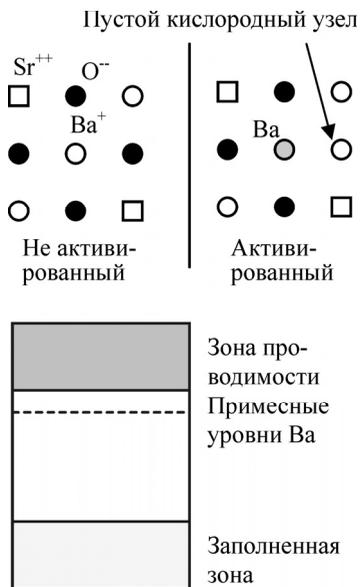


Рис. 2.23. Превращение диэлектрика в примесный полупроводник

племки оксида, испарение и распыление слоя оксида происходит при высоких отбираемых токах за счет перегрева термоэмиссионным током.

Для перехода электрона с примесного уровня в зону проводимости требуется всего 0,2 эВ, что значительно меньше ширины запрещенной зоны (для BaO порядка 4 эВ), которую нужно преодолеть электронам из заполненной зоны. Ширина зоны проводимости оксида бария (потенциальный барьер для перехода электрона в вакуум) составляет примерно 1 эВ, поэтому работа выхода порядка 1,2 эВ. Хотя пустые кислородные узлы при активации образуются около поверхности, но ионы кислорода из толщи покрытия перемещаются в эти свободные узлы, так что происходит распространение примесных атомов бария по всему слою оксида.

Долговечность оксидных катодов ограничена временем жизни

## 2.2. Автоэлектронная (полевая) эмиссия металлов

### 2.2.1. Теория Фаулера – Нордгейма

#### *Прозрачность барьера*

Автоэлектронная (полевая) эмиссия – явление эмиссии электронов с поверхности не нагретого металла в присутствии внешнего электрического поля. В присутствии внешнего электрического поля высокой напряженности  $E$  ( $10^6 \div 10^7$  В/см), помимо увеличения тока эмиссии за счет снижения работы выхода (эффекта Шоттки), из-за ограниченности толщины барьера появляется вероятность подбарьерного перехода – «тунельного» эффекта. Испускание электронов под действием внешнего электрического поля, обусловлен-

ное вероятностью подбарьерного перехода потенциального барьера, имеющего во внешнем электрическом поле ограниченную ширину, называется *автоэлектронной (полевой) эмиссией*.

Если на поверхность раздела двух сред падает электромагнитная волна с энергией  $W_x$  (рис. 2.24), то происходит ее отражение от потенциального барьера. Однако на некоторую глубину она все-таки проникает, затухание волны характеризуется волновой функцией, так в среде 2 она будет иметь вид

$$\Psi_2 = a_2 \exp(ik_2x) = a_2 e^{-kx},$$

где  $k_2 = \frac{2\pi}{h} \sqrt{2m(W_x - W)} = ki$ ,  $k = \frac{2\pi}{h} \sqrt{2m(W - W_x)}$  – волновой вектор. Вероятность нахождения электрона в точке  $x$ :

$$|\Psi_2|^2 = a_2^2 \exp\left(-\frac{4\pi}{h} \sqrt{2m(W - W_x)}x\right).$$

Таким образом, для бесконечного вдоль  $x$  потенциального барьера все электроны в конце концов отразятся от барьера.

Рассмотрим теперь потенциальный барьер конечной ширины. Тогда существует ненулевая вероятность нахождения электрона в среде 3 (рис. 2.25). Относительная плотность электронов в среде 3 определяется вероятностью нахождения электрона на расстоянии  $d$ , т.е. коэффициент прозрачности барьера для прямоугольного барьера ширины  $d$ :

$$D = \exp\left(-\frac{4\pi}{h} d \sqrt{2m(W - W_x)}\right).$$

Для вычисления прозрачности потенциального барьера непрямоугольной формы можно его разделить на ряд прямоугольных

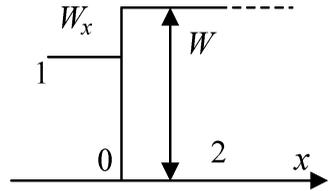


Рис. 2.24. Граница раздела двух сред

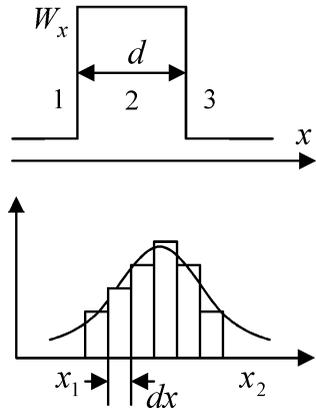


Рис. 2.25. Потенциальный барьер конечной ширины

барьеров ширины  $dx$ , и проинтегрировать по ширине барьера (см. рис. 2.25):

$$D = D_1 D_2 \dots D_k = \exp \left( -\frac{4\pi}{h} \int_{x_1}^{x_2} \sqrt{2m(W - W_x)} dx \right) = \\ = \exp \left( -\frac{2}{h} \int_{x_1}^{x_2} \sqrt{2m(W - W_x)} dx \right).$$

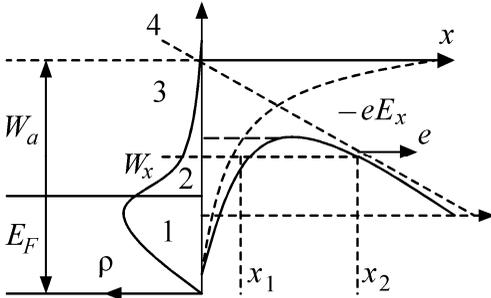


Рис. 2.26. Потенциальный барьер на границе металл – вакуум в присутствии внешнего электрического поля

Рассмотрим туннельный эффект для электронной эмиссии. На рис. 2.26 изображена форма потенциального барьера на границе металл – вакуум в присутствии внешнего электрического поля. Зона 1 в распределении электронов – зона «чистой» автоэлектронной эмиссии, из нее электроны могут выходить только за счет

подбарьерного перехода. Зона 2 – зона автотермоэлектронной эмиссии, из этой зоны электроны, поднявшиеся на более высокий энергетический уровень за счет нагрева металла, проходят сквозь барьер меньшей толщины. Зона 3 – термоэлектронная эмиссия, вызванная эффектом Шоттки. Зона 4 – термоэлектронная эмиссия.

Вычислим прозрачность треугольного барьера (без учета сил электрического изображения). Заменим реальную форму барьера на треугольную (рис. 2.27). В вакууме распределение потенциала  $eV(x) = -eEx$ ,  $x \geq 0$ . Коэффициент прозрачности барьера

$$D = \exp \left( -\frac{2}{h} \int_{x_1}^{x_2} \sqrt{2m(eU(x) - W_x)} dx \right), \text{ где нижняя граница интегрирования } x_1 = 0, \text{ а верхняя определяется из равенства: } W_x = -eEx_2,$$

$x_2 = -\frac{W_x}{eE}$ . Введем обозначения:  $-eEx - W_x = \eta$ ,  $d\eta = -eEdx$ . Вычислим интеграл:

$$\begin{aligned} & \frac{W_x}{eE} \int_0^{\frac{W_x}{eE}} \sqrt{2m(-eEx - W_x)} dx = \\ & = - \int_{-W_x}^0 \sqrt{2m\eta} \frac{d\eta}{eE} = \\ & = \frac{\sqrt{2m}}{eE} \int_{-W_x}^0 \sqrt{\eta} d\eta = \\ & = \frac{2\sqrt{2}\sqrt{m}}{3eE} (-W_x)^{3/2}, \end{aligned}$$

тогда

$$D = \exp\left(-\frac{4\sqrt{2m}}{3\hbar eE} (-W_x)^{3/2}\right).$$

Вычислим прозрачность потенциального барьера с учетом сил электрического изображения (рис. 2.28). В вакууме распределение потенциала  $eU(x) =$

$$= -eEx - \frac{e^2}{4x}, \quad x > 0.$$

Точки  $x_1$  и  $x_2$  находим из равенства  $W_x = -eEx - \frac{e^2}{4x}$ , получим

уравнение  $eEx^2 + W_x x + \frac{e^2}{4} = 0$ , корни которого

$$x_{1,2} = \frac{-W_x \pm W_x \left(1 - \frac{e^3 E}{W_x^2}\right)^{1/2}}{2eE}.$$

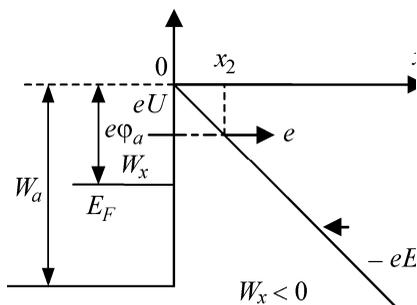


Рис. 2.27. Потенциальный барьер на границе металл – вакуум в присутствии внешнего электрического поля без учета сил электрического изображения

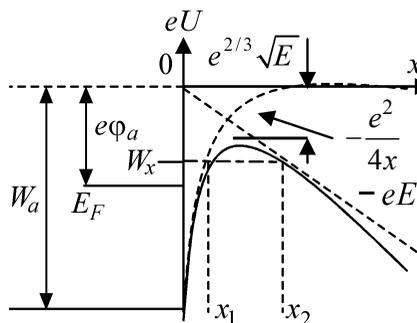


Рис. 2.28. Потенциальный барьер на границе металл – вакуум в присутствии внешнего электрического поля с учетом сил электрического изображения

Учтем, что снижение потенциального барьера за счет эффекта Шоттки  $\Delta(e\varphi_a) = e^{3/2}\sqrt{E}$  много меньше энергии  $W_x$ , т.е.

$e^3 E = (\Delta e\varphi_a)^2 \ll W_x^2$  при  $\Delta\varphi_a \ll \varphi_a$ , тогда в разложении

$$\left(1 - \frac{e^3 E}{W_x^2}\right)^{1/2} \approx 1 - \frac{1}{2} \frac{e^3 E}{W_x^2} + \dots \text{ возьмем только первые два слагаемые:}$$

$$x_1 = \frac{-W_x + W_x - \frac{1}{2} \frac{e^3 E}{W_x}}{2eE} = -\frac{1}{4} \frac{e^2}{W_x},$$

$$x_2 = \frac{-W_x - W_x + \frac{1}{2} \frac{e^3 E}{W_x}}{2eE} = -\frac{W_x}{eE} + \frac{1}{4} \frac{e^2}{W_x}.$$

Для этих пределов интегрирования вычислим интеграл:

$$\begin{aligned} \int_{x_1}^{x_2} \sqrt{-eEx - W_x - \frac{e^2}{4x}} dx &= \int_{x_1}^{x_2} \sqrt{-W_x - \frac{1}{2} \xi e^{3/2} \sqrt{E} - \frac{1}{2} \frac{1}{\xi} e^{3/2} \sqrt{E}} \cdot \frac{1}{2} \sqrt{\frac{e}{E}} d\xi = \\ &= \frac{1}{2} \sqrt{\frac{e}{E}} \int_{\xi_1}^{\xi_2} \sqrt{-W_x - \frac{1}{2} \xi e^{3/2} \sqrt{E} - \frac{1}{2} e^{3/2} \frac{1}{\xi} \sqrt{E}} d\xi = \frac{1}{2} \sqrt{\frac{e}{E}} \sqrt{-W_x} \times \end{aligned}$$

$$\times \int_{\xi_1}^{\xi_2} \sqrt{1 + \frac{1}{2} \xi \frac{e^{3/2} \sqrt{E}}{W_x} + \frac{1}{2} \frac{1}{\xi} \frac{e^{3/2} \sqrt{E}}{W_x}} d\xi = \frac{1}{2} \frac{y}{eE} (-W_x)^{3/2} \int_{\frac{y}{2}}^{\frac{2}{y}} \sqrt{1 - \frac{y}{2} \left( \xi + \frac{1}{\xi} \right)} d\xi.$$

Были введены следующие обозначения:  $x = \frac{1}{2} \xi \sqrt{\frac{e}{E}}$ ,

$y = -\frac{e^{3/2} \sqrt{E}}{W_x}$ . Выражение

$$\theta(y) = \frac{3}{4} y \int_{\frac{y}{2}}^{\frac{2}{y}} \sqrt{1 - \frac{y}{2} \left( \xi + \frac{1}{\xi} \right)} d\xi \quad (2.5)$$

называется функцией Нордгейма. В итоге зависимость коэффициента прозрачности барьера выражается формулой:

$$D = \exp\left(-\frac{4}{3} \frac{\sqrt{2m}}{\hbar e E} \theta(y) (-W_x)^{3/2}\right).$$

### *Плотность тока автоэлектронной эмиссии*

Число электронов, падающих на единицу поверхности в единицу времени и имеющих импульс от  $p_x$  до  $p_x + dp_x$ :

$$v_x = V_x dn_x = \frac{4\pi mkT}{h^3} d\left(\frac{p_x^2}{2m}\right) \ln\left(1 + \exp\left(-\left(\frac{p_x^2}{2m} - E_F\right)/kT\right)\right).$$

Плотность тока автоэлектронной эмиссии:  $j_A = \int_0^\infty e D v_x dE_x$ .

Обозначим  $\varepsilon = \frac{p_x^2}{2m} - E_F = E_x - E_F$ , тогда:

$$\begin{aligned} j_A &= \frac{4\pi mkT}{h^3} \int_0^\infty dE_x D \ln\left(1 + \exp\left(-\frac{E_x - E_F}{kT}\right)\right) = \\ &= \frac{4\pi mkT}{h^3} \int_0^\infty D \ln\left(1 + \exp\left(-\frac{\varepsilon}{kT}\right)\right) d\varepsilon. \end{aligned}$$

При  $\varepsilon < 0$  ток автоэлектронной эмиссии обусловлен только электронами, лежащими ниже уровня Ферми, т.е. будет существовать и при  $T = 0$ . Примем при  $\varepsilon < 0$ :

$$\ln\left(1 + \exp\left(-\frac{\varepsilon}{kT}\right)\right) \approx -\frac{\varepsilon}{kT}.$$

Таким образом, для  $\varepsilon < 0$ :

$$j_{AЭ} = \frac{4\pi mkT e}{h^3} \int_{-\infty}^0 D\left(-\frac{\varepsilon}{kT}\right) d\varepsilon = -\frac{4\pi m e}{h^3} \int_{-\infty}^0 D \varepsilon d\varepsilon$$

(«чистая» автоэлектронная эмиссия).

Относительно переменной  $\varepsilon$  можно выразить прозрачность барьера, для этого учтем, что

$$W_x = E_x - W_a = E_x - E_F + E_F - W_a = -e\varphi_a + \varepsilon,$$

тогда  $D = \exp\left(-\frac{4\sqrt{2m}}{3\hbar eE}\theta(y)(e\varphi_a - \varepsilon)^{3/2}\right)$ . Можно разложить эту функцию по малому параметру  $\varepsilon$ :

$$D = \exp\left(-\frac{4\sqrt{2m}}{3\hbar eE}\theta(y)(e\varphi_a)^{3/2} + A\varepsilon + \dots\right) = D_0 \exp(+A\varepsilon),$$

где  $D_0 = \exp\left(-\frac{4\sqrt{2m}}{3\hbar eE}\theta(y)(e\varphi_a)^{3/2}\right)$  – прозрачность барьера для

электронов на уровне Ферми, коэффициент  $A = -\frac{2\sqrt{2m}}{\hbar eE}(e\varphi_a)^{1/2}$ .

Тогда

$$j_{AЭ} = -\frac{4\pi m e}{h^3} D_0 \int_{-\infty}^0 \exp(A\varepsilon) \varepsilon d\varepsilon.$$

Интеграл

$$\int_{-\infty}^0 \exp(A\varepsilon) \varepsilon d\varepsilon = \frac{1}{A} \exp(A\varepsilon) \varepsilon \Big|_{-\infty}^0 - \frac{1}{A} \int_{-\infty}^0 \exp(A\varepsilon) d\varepsilon = -\frac{1}{A^2}.$$

Тогда

$$j_{AЭ} = \frac{e^3 E^2}{8\pi h (e\varphi_a)} \exp\left(-\frac{4\sqrt{2m}}{3\hbar eE}\theta(y)(e\varphi_a)^{3/2}\right) = C_1 E^2 \exp\left(-\frac{C_2 (e\varphi_a)^{3/2}}{E}\right) -$$

формула Фаулера – Нордгейма. Коэффициенты  $C_1$ ,  $C_2$  можно определить экспериментально, для этого необходимо построить зави-

симость  $\ln\left(\frac{j_{AЭ}}{E^2}\right) = C_1 - \frac{C_2 (e\varphi_a)^{3/2}}{E} = f\left(\frac{1}{E}\right)$ . Функцию Нордгей-

ма можно представить как функцию переменной

$$\zeta = \frac{\Delta\varphi_{ш}}{\varphi_a} = \frac{\Delta\varphi_{ш}}{W_a - W_x} = \frac{e^{3/2} E^{1/2}}{W_a - W_x}.$$

Некоторые значения функции Нордгейма  $\theta(\zeta)$  представлены в табл. 2.2.

Таблица 2.2

## Значения функции Нордгейма

$\Delta\varphi_{ш}/\varphi_a$	$\theta$	$\Delta\varphi_{ш}/\varphi_a$	$\theta$
0	1,0	0,6	0,58
0,1	0,98	0,7	0,45
0,2	0,94	0,8	0,31
0,3	0,87	0,9	0,16
0,4	0,79	1,0	0
0,5	0,69		

Для  $0 < \zeta < 1$   $\theta(\zeta) \approx 0,955 - 1,03\zeta^2$ . Тогда плотность тока автоэлектронной эмиссии можно описать формулой:

$$\begin{aligned}
 j_{\Lambda\Xi} \left[ \frac{\text{А}}{\text{см}^2} \right] &= B_0 \cdot \frac{E^2}{e\varphi_a} \cdot \exp \left( - \frac{(e\varphi_a)^{3/2} \theta(\Delta\varphi_{ш}/\varphi_a)}{E/E_0} \right) = \\
 &= 6,2 \cdot 10^{-6} \cdot \frac{\sqrt{E_F/e\varphi_a} E^2 [\text{В/см}]}{E_F + e\varphi_a} \times \\
 &\times \exp \left( - \frac{6,85 \cdot 10^7 \cdot (e\varphi_a)^{3/2} \theta(\Delta\varphi_{ш}/\varphi_a)}{E [\text{В/см}]} \right),
 \end{aligned}$$

где  $E_F$  – энергия Ферми;  $B_0 = e^2/(8\pi h)$ ,  $E_0 = 8\pi \sqrt{2m_e}/(3he)$ . Влияние множителя  $E^2$ , подобно влиянию множителя  $T^2$  в формуле Ричардсона – Дэшмана, незначительно. Более существенно влияние экспоненциальной зависимости от работы выхода электрона  $e\varphi_a$ .

Автоэлектронная эмиссия становится заметной при  $E \sim 10^6 \frac{\text{В}}{\text{см}}$ .

Если на поверхности катода есть острия с радиусом порядка микрометра, именно автоэлектронная эмиссия с микроскопических острий чаще всего является причиной пробоя вакуумных промежутков. Автоэлектронные катоды специально изготавливаются в виде игл («острый катод»). Преимущество автоэлектронной эмис-

сии состоит в том, что при эмиссии катод не охлаждается, а наоборот, нагревается, так как эмитируются электроны с энергией  $E_x < E_F$  без потерь энергии, и их место занимают электроны с более высоких уровней, они то и разогревают катод.

При автоэлектронной эмиссии за счет «туннельного» эффекта эмитируются электроны, обладающие энергией, меньшей энергии Ферми:  $E < E_F$ . Мощность поверхностного нагрева поверхности за счет прихода более высокоэнергетичных электронов из объема металла:  $w = (j_T/e)(E_F - E)$ . Таким образом, полевая эмиссия сопровождается нагревом поверхности (эффект Ноттингема), в то время как термоэлектронная – охлаждением.

В зависимости от приложенного напряжения и свойств поверхности твердого тела возможны и другие виды электронной эмиссии из твердого тела, происходящие без его облучения электромагнитными квантами или частицами.

Взрывная эмиссия наблюдается при разрушении автоэлектронного острия собственным автоэмиссионным током за счет омического нагрева и эффекта Ноттингена при приложении импульсного поля выше некоторого критического (для вольфрама  $E_{кр} = (6,5 \pm 1) \cdot 10^7$  В/см). Взрыв острия (или микровыступа на плоском катоде) сопровождается образованием плазменного сгустка, быстрый уход из которого электронов приводит к образованию большого положительного объемного заряда. Это дополнительное поле усиливает эмиссионный ток до  $\sim 1000$  А с одного острия ( $j = 10^7 - 10^9$  А/см<sup>2</sup>). Взрывной катод – эрозионный, потери атомов составляют  $\sim 10^{-2}$  на один эмитированный электрон. Однако после взрыва на соседних участках образуются новые удобные для подобного взрыва элементы микрорельефа. Поэтому после нескольких импульсов эмиссионные характеристики такого взрывного катода стабилизируются. Амплитуда прикладываемых импульсов напряжения составляет  $10^4 - 10^7$  В при длительности  $10^{-7} - 10^{-9}$  с.

### 2.2.2. Неметаллические полевые эмиттеры электронов

Плотность извлекаемого тока можно повысить, увеличив скорости электронов в твердом теле. Разогреть электроны, не расплавив кристаллическую решетку, можно в полупроводниках с высокой

подвижностью электронов, например в GaAs. Для этого нужно приложить сильное электрическое поле на такое время, при котором не успевает установиться термодинамическое равновесие между перегретым электронным газом и решеткой. "Горячие" электроны эмитируются, а между включениями поля во избежание перегрева решетка отдает рассеянную в ней мощность окружающей среде. В вакуум могут выйти электроны при условии, что энергия ионизации больше энергии сродства  $\chi$ . Энергия сродства для полупроводника – это минимальная энергия, которую необходимо затратить для вывода в вакуум электрона со дна зоны проводимости (рис. 2.29). В отличие от металла внешнее электрическое поле проникает в полупроводник с меньшей концентрацией свободных носителей на величину радиуса Дебая, что приводит к изгибу зон у поверхности (рис. 2.30). В результате при пересечении дном зоны проводимости уровня Ферми в ней появляются электроны. В итоге в токе полевой эмиссии наряду с электронами валентной зоны ( $j_v$ ) могут участвовать и электроны зоны проводимости ( $j_c$ ).

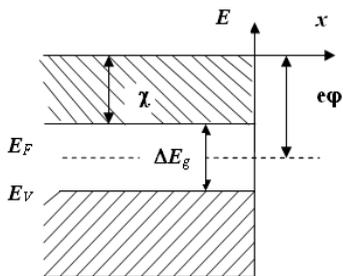


Рис. 2.29. Электронная структура полупроводника:  $E_v$  – граница валентной зоны;  $\Delta E_g$  – ширина щели;  $\chi$  – энергия сродства

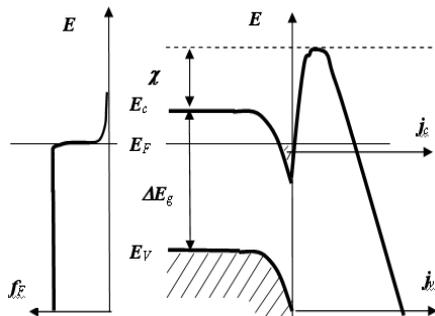


Рис. 2.30. Изменение уровней полупроводника вблизи поверхности при наличии внешнего электрического поля;  $j_c$  – ток электронов из зоны проводимости;  $j_v$  – ток электронов из валентной зоны

В  $p$ - $n$  переходах можно создавать сильное «греющее» поле, прикладывая разность потенциалов в запирающем направлении, а используя  $n$ - $p$ - $n$  переходы можно управлять эмиссионным током.

Плотность тока «горячих» электронов в таких инжекционных катодах может достигать  $100 \text{ А/см}^2$ .

Практически безинерционные катоды можно создать из диспергированных металлических пленок (ДМП) на диэлектрике. При приложении поля  $E > 10^3 \text{ В/см}$  вдоль такой структуры, состоящей из островков металла размерами  $\sim 10 \text{ нм}$  на диэлектрической подложке, протекающий ток разогревает электронный газ в островке и туннелирующие от островка к островку через диэлектрические промежутки электроны становятся все более «горячими» по мере снижения на разность потенциалов между соседними островками барьера. Эмиссия горячих электронов с  $j = 1 - 10 \text{ А/см}^2$  происходит из промежутков между островками.

Реализовать необходимые для полевой эмиссии высокие напряженности электрического поля можно в МДМ (металл-диэлектрик-металл) структурах. Для этого слой диэлектрика должен быть достаточно тонким ( $5 - 20 \text{ нм}$ ), поэтому разность потенциалов на металлических электродах в  $5 - 20 \text{ В}$  создает поля  $\sim 10^7 \text{ В/см}$ . Ширина барьера при этом как в эффекте Шоттки резко уменьшается и электроны из металла попадают в зону проводимости диэлектрика, а затем в металлическую пленку. Эта положительная относительно базового металлического электрода пленка должна быть достаточно тонкой ( $10 - 20 \text{ нм}$ ), что обеспечит прохождение горячих электронов в ней без столкновений. Плотность тока эмиссии МДМ-структур может составлять до  $10 \text{ А/см}^2$ , а зависимость от приложенного напряжения подчиняется закону Фаулера Нордгейма. В качестве эмиссионных МДМ-структур используются  $\text{Al-Al}_2\text{O}_3\text{-Al}$ ,  $\text{Al-Al}_2\text{O}_3\text{-Au}$ ,  $\text{Au-BN-Au}$ ,  $\text{Be-BeO-Au}$  и др.

Следует отметить, что спонтанное образование описанных выше структур возможно в плазменных установках при распылении и пересадке материалов в результате попадания частиц плазмы на обращенные к ней элементы, вследствие того, что в остаточном газе, как правило, всегда присутствует кислород. Так как на границе плазма-стенка всегда присутствует вытягивающее электроны поле, а пристеночная разность потенциалов определяется в том числе эмиссионными свойствами поверхности, то генерация подобных структур может сильно повлиять на взаимодействие плазмы со стенкой.

Эмиссия электронов возможна и из чисто диэлектрических тонких слоев на поверхности металлических электродов (молтеровская эмиссия). Это явление достаточно широко распространено в плазменных установках, когда для электродов используют материалы, легко образующие оксиды (Al и его сплавы, например). Механизм возникновения эмиссии следующий: нанесенный из плазмы на поверхность диэлектрической пленки положительный заряд создает в тонком слое ( $\leq$  мкм) диэлектрика поле  $\sim 10^5$ – $10^6$  В/см, достаточное для ионизации донорных примесей в диэлектрике. Появление в результате этого положительного объемного заряда приводит к перераспределению поля с резким усилением напряженности на границе металла до  $10^7$  В/см, которого, в свою очередь, достаточно для туннелирования электронов из металла в свободную зону диэлектрика. Если на поверхности наступает равновесие между числом электронов, нейтрализующих поверхностный положительный заряд, и числом эмитированных электронов (эмиссия электрона соответствует приходу положительного заряда), то положительный заряд на поверхности поддерживается приходящими из металла электронами и наблюдается молтеровская эмиссия. Она может продолжаться длительное время и после выключения разряда и источника зарядки поверхности из плазмы. Причем длительность такой «спонтанной» эмиссии для пористых диэлектрических слоев, сопровождаемой свечением поверхности (за счет рекомбинации дырок и электронов), может достигать тысячи часов (при плотности тока эмиссии  $\sim 5$  мА/см<sup>2</sup>).

Совершенно удивительно выглядит эмиссия с поверхности заряженных частиц (и нейтральных атомов), казалось бы, без внешних источников воздействия. Однако причины такой, на первый взгляд, спонтанной экзоэмиссии вполне реальны и достаточно многочисленны.

Иногда эмиссия возникает после импульса разрядного тока (послеразрядная эмиссия). Эта эмиссия также связана с наличием на электродах оксидных пленок, в которых под действием сопровождавшего разряд электромагнитного излучения появляется заряд. Токи такой эмиссии очень малы ( $10^{-14}$ – $10^{-18}$  А/см<sup>2</sup>), но протекать они могут на протяжении длительного времени, так, для пористого

оксидного катода токи с плотностью  $\sim 10^{-15}$  А/см<sup>2</sup> наблюдаются даже через неделю после разрядного импульса.

Фазовые переходы на поверхности также могут приводить к экзоэлектронной эмиссии, которая проявляется как спонтанные всплески тока ( $10^{-2}$ – $10^3$  имп/с) при разложении объемных кристаллогидратов, гидроксидов металлов, в момент затвердевания металлов и сплавов и других фазовых превращениях. Эмиссией электронов сопровождаются также реакции, связанные с температурным отжигом дефектов, ранее введенных ионизирующими излучениями, а также механическими воздействиями. В последнем случае эмиссия возникает при сжатии, растяжении или изгибе в основном стекла, графитов, кристаллов оксидов-диэлектриков, кварца, полимеров и композитов. Кроме того, известна и трибоэмиссия, сопровождающая сухое трение материалов.

Экзоэмиссия сопровождает химические реакции на поверхности, например при хемосорбции электроотрицательных молекул (кислорода, галогенов) на щелочных, щелочно-земельных металлах и металлах IV группы с невысокой работой выхода. В этом случае энергия реакции переходит в энергию электронного возбуждения. Механизм основан на процессах оже-девозбуждения при переходе электронов металла на глубоколежащие дырочные состояния адсорбата – уровни сродства  $E_A$  адсорбирующейся молекулы. Интенсивная эмиссия электронов и ионов происходит с металлов (Al, Cu и др., сплавов, включая нержавеющие стали), подвергнутых электрохимической коррозии в кислотах, растворах солей. Гетерогенно-каталитические реакции, протекающие на металлах, оксидах, монокристаллах щелочных галогенидов, также сопровождаются эмиссией электронов и ионов.

Возможным каналом эмиссии заряженных частиц могут служить поры в газонасыщенном материале (пороэлектронная эмиссия). В этом случае поры можно рассматривать как локальные полевые катоды.

## 2.3. Фотоэлектронная эмиссия металлов

### 2.3.1. Законы Столетова и Эйнштейна

В широком смысле *фотоэффект* – возникновение или изменение электронного тока в цепи под действием падающего на один из элементов цепи электромагнитного излучения (света). *Внутренний фотоэффект* проявляется в изменении сопротивления полупроводников за счет возникновения добавочных электронов проводимости. *Внешний фотоэффект* – фотоэлектронная эмиссия, т.е. эмиссия электронов твердым телом под действием падающего на него света. Фотоэффект был открыт Герцем в 1887 г., но особенно он его не заинтересовал, и систематическое изучение фотоэффекта было проведено профессором Московского университета Столетовым с 1888 по 1890 гг. В результате в науке имя Столетова входит в два названия: «закон Столетова» и «эффект Столетова». *Закон Столетова* формулируется так: «количество эмитируемых электронов, т.е. фотоэлектронный ток в режиме насыщения пропорционален плотности потока мощности, падающей на эмиттер (или интенсивности облучения  $J_v$  [Вт/см<sup>2</sup>])  $I_\phi \sim J_v$ ». Эффект Столетова, как оказалось, не имеет прямого отношения к фотоэффекту, но созданная им аппаратура по понижению давления позволила исследовать зависимость величины тока, создаваемого электронами фотоэмиссии, в разрядном промежутке от давления газа и выявить, что с понижением давления разрядный ток сначала возрастает, затем проходит через максимум и начинает убывать (рис. 2.31).

Но это относится к свойствам газового заряда, а не к фотоэмиссии. Вторым законом фотоэмиссии считается *закон Эйнштейна*: «максимальная энергия фотоэлектронов прямо пропорциональна частоте излучения:

$$\frac{mV_{\max}^2}{2} \sim \nu, \text{ и зависит только от интен-}$$

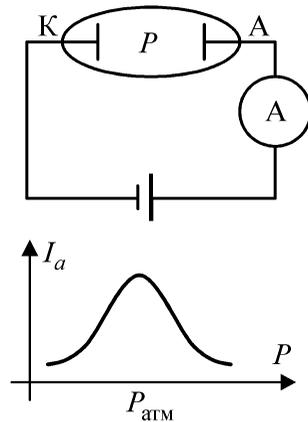


Рис. 2.31. Эффект Столетова

сивности облучения». Эта закономерность была установлена экспериментально Ленардом в 1899 г. Но объяснил это явление Эйнштейн, поэтому и закон называется его именем. Если закон Столетова находил объяснение в рамках классической волновой теории света, то закономерность Ленарда не находила объяснения, поэтому Эйнштейну пришлось ввести в физику понятие о фотонах – квантах света. Действительно, если предположить, что электрон, имеющий энергию  $W$ , может поглотить энергию света только в виде гамма кванта  $h\nu$ , то его энергия идет на преодоление потенциального барьера и на кинетическую энергию электрона:

$$W + h\nu = W_a + \frac{mV^2}{2}. \text{ Наибольшую кинетическую энергию будут}$$

иметь фотоэлектроны, которые имели в металле наибольшую энергию. При температуре металла  $T = 0$  максимальная энергия электронов в металле равна энергии Ферми  $E_F$ . Тогда:

$$\frac{mV_{\max}^2}{2} = h\nu - e\varphi_a. \text{ Это и есть формулировка закона Эйнштейна. Из}$$

этого закона вытекает понятие граничной частоты – минимальной частоты излучения, вызывающей фотоэмиссию:  $\nu_{\min} = \nu_0 = \frac{e\varphi_a}{h}$ ,

для фотоэффекта необходимо облучать поверхность металла волнами с частотой  $\nu > \nu_0$ . Или, иначе, говорят о наличии длинноволновой (*красной*) границы  $\lambda_0$  области спектра излучения, вызывающего фотоэффект:  $\lambda < \lambda_0$ ,

$$\left[ \overset{\circ}{\text{A}} \right] \lambda_0 = \frac{12300}{e\varphi_a [\text{эВ}]}. \text{ Хотя условие}$$

$\lambda < \lambda_0$  получено для  $T = 0$ , оно верно и для комнатных температур, так как количество электронов, имеющих энергию больше  $E_F$ , при комнатной температуре очень мало.

Кроме этих двух законов позднее экспериментально были обнаружены еще некоторые закономерности, например:

- безинерционность фотоэффекта – фототок появляется и исчезает с освещением практически мгновенно, время задержки меньше  $10^{-9}$  с;

- «неутомляемость» металла по отношению к фотоэмиссии;

• «избирательность» фотоэффекта – при возрастании  $\nu$  фото-чувствительность проходит через максимум.

Для описания последней закономерности требуется ввести некоторые определения.

*Спектральной характеристикой* фотокатода называется зависимость фототока от  $\lambda$ :  $I_\phi(\lambda)$ . *Фотоэлектронная чувствительность* – отношение фототока к потоку излучения:

$$\frac{I_\phi(\lambda)}{J_\nu} \left[ \frac{\text{Кл}}{\text{Дж}} \right] \quad \text{или} \quad \left[ \frac{\text{А}}{\text{Вт}} \right].$$

*Спектральная чувствительность*:  $\eta_\lambda = \frac{\Delta I_\phi}{\Delta J_\nu} \left[ \frac{\text{А}}{\text{Вт}} \right]$  служит для

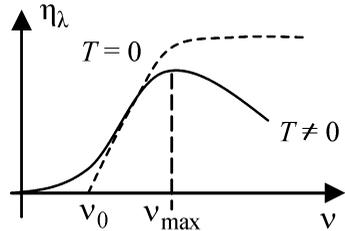


Рис. 2.32. Спектральная чувствительность

определения диапазона частот, в котором фотоэффект максимален (рис. 2.32). При  $T = 0$  К фотоэффект начинается при  $\nu > \nu_0$  и должен выходить на стационар, когда энергия гамма-квантов превысит потенциальный барьер  $W_a$ . При  $T > 0$  резкой красной границы не существует, что объясняется распределением электронов внутри металла. Около красной границы рост тока приближенно можно описать квадратичной зависимостью  $I_\phi \approx (\nu - \nu_0)^2$ , что физически объясняется расширением интервала энергий электронов металла, которые после поглощения энергии гамма-кванта могут выйти из металла. Спад спектральной чувствительности при  $\nu > \nu_{\max}$  объясняется снижением вероятности поглощения гамма-квантов. Для характеристики фоточувствительности иногда используют понятие

*квантового выхода* фотокатода  $Y = \frac{n_e}{n_\gamma} = \frac{I_\phi / e}{I_\gamma / n_\gamma}$  – число электро-

нов на один гамма-квант  $\left[ \frac{\text{электронов}}{\text{квант}} \right]$ , для чистых металлов кван-

товый выход для видимой части спектра  $\sim 10^{-3} \frac{\text{электронов}}{\text{квант}}$ . Наи-

более принципиальным из рассмотренных закономерностей фото-

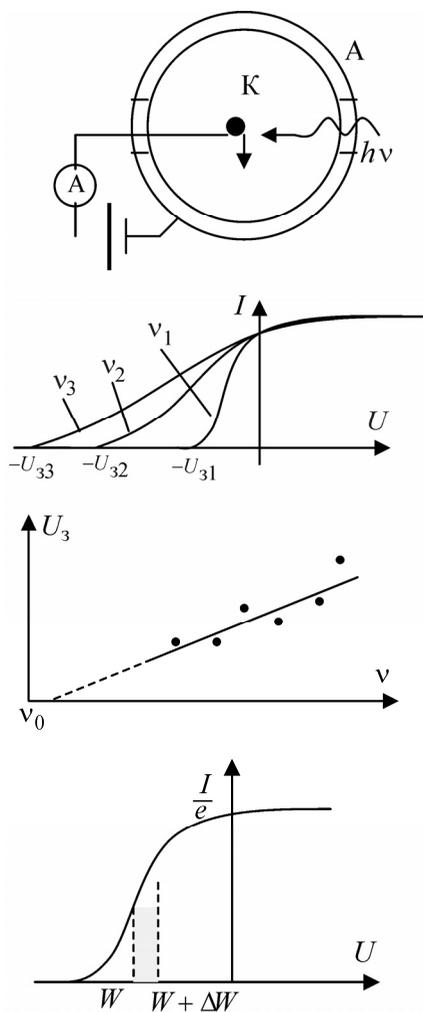


Рис. 2.33. Определение граничной частоты фотоэффекта

эффекта является закон Эйнштейна, поэтому именно он проверялся наиболее тщательно. Глубина выхода электронов из металлов составляет несколько атомных слоев, поэтому, теряя на своем пути часть энергии, фотоэлектроны на выходе из металлов имеют некоторое распределение по энергиям от нуля до максимального значения, определяемого по закону Эйнштейна. Распределение фотоэлектронов по энергиям можно определить экспериментально методом задерживающего потенциала. Для сбора на анод всех фотоэлектронов в опытах Лукирского и Прелижаева использовались катод в виде шара и анод в виде концентрической катоду сферы, через узкое отверстие которой на катод подавался луч света (рис. 2.33). На анод будут приходить только электроны, начальная энергия которых больше этого потенциального барьера задерживающего по-

тенциала:  $\frac{mV_0^2}{2} \geq -eU$ . Прежде

де всего, метод задерживающего потенциала можно использовать для определения красной границы фотоэффекта. Задерживающий потенциал, при котором фототок становится равным нулю, определяется из соотношения  $eU_3 = h\nu - e\phi_a$ , т.е. через разность между частотой гамма-кванта  $\nu$

и граничной частотой фотоэффекта  $\nu_0$  для данного материала:  $U_3 = h(\nu - \nu_0)/e$ . Таким образом, согласно закону Эйнштейна, значения  $U_3$ , определяемые для разных частот облучения  $\nu$ , должны лежать на прямой, что и было подтверждено экспериментально. Точка пересечения экспериментальной прямой  $U_3(\nu)$  с осью абсцисс дает граничную частоту  $\nu_0$ . Разность значений тока при двух задерживающих потенциалах  $U$  и  $(U + \Delta U)$  дает число фотоэлектронов, энергия которых при вылете с катода лежит в пределах от  $-eU$  до  $-e(U + \Delta U)$  (рис. 2.34). Таким образом, экспериментально определяется распределение электронов по энергиям.

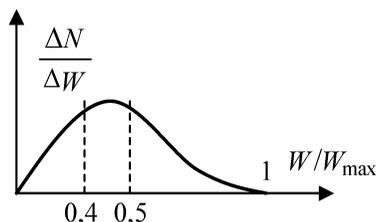


Рис. 2.34. Определение распределения фотоэлектронов по энергиям

### 2.3.2. Теория Фаулера

Основные закономерности фотоэлектронной эмиссии металлов хорошо описываются теорией Фаулера, согласно которой после поглощения в металле фотона его энергия переходит электронам проводимости, в результате чего электронный газ в металле около его поверхности состоит из смеси газов с нормальным (распределением Ферми) и возбужденным (сдвинутым на  $h\nu$ ) распределениями по энергиям (рис. 2.35).

Для подсчета числа фотоэлектронов можно провести такое же интегрирование функции распределения, что и при подсчете плотности тока термоэмиссии, изменив нижний предел интегрирования с  $W_a$  на  $W_a - h\nu$ , тем

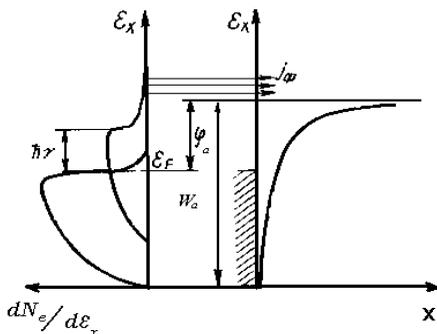


Рис. 2.35. Фотоэмиссионный ток электронов из «хвоста» возмущенной функции распределения, преодолевая потенциальный барьер

самым, включив в интегрирование электроны, которые приобретают недостающую для преодоления потенциального барьера энергию за счет поглощенных квантов. Так же, как и для термоэлектронов, необходимо учитывать вероятность прохождения барьера, так как часть электронов при движении из металла может быть отражена от поверхности раздела металл – вакуум. Кроме этого, необходимо учесть вероятность поглощения фотона. Эта вероятность в общем случае зависит от энергии поглощающего электрона и энергии гамма-кванта. В теории Фаулера эта вероятность считается постоянной величиной, что, как оказалось, в интервале частот от  $\nu_{гр}$  до  $1,5\nu_{гр}$  выполняется.

До облучения число электронов, падающих изнутри на поверхность в 1 с на  $1 \text{ см}^2$ , имеющих энергии от  $E_x$  до  $E_x + dE_x$ :

$$\begin{aligned} d\nu_x &= \frac{4\pi mkT}{h^3} \ln\left(1 + \exp\left(-\frac{E_x - E_F}{kT}\right)\right) dE_x = \\ &= \frac{4\pi mkT}{h^3} \ln\left(1 + \exp\left(\frac{E_F - E_x}{kT}\right)\right) dE_x, \end{aligned}$$

плотность фототока

$$j_\Phi = \alpha e \int_{W_a - h\nu}^{\infty} d\nu_x = \alpha \frac{4\pi me kT}{h^3} \int_{W_a - h\nu}^{\infty} \ln\left(1 + \exp\left(\frac{E_F - E_x}{kT}\right)\right) dE_x,$$

где  $\alpha \approx \text{const}$  (учитывает вероятность поглощения гамма-кванта; вообще-то этот коэффициент должен зависеть от  $\nu$ , но для частот  $\nu = \nu_0 \div 1,5\nu_0$   $\alpha \approx \text{const}$ ), нижний предел интегрирования  $W_a - h\nu$  учитывает поглощение  $h\nu$  (из металла выходят электроны с энергией  $W_x \geq W_a - h\nu$ ). Фаулер предположил, что прозрачность барьера  $D = 1$  (на самом деле действительно  $D \approx 1$ ). Ранее при выводе плотности тока термоэлектронной эмиссии (2.1), когда нижний предел был равен  $W_a$ , было использована малость экспоненты  $\exp\left(\frac{E_F - W_a}{kT}\right) = \exp\left(-\frac{e\varphi_a}{kT}\right) \ll 1$ . Теперь же при  $E_x = W_a - h\nu$  для

$\nu \approx \nu_0$   $h\nu \sim e\varphi_a$ , экспонента  $\exp\left(\frac{E_F - W_a + h\nu}{kT}\right) = \exp\left(-\frac{e\varphi_a - h\nu}{kT}\right)$

не является малой величиной. Сделаем обозначения:  $\frac{E_F - E_x}{kT} = y$ ,

$$\frac{E_F - (W_a - hv)}{kT} = y_0, \quad e^y = z, \quad e^{y_0} = z_0, \quad \text{тогда } dE_x = -kTdy = -kT \frac{dz}{z}.$$

Тогда плотность фототока:  $j_\Phi = \alpha e \frac{4\pi m k^2 T^2}{h^3} \int_0^{z_0} \ln(1+z) \frac{dz}{z}$ . Этот ин-

теграл – табличный, его можно разложить в ряд.

При  $z_0 < 1$ :

$$\ln(1+z) = z - \frac{z^2}{2} + \frac{z^3}{3} - \frac{z^4}{4} + \dots,$$

тогда 
$$\int_0^{z_0} \frac{\ln(1+z) dz}{z} = \frac{z_0}{1^2} - \frac{z_0^2}{2^2} + \frac{z_0^3}{3^2} - \dots.$$

При  $z_0 = 1$  
$$\int_0^1 \frac{\ln(1+z) dz}{z} = \frac{\pi^2}{12}.$$

При  $z_0 > 1$  
$$\int_0^{z_0} \frac{\ln(1+z) dz}{z} = \frac{\pi^2}{12} + \frac{1}{2}(\ln z_0)^2 - \frac{z_0^{-1}}{1^2} + \frac{z_0^{-2}}{2^2} - \dots;$$

Таким образом, при  $z_0 \leq 1$   $y_0 \leq 0$  (т.е.  $hv \leq W_a - E_F = e\varphi_a$ ):

$$j_\Phi = \alpha e \frac{4\pi m k^2 T^2}{h^3} \left[ e^{y_0} - \frac{e^{2y_0}}{2^2} + \frac{e^{3y_0}}{3^2} - \dots \right].$$

При  $T \rightarrow 0$   $y_0 \rightarrow -\infty$  и  $j_\Phi \rightarrow 0$ , то есть существует красная граница. При  $z_0 \geq 1$  (т.е.  $hv \geq e\varphi_a$ ) разбиваем интеграл на два:

$$\begin{aligned} j_\Phi &= \alpha e \frac{4\pi m k^2 T^2}{h^3} \left( \int_0^1 \frac{\ln(1+z) dz}{z} + \int_1^{z_0} \frac{\ln(1+z) dz}{z} \right) = \\ &= \alpha e \frac{4\pi m k^2 T^2}{h^3} \left( \frac{y_0^2}{2} + \frac{\pi^2}{6} - \left( e^{-y_0} - \frac{e^{-2y_0}}{2^2} + \frac{e^{-3y_0}}{3^2} - \dots \right) \right) = \alpha A T^2 \xi(y_0), \end{aligned}$$

где  $A = \frac{4\pi m e k^2}{h^3} = 120 \frac{\text{А}}{\text{см}^2 \text{град}^2}$  – универсальная постоянная Ричардсона. При  $T \rightarrow 0$  и  $hv \geq e\varphi_a$   $y_0 \rightarrow +\infty$ , тогда все слагаемые по сравнению с первым малы, и

$$j_{\Phi} = \alpha A T^2 \frac{y_0^2}{2} = \frac{\alpha A T^2}{2} \left( \frac{h\nu - e\varphi_a}{kT} \right) = \frac{\alpha A}{2k^2} (h\nu - e\varphi_a)^2.$$

При  $T = 0$  и  $h\nu = e\varphi_a$   $j_{\Phi} = 0$  – по-прежнему существует красная граница. Таким образом, плотность фототока определяется по формуле Фаулера:

$$j_{\Phi} = \begin{cases} B_1 T^2 \exp\left(\frac{h\nu - h\nu_0}{kT}\right), & \nu \leq \nu_0 = e\varphi_a/h; \\ B_2 T^2 \left( \frac{(h\nu - h\nu_0)^2}{k^2 T^2} + B_3 \right), & \nu > \nu_0, \end{cases} \quad (2.6)$$

где  $B_1, B_2, B_3$  – постоянные коэффициенты, пропорциональные  $A$ . Из формулы Фаулера видно, что при  $T \approx 0$   $j_{\Phi} \rightarrow 0$  и  $\nu_0$  действительно является красной границей. При  $T \neq 0$  не существует резкой границы фотоэффекта, фототок падает экспоненциально при  $\nu < \nu_0$ , при  $\nu > \nu_0$  плотность фототока пропорциональна квадрату частоты падающего излучения:  $j_{\Phi} \sim \nu^2$ . На основании теории Фаулера основан наиболее точный метод измерения граничной частоты  $\nu_0$ , т.е. работы выхода. Рассмотрим функцию

$$f = \ln\left(\frac{j_{\Phi}}{T^2}\right) = B + F(\psi - \psi_0),$$

где  $\psi = \frac{h\nu}{kT}$ ,  $\psi_0 = \frac{h\nu_0}{kT}$ . Это будет экспериментальная кривая (рис. 2.36). Данная

кривая отличается от теоретической кривой *функции Фаулера*  $F = F(h\nu/kT)$  сдвигом по оси  $y$  на константу  $B$  и по оси  $x$  на  $\psi_0 = h\nu_0/kT$  (см. рис. 2.36). Именно определение сдвига по оси  $x$  экспериментальной кривой для ее совмещения с теоретической кривой Фаулера позволяет найти граничную частоту  $\nu_0$ .

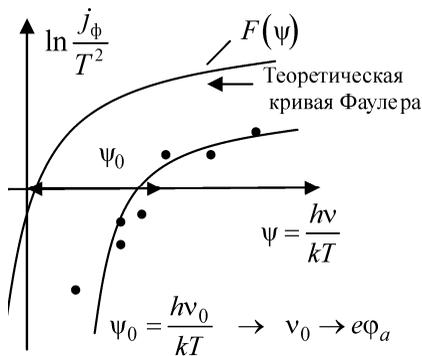


Рис. 2.36. Определение граничной частоты фотоэффекта методом Фаулера

Основоположителем квантово-механической теории фотоэмиссии является советский физик Тамм. Квантово-механическая теория должна была описать вероятность поглощения свободной энергии кванта, учитывая, что электрон, исходя из закона сохранения энергии и импульса, не может поглотить фотон целиком, для поглощения ему нужно третье тело, с которым связан электрон. В качестве такой связи Тамм рассмотрел электрон в поле кристаллической решетки и в поле поверхностного слоя. Соответственно, разделил фотоэмиссию на объемную и поверхностную, которая происходит в слое  $10^{-7}$  см. Расчет показал, что основную роль играет поверхностная фотоэмиссия, несмотря на то, что поглощение света в этом поверхностном слое крайне мало. Эксперименты подтверждали, что фотоэмиссия идет с небольшой глубины вблизи поверхности.

Когда исследовали зависимость фототока от толщины пленки металла, то фототок перестал зависеть от толщины, начиная с 10 – 15 атомных слоев, в то время как свет проникает на глубину более 100 атомных слоев.

### 2.3.3. Фотоэлектронная эмиссия полупроводников и диэлектриков

#### *Внешний фотоэффект*

Если у металлов есть только внешний фотоэффект, то для полупроводников – внешний и внутренний. Внутренний заключается в изменении проводимости полупроводника под действием электромагнитного облучения. Зонная теория для полупроводников дает следующую картину энергетических зон для беспримесных полупроводников, когда некоторые электроны попадают в зону проводимости. Известно, что проводимость полупроводника повышается при нагреве (в отличие от металлов) за счет того, что некоторые электроны переходят в зону проводимости. Под действием света за счет поглощения гамма-кванта электроны также из заполненной зоны могут переходить в зону проводимости, при этом в заполненной зоне остается «дырка» (рис. 2.37). При этом увеличивается проводимость и электронная, и «дырочная». Ширина запретной

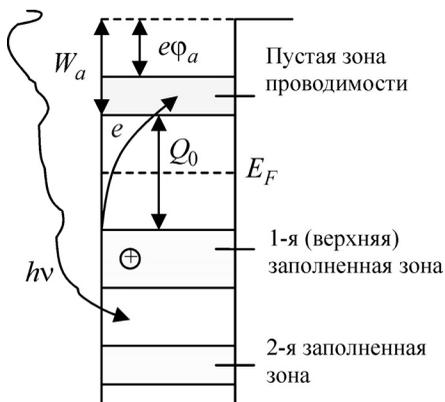


Рис. 2.37. Энергетические зоны для беспримесных полупроводников

зоны различается для разных материалов, например, для кремния  $Q_0 = 1,1$  эВ, для германия  $Q_0 = 0,68$  эВ.

Наибольшая ширина для алмаза:  $Q_0 = 5,6$  эВ, поэтому для него внутренний фотоэффект практически не проявляется. Наиболее чувствительны к облучению примесные полупроводники (рис. 2.38). Если в кристалл кремния (или германия) добавить немного трехвалентного

бора или пятивалентного фосфора, то получится примесный полупроводник. В первом случае атом бора, находясь в кристаллической решетке четырехвалентного кремния, имеет недостаток в одном электроне и создает дырку, на переход к нему электрона соседа, т.е. перемещение дырки, требуется всего-то 0,08 эВ. Такой примесный атом называется *акцептором*, его разрешенный уровень находится чуть выше верхней заполненной зоны для энергетической схемы.

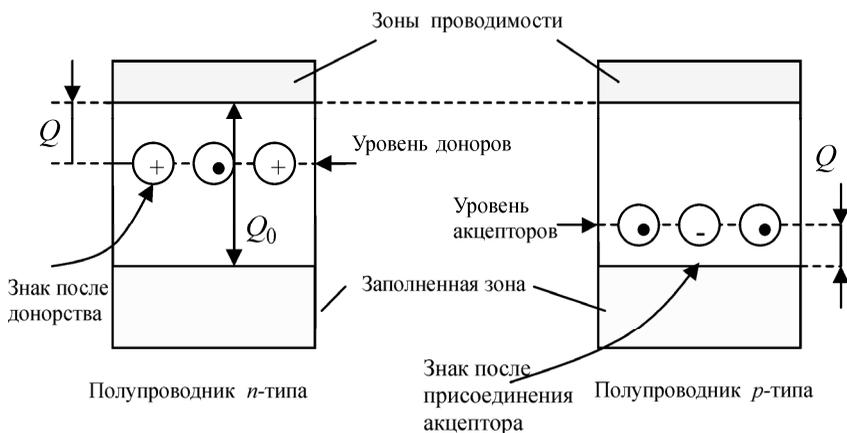


Рис. 2.38. Энергетические зоны для примесных полупроводников

Пятивалентный атом фосфора, помещенный в кристалл кремния, имеет пятый валентный электрон, который не находит связи, и на его отрыв в зону проводимости требуется всего 0,06 эВ (хотя ионизационный потенциал свободного атома фосфора  $\sim 11$  эВ). Такой атом, дающий электрон в зону проводимости, называется *донором*, энергетический уровень пятого электрона находится на 0,06 эВ ниже дна зоны проводимости. Столь малая энергия, необходимая для отрыва электрона от примесного атома,  $Q = 0,06$  эВ, объясняется тем, что атом-донор находится не в вакууме, а в среде с диэлектрической постоянной  $\epsilon$  ( $\epsilon = 11,7$  для Si). Поэтому сила, связывающая электрон с атомом, будет в  $\epsilon$  раз меньше, орбита в  $\epsilon^2$  раз больше, работа отрыва в  $\epsilon^2$  раз меньше. Пропорциональность  $Q \sim \epsilon^{-2}$  подтверждается на опыте.

### Внешний фотоэффект

Для беспримесных полупроводников фотоэмиссия будет происходить при выполнении условия:  $h\nu \geq e\varphi_a + Q_0$ . Поэтому граничная частота  $\nu_0 = \frac{e\varphi_a + Q_0}{h}$ . Более чувствительны к облучению полупроводники *n*-типа (донорные), для них граничная частота  $\nu_0 = \frac{e\varphi_a + Q}{h}$  (для *p*-типа  $\nu_0 = \frac{e\varphi_a + Q_0}{h}$ , так как барьер остается  $Q_0$ ). ВАХ примесного полупроводника *n*-типа при определении распределения энергии фотоэлектронов методом задерживающего потенциала может иметь ступенчатый характер (рис. 2.39):

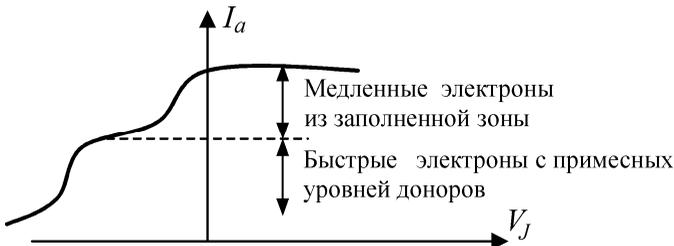


Рис. 2.39. ВАХ примесного полупроводника *n*-типа

### 2.3.4. Эффективные фотокатоды

Чистые металлы, как правило, не применяются в качестве фотокатодов, так как красная граница из-за большой работы выхода лежит в ультрафиолетовой области. У металлов есть преимущество только в том, что нет «фотостарения», т.е. фоточувствительность не уменьшается со временем использования. Поэтому это свойство является решающим, например, для фотокатодов электронных умножителей. Щелочные металлы обладают чувствительностью к электромагнитному излучению в видимом диапазоне длин волн, но их квантовый выход крайне мал ( $\sim 10^{-3}$  электрон/фотон). Поэтому щелочные металлы, в частности цезий, используют в многослойных фотокатодах с применением полупроводников.

Полупроводники благодаря малой работе выхода имеют красную границу именно в инфракрасной области, поэтому охватывают весь видимый спектр света. Да и квантовый выход у них больше, чем у металлов, потому что при движении к поверхности фотозлектрон полупроводника теряет мало энергии по сравнению ме-

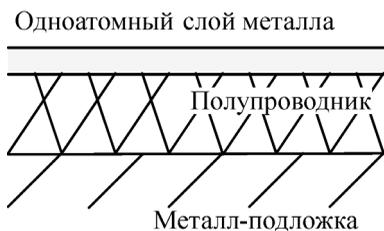


Рис. 2.40. Структура фотокатода

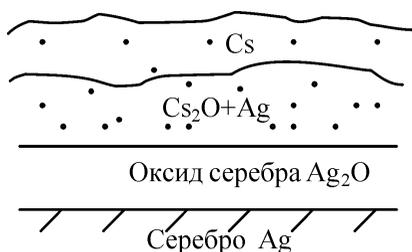


Рис. 2.41. Структура кислородно-цезиевого фотокатода

таллами, так как мала концентрация электронов проводимости, на взаимодействие с которыми главным образом теряется энергия. Причем наибольший квантовый выход следует ожидать для полупроводников, у которых фотозэлектроны выходят из заполненной зоны, так как их там гораздо больше, чем на примесных уровнях. Для снижения работы выхода применяют одноатомный слой щелочного металла. Общая структура фотокатода изображена на рис. 2.40.

Наиболее распространенным в настоящее время является кислородно-цезиевый

катод (рис. 2.41). Серебряная пластина окисляется и оксид серебра является полупроводником. На него напыляется Cs, который забирает кислород у серебра, и свободные атомы серебра выступают как примесь. Атомы Cs окисляются в полупроводнике до  $Cs_2O$  и тоже выступают как примесь.

Таким способом получается кислородно-цезиевый фотоэммиттер с низкой работой выхода (0,9 эВ) и с высоким квантовым выходом (0,02 электрон/фотон в области его максимальной чувствительности рис. 2.42).

Большим недостатком щелочных фотокатодов является их «утомление» или «старение», которое выражается в снижении фоточувствительности при длительном освещении. Чаще всего это объясняют тем, что атомы Cs ионизируются и под действием электрического поля увлекаются в толщину полупроводника, что увеличивает работу выхода. Но существует точка зрения, что утомление фотокатодов связано с изменением равновесного состояния примесей вследствие взаимодействия катода с окружающей средой. Этот вопрос требует дальнейшего изучения.

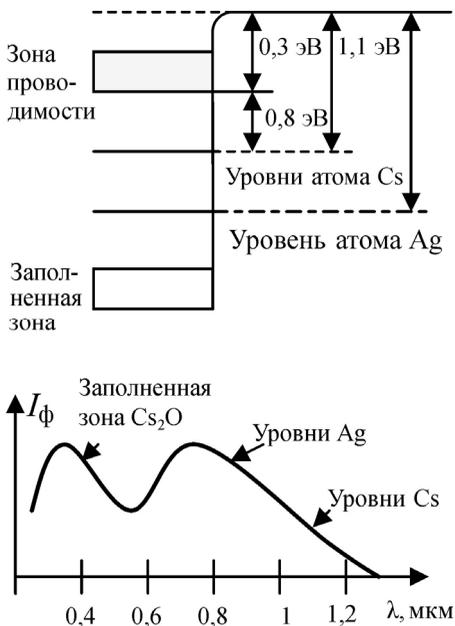


Рис. 2.42. Спектральная характеристика кислородно-цезиевого фотокатода

## 2.4. Вторичная электронная эмиссия и методы ее исследования

### 2.4.1. Коэффициенты вторичной электрон-электронной эмиссии

Эмиссия электронов с поверхности твердого тела, бомбардируемой потоком электронов, называется *вторичной электрон-электронной эмиссией*. Вторичная электрон-электронная эмиссия была обнаружена Остином и Штарке в 1902 г. Наиболее распространенная схема экспериментального исследования энергетического распределения вторичных электронов методом задерживающего поля с использованием сферического коллектора Лукирского и Прелижаева показана на рис. 2.43. Задерживающее поле прикладывается между мишенью и коллектором. Если потенциал коллектора будет больше, чем на мишени, то на коллектор придет полный ток вторичной электрон-электронной эмиссии  $I_{ee}$ . Вторичная электрон-электронная эмиссия характеризуется количеством вторичных электронов на одну первичную частицу:  $\sigma_e = N_{ee}/N_p$ . Интегрально это количество равно отношению токов вторичных и первичных электронов  $I_{ee}/I_p$ . Распространенным методом определения скоростей вторичных электронов является использование магнитного энергоанализатора с полукруговой траекторией радиусом  $R = V \frac{mc}{eH}$  (рис. 2.44), т.е.

через щель пройдут электроны, скорость которых равна  $V = R \frac{eH}{mc}$ .

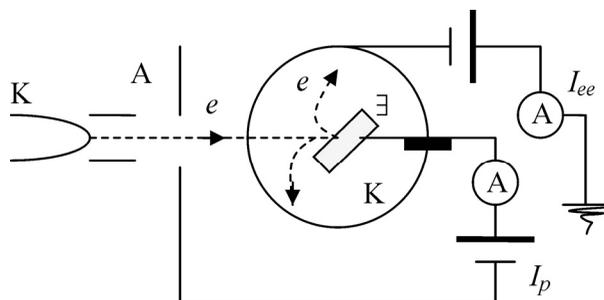


Рис. 2.43. Схема опыта по исследованию вторичной электрон-электронной эмиссии в опытах Лукирского и Прелижаева

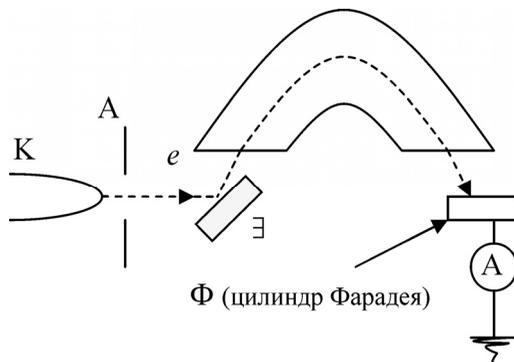


Рис. 2.44. Схема опыта по исследованию вторичной электрон-электронной эмиссии с использованием магнитного энергоанализатора

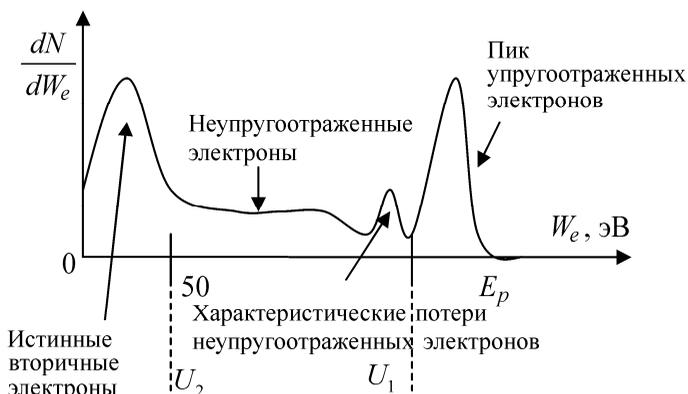


Рис. 2.45. Распределение вторичных электронов по энергиям

Полученное экспериментальное энергетическое распределение (рис. 2.45) независимо от материала и энергии первичных электронов содержит два высоких максимума. Первый в области малых энергий ( $< 50$  эВ) соответствует истинным вторичным электронам, которые выходят из твердого тела за счет поглощения энергии первичных электронов. Далеко не все электроны, получившие дополнительную энергию, добираются до поверхности, растрчивая энергию по пути на взаимодействие с ионами решетки и другими электронами. Преодолевшие потенциальный барьер истинные вторичные электроны на выходе имеют энергии, не зависящие от

энергии первичных электронов. Работа выхода материала также не оказывает существенного влияния на эмиссию вторичных электронов, так как, во-первых, энергия первичных электронов, как правило, гораздо больше работы выхода, во-вторых, эмиссия происходит не из поверхностных слоев, а из глубины металла, поэтому более важным является потеря энергии при движении электрона к поверхности. Второй, гораздо более узкий максимум находится в области высоких энергий и соответствует упругоотраженным первичным электронам, практически полностью сохранившим свою скорость после отражения. Положение этого максимума соответствует энергии первичных электронов. Область энергий между этими двумя максимумами соответствует неупругоотраженным вторичным электронам. Таким образом, энергетический спектр вторичных электронов состоит из широкого пика в области низких энергий, который принадлежит истинно-вторичным электронам, выходящим с глубины  $5 - 100 \text{ \AA}$  от поверхности, и очень узкого пика отраженных от поверхности электронов в области высоких энергий с максимумом при энергии, равной энергии первичных электронов.

Для характеристики истинной электрон-электронной эмиссии вводят коэффициент вторичной электронной эмиссии  $\gamma_{ee} = N_s/N_p$ , где  $N_s$  – число истинных вторичных электронов;  $N_p$  – число первичных электронов, падающих на поверхность в единицу времени. Для характеристики эмиссии отраженных от поверхности первичных электронов используется коэффициент отражения  $\eta_e = (N_e + N_u)/N_p$ , где  $N_e$  и  $N_u$  – упруго- и неупруго-отраженные электроны. Полный коэффициент вторичной электронной эмиссии:

$$\sigma_e = \frac{I_{ee}}{I_p} = \gamma_{ee} + \eta_{ee} + \eta_{ne} = \gamma_{ee} + \eta_e.$$

Коэффициент отражения вторичных электронов экспериментально можно определить, подавая на коллектор задерживающий потенциал, равный  $U_3 = -U_1$ , где  $U_1$  – граница в энергетическом распределении для упругоотраженных (см. рис. 2.45):  $\eta_{ee} = \frac{I_1(U_3 = -U_1)}{I_p}$ . Коэффициент неупругоотраженных электронов можно определить из соотношения:

$$\eta_{ne} = \frac{I_2(U_3 = -U_2) - I_1(U_3 = -U_1)}{I_p}$$

Коэффициент истинных вторичных электронов:

$$\gamma_{ee} = \frac{I_{ee} - I_2(U_3 = -U_2)}{I_p}$$

### 2.4.2. Зависимость коэффициента истинной вторичной электронной эмиссии от энергии первичных электронов

Будем считать, что при движении внутри кристалла первичные электроны расходуют свою энергию главным образом на возбуждение и ионизацию атомов. Сечения возбуждения и ионизации электронным ударом свободного атома нелинейны, имеют максимум для некоторой энергии и спад при больших энергиях, обусловленный тем, что с увеличением энергии уменьшается время взаимодействия (рис. 2.46). Энергия первичных электронов, вызывающих вторичную электронную эмиссию, много больше энергии ионизации, поэтому можно считать, что потери энергии первичных электронов обратно пропорциональны энергии:

$$\frac{d\bar{E}_p}{dx} = -\frac{C}{\bar{E}_p^n} \quad (\llcorner\llcorner \text{ означает безразмерную величину}).$$

Число вторичных электронов на глубине  $x$  пропорционально потерям энергии (рис. 2.47):

$$N(x, E_p) = -\frac{dE_p}{dx} \frac{1}{\epsilon}, \quad \text{где } \epsilon = \left( -\frac{dE_p}{dx} \right)_{N=1}$$

средняя энергия, приходящаяся на создание одного электрона. Возникшие на глубине  $x$  вторичные электроны для выхода из металла должны добраться до поверхности, взаимодействуя (сталкиваясь) со свободными

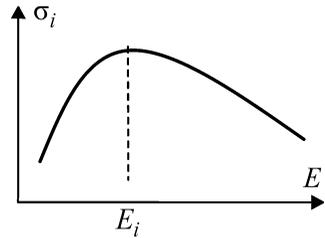


Рис. 2.46. Зависимость сечения взаимодействия от энергии

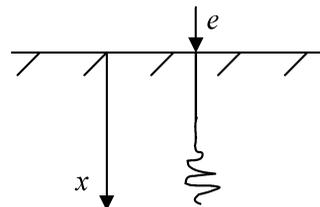


Рис. 2.47. Траектория первичного электрона в толще материала

электронами и ионами решетки кристалла. Количество вторичных электронов уменьшается с пройденным расстоянием экспоненциально:  $n(x) = n_0 \exp(-\alpha x)$ . Действительно:

$$\frac{dn}{dx} = -\alpha n \Rightarrow \ln n = -\alpha x + C \Rightarrow n(x) = n_0 \exp(-\alpha x).$$

Таким образом, количество электронов, дошедших до поверхности с глубины  $x$ , экспоненциально уменьшается, тогда коэффициент истинной вторичной электронной эмиссии можно определить как количество вторичных электронов на 1 первичный:

$$\gamma_{ee} = \int_0^{\bar{x}_m} \left( -\frac{dE_p}{dx} \frac{1}{\varepsilon} \right) \exp(-\alpha \bar{x}) d\bar{x} = A \int_0^{\bar{x}_m} \frac{\exp(-\alpha \bar{x})}{\bar{E}_p^n(\bar{x})} d\bar{x},$$

где  $\bar{x}_m$  – безразмерная максимальная глубина проникновения первичных электронов с начальной энергией  $E_p(0) = E_{p0}$ . Так как

$$\bar{E}_p^n d\bar{E}_p = -C d\bar{x}, \text{ то } \frac{1}{n+1} \bar{E}_p^{n+1} = -C\bar{x} + C_2, \text{ следовательно, } \bar{E}_p(\bar{x}) = \\ = {}^{n+1}\sqrt{\bar{E}_{p0}^{n+1} - C(n+1)\bar{x}}. \text{ Тогда } \bar{x}_m(\bar{E}_p(x) = 0) = \frac{\bar{E}_{p0}^{n+1}}{C(n+1)}.$$

Из этого соотношения можно экспериментально определить  $n$  по минимальной энергии  $E_{p0}$ , необходимой для проникновения через  $x_m$ .

$$\gamma_{ee} = A \int_0^{\bar{x}_m} \frac{\exp\left(\frac{-\alpha(E_{p0}^{n+1} - E_p^{n+1}(x))}{c(n+1)}\right)}{\bar{E}_p^n(\bar{x})} \left( -\frac{\bar{E}_p^n d\bar{E}_p}{C} \right) = \\ = A \exp\left(-\frac{\alpha \bar{E}_{p0}^{n+1}}{c(n+1)}\right) \int_0^{\bar{x}_m} \exp\left(\frac{\alpha \bar{E}_p^{n+1}(x)}{c(n+1)}\right) \frac{d\bar{E}_p}{C} = \\ = A_1 \exp(-y^{n+1}) \int_0^{y^{n+1}} \exp(\xi^{n+1}) d\xi = A_1 F_{n+1}(y),$$

где  $\frac{\alpha \bar{E}_{p0}^{n+1}}{C(n+1)} = y^{n+1}$ , следовательно,  $y = \bar{E}_{p0}^{n+1} \sqrt{\frac{\alpha}{C(n+1)}}$ ,

$\xi^{n+1} = \frac{\alpha \bar{E}_p^{n+1}}{C(n+1)}$ . Максимальное значение  $\gamma_m = \gamma_{ee\max}$  при  $E_{p0} = E_m$

находим из условия  $\left. \frac{\partial \gamma_{ee}}{\partial y} \right|_{y_m = E_m^{n+1} \sqrt{\frac{\alpha}{C(n+1)}}} = 0$ :

$$\frac{\partial F_{n+1}(y)}{\partial y} = -A_1(n+1)y_m^n \exp(-y_m^{n+1}) \int_0^{y_m^{n+1}} \exp(\xi^{n+1}) d\xi +$$

$$+ A_1 \exp(-y_m^{n+1}) \exp(y_m^{n+1}) = 0 \Rightarrow F_{n+1}(y_m) = -\frac{1}{(n+1)y_m^n}.$$

Получим так называемое уравнение приведенной кривой:

$\frac{\gamma_{ee}}{\gamma_m} = \frac{F_{n+1}(y)}{F_{n+1}(y_m)}$ . Эта зависимость для разных  $n$  приведена на

рис. 2.48. Наличие максимума на энергетической зависимости коэффициента вторичной эмиссии объясняется тем, что глубина, на которую проникают первичные электроны, увеличивается с ростом их энергии (рис. 2.49). Далеко не все электроны, получившие дополнительную энергию, добираются до поверхности, растрчивая энергию по пути на взаимодействие с ионами решетки и другими электронами. С большой глубины вторичным электронам существенно труднее добраться до поверхности, поэтому коэффициент вторичной эмиссии

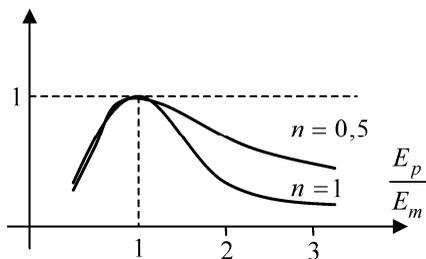


Рис. 2.48. Приведенные кривые

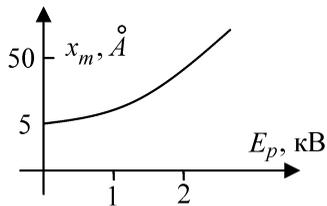


Рис. 2.49. Зависимость глубины проникновения электронов от их энергии

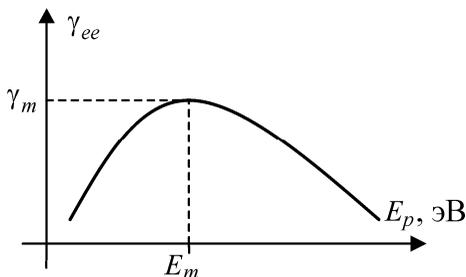


Рис. 2.50. Экспериментальная зависимость коэффициента истинной вторичной эмиссии

уменьшается. Для различных материалов можно экспериментально определить  $E_m$  и  $\gamma_m$  (рис. 2.50).

Оказалось, что для любых материалов зависимость коэффициента истинной вторичной электронной эмиссии от энергии первичных электронов можно описать одной эмпирической формулой:

$$\frac{\gamma_{ee}(E_p)}{\gamma_m} = (2,72)^2 \frac{E_p}{E_m} \exp\left(-2\sqrt{\frac{E_p}{E_m}}\right).$$

Положение максимума зависимости коэффициента вторичной электронной эмиссии для разных материалов представлено в табл. 2.3.

Таблица 2.3

**Положение максимума зависимости коэффициента вторичной электронной эмиссии**

Материал	Al	Be	C (алмаз)	C (графит)	Cu	Fe	Mo	Ni	Ta	Ti	W
$\gamma_m$	1,0	0,5	2,8	1,0	1,3	1,3	1,25	1,3	1,3	0,9	1,4
$E_m$ , эВ	300	200	750	300	600	400	375	550	600	280	650

Экспериментально обнаружена зависимость максимального значения коэффициента истинной вторичной электронной эмиссии от работы выхода  $\gamma_m = \sqrt{0,35e\varphi_a}$ . Эта зависимость пока не нашла теоретического объяснения, но она явно не полная, так как не отражает влияния поверхности. Например, экспериментально обнаружено, что шероховатость поверхности сильно понижает коэффициент вторичной эмиссии. С ростом атомного номера  $Z$  и работа выхода электрона из металла и  $\gamma_m$  возрастают. Преодолевшие потенциальный барьер истинные вторичные электроны на выходе имеют энергии, не зависящие от энергии первич-

ных электронов. Работа выхода материала также не оказывает существенного влияния на эмиссию вторичных электронов, так как, во-первых, энергия первичных электронов, как правило, гораздо больше работы выхода, во-вторых, эмиссия происходит не из поверхностных слоев, а из глубины металла, поэтому более важным является потеря энергии при движении электрона к поверхности. Использование в эксперименте энергоанализатора высокой разрешающей способности позволяет выявить ряд максимумов в энергетическом распределении истинно-вторичных электронов. Положение максимумов также не зависит от энергии электронов  $E_p$  и я-

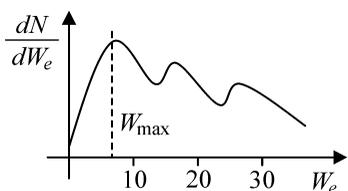


Рис. 2.51. Энергетическое распределение истинных вторичных электронов

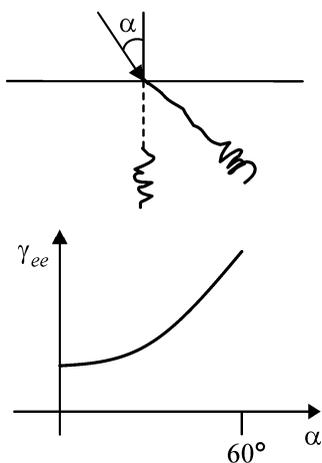


Рис. 2.52. Зависимость коэффициента истинной вторичной эмиссии от угла падения первичных электронов

вляется характеристикой материала мишени. Положение основного максимума  $W_{\max}$  (рис. 2.51) зависит от  $Z$  (атомного номера), при  $Z \uparrow W_{\max} \downarrow$ , так как вторичным электронам сложнее выйти из глубины, и основной вклад дают электроны, получившие энергию вблизи поверхности.

Резонансность процессов не может быть объяснена изложенной выше качественной теорией, и нашла объяснение при рассмотрении оже-процессов. Эмпирическая зависимость  $\gamma_e(\alpha)$ , где  $\alpha$  — угол падения первичного электрона с нормалью (рис. 2.52), описывается косинусоидальным законом:  $\gamma_{ee}(\alpha) = \frac{\gamma_{ee}(0)}{\cos^\beta \alpha}$ . Степень  $\beta = 1,3 \div 1,5$  для углов  $\alpha < 60^\circ$ . Рост коэффициента эмиссии с увеличением угла падения объясняется уменьшением глубины рождения вторичных электронов. Экспериментально было уста-

новлено, что максимальная глубина зарождения вторичных электронов, с которой они еще в состоянии дойти до поверхности, оценивается несколькими десятками атомных слоев.

### 2.4.3. Оже-электроны

Первичный электрон, попадая в глубь металла, передает электрону заполненной зоны  $C$  (рис. 2.53) энергию, достаточную для перехода последнего в зону проводимости.

В заполненной зоне  $C$  возникает вакансия, которая заполняется электроном из верхней заполненной зоны  $B$ . При этом выделяется энергия  $h\nu = W_B - W_C$ , которая передается какому-либо электрону из зоны проводимости.

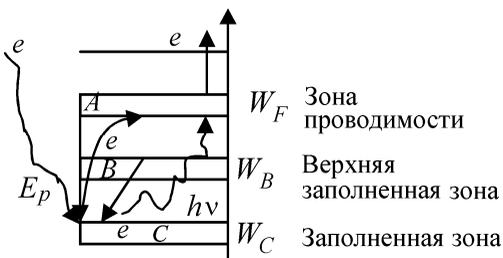


Рис. 2.53. Схема оже-процесса

Этот электрон выходит из металла в вакуум как истинный вторичный с энергией  $W_e = h\nu - e\varphi_a$ . Образовавшиеся оже-электроны создают ряд максимумов в энергетическом распределении истинных вторичных электронов (см. рис. 2.51), положение которых соответствуют расстоянию между зонами и не зависит от энергии первичных, т.е. является характеристикой материала мишени. На этом основана возможность анализа состава поверхностного слоя металлов и чистоты поверхности (оже-спектроскопия).

### 2.4.4. Упругоотраженные электроны

Коэффициент упругоотраженных вторичных электронов  $\eta_{ee}$  определяется процессами отражения электрона как электромагнитной волны за счет рассеяния на отдельных атомах кристалла, дифракции и интерференции. В отличие от классической дифракции, разрешающей интерференцию рассеянных волн при выполнении условия Брэгга – Вульфа:  $2d \sin \alpha = n\lambda_e$ , где  $d$  – межатомное расстояние;  $\alpha$  – угол падения;  $\lambda_e$  – длина волны де Бройля, отражение

происходит для любых  $E_p$  и  $\alpha$ , так как из-за взаимодействия электрона с фононами, электронами проводимости, дефектами и т.д. когерентность нарушается. Эмпирическая зависимость коэффициента отражения  $\eta_{ee}$  для нормального падения электронов от атомного номера материала мишени (рис. 2.54) и от энергии первичных электронов (рис. 2.55) имеет вид

$$\eta_{ee}(E_p, Z) = E_p^{m(Z)} \exp(C(Z)),$$

где  $m(Z) = 0,1382 - 0,9211Z^{-0,5}$ ,  $C(Z) = 0,1904 - 0,2236 \ln(Z) + 0,1292 \ln^2 Z - 0,01491 \ln^3 Z$ . Зависимость  $\eta_{ee}$  от угла падения  $\alpha$ :

$$\eta_{ee}(\alpha) = 0,89 \left( \frac{\eta_e(0)}{0,89} \right)^{\cos \alpha}.$$

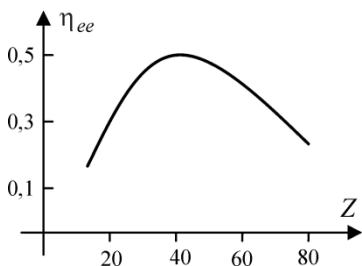


Рис. 2.54. Зависимость коэффициента отражения от атомного номера материала мишени

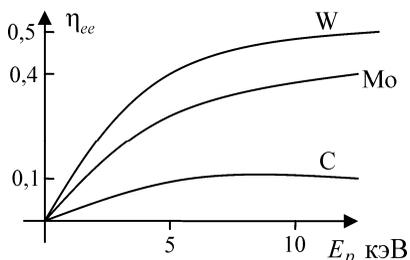


Рис. 2.55. Зависимость коэффициента отражения от энергии первичных электронов

### 2.4.5. Неупругоотраженные электроны

Неупругоотраженные электроны имеют непрерывный энергетический спектр от 50 эВ до энергий, соответствующих упругоотраженным (см. рис. 2.45). Это объясняется тем, что их энергия зависит от потерь при выходе из металла. Эти потери носят вероятностный характер. Но на сплошном энергетическом спектре неупругоотраженных электронов вблизи пика упругоотраженных существуют несколько пиков так называемых *характеристических* (рис. 2.56). Есть несколько теорий, объясняющих характеристический максимум (характеристические потери). Одна связывает их с

оже-процессом, другая – с возбуждением первичными электронами плазменных колебаний и взаимодействием их с плазменными колебаниями. Электроны в металле и ионы в узлах кристаллической решетки образуют коллективную среду, которую можно назвать *плазменной*. В этой плазме, так же как и в плазме газового разряда, возможно возбуждение плазменных

колебаний с частотой  $\omega_0 = \sqrt{\frac{4\pi n e^2}{m_e}}$ .

Для плотности металла  $n \sim 10^{29} \text{ м}^{-3}$  плазменная частота получается  $\omega \sim 2 \times 10^{16} \text{ с}^{-1}$ . Колебания с такой частотой можно возбудить, если затратить энергию:

$\hbar\omega = 2\pi \cdot 6 \cdot 10^{-34} \text{ Дж} \cdot \text{с} \cdot 2 \cdot 10^{16} \text{ с}^{-1} = 2\pi \cdot 12 \cdot 10^{-18} \text{ Дж} \sim 10 \text{ эВ}$ ,  
 где  $1 \text{ эВ} \sim 1,6 \times 10^{-19} \text{ Дж}$ . Такие колебания называют *плазмонами*.

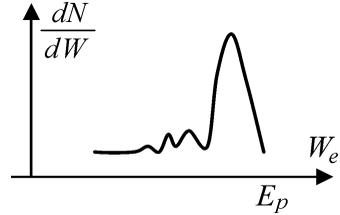


Рис. 2.56. Характеристические пики

#### 2.4.6. Вторичная электронная эмиссия полупроводников и диэлектриков

Эффективные эмиттеры вторичных электронов – это не металлы, а полупроводники.

Если сравнивать суммарный коэффициент вторичной электронной эмиссии для металлов, диэлектриков и полупроводников, то окажется, что для диэлектриков он больше, чем для металлов, а для полупроводников больше, чем для диэлектриков (рис. 2.57), правда, максимум  $\sigma_m$  сдвигается для полупроводников в область больших энергий первичных электронов.

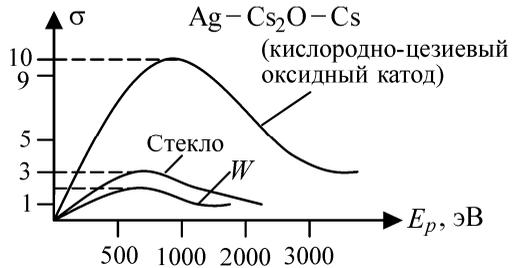


Рис. 2.57. Коэффициент вторичной эмиссии для диэлектриков и полупроводников

Кроме того, коэффициент вторичной электронной эмиссии диэлектриков и полупроводников, в отличие от металлов, имеет температурную зависимость  $\sigma(T)$ ; зависимость от внешнего поля  $\sigma(E)$ ; зависимость от  $e\phi_a$ , т.е.  $\sigma(e\phi_a)$ .

Существенной особенностью является то, что максимум энергетического распределения истинных вторичных электронов из полупроводников приходится на низкоэнергетическую область в диапазоне  $1 \div 3$  эВ вместо  $\sim 10$  эВ для металлов.

Существенно большие коэффициенты вторичной электронной эмиссии для диэлектриков и полупроводников объясняются тем, что образовавшиеся в толщине вторичные электроны практически не встречают сопротивления со стороны электронов проводимости, поэтому вторичные электроны, эмитируемые полупроводниками, более низкоэнергетичны, чем эмитируемые металлами. Ширина запрещенной зоны полупроводника 1 эВ. В изоляторах, с одной стороны, ширина запрещенной зоны много больше, но вторичные электроны, в отличие от вторичных электронов в полупроводниках, при движении к поверхности, сталкиваясь с атомами решетки, не ионизируют их (из-за той же большой ширины запрещенной зоны),

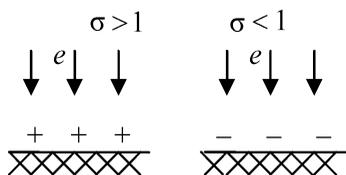


Рис. 2.58. Электризация диэлектрика

а упруго отражаются от них, практически не теряя энергию. Очень важным отличием во вторичной электронной эмиссии диэлектриков и полупроводников является то, что их поверхность при  $\sigma > 1$  заряжается положительно, а при  $\sigma < 1$  – отрицательно (рис. 2.58).

Таким образом, меняя энергию первичных электронов, можно менять заряд поверхности. Это явление следует учитывать, если в электровакуумных приборах электроны попадают на диэлектрик, вызывая его электризацию. Хотя это иногда играет и положительную роль. Например, электризация стенок трубок удерживает тлеющий разряд, заставляя его повторять геометрию трубок, что широко используется, например, в рекламных огнях. Для сложных оксидных эмиттеров, использующихся для вторичной электронной эмиссии, например, кислородно-магниевого, применима несколько иная зависимость коэффициента вторичной электронной эмиссии

от энергии первичных  $\sigma = AE_p \exp(-\mu E_p)$ , где постоянные  $A$  и  $\mu$  можно выразить через табличные значения  $E_m$  и  $\sigma_m$ , действительно:

$$\frac{\partial \sigma}{\partial E_p} = A \exp(-\mu E_m) - AE_m \cdot \mu \exp(-\mu E_m) = 0$$

дает значение  $\mu = \frac{1}{E_m}$ , а  $A = \frac{\sigma_m}{E_m e}$ .

#### 2.4.7. Вторичная электронно-электронная эмиссия слоя полупроводника или диэлектрика на металлической подложке

Пусть сопротивление слоя –  $R$ , тогда на нем возникнет разность потенциалов  $\Delta U$ . Коэффициент вторичной электронной эмиссии  $\sigma$  зависит от энергии первичных электронов, т.е. от  $U_1 = U_0 - \Delta U$ . Если начальное  $U_0$  таково, что  $U_0 > U_{01}$ , то  $\sigma > 1$ ,  $I_2 > I_1$  и  $\Delta U < 0 \Rightarrow U_1 \uparrow$ . Поверхность будет заряжена «+», получается положительная обратная связь,  $U_1$  будет возрастать, пока не станет больше  $\frac{E_m}{e}$ . При  $U_1 > \frac{E_m}{e}$ , если  $U_1 \uparrow \rightarrow \sigma \downarrow$ , пока не достигнет  $\sigma = 1$ , тогда накопление заряда «+» закончится. При  $\sigma < 1$   $\Delta U$  изменит знак и станет больше нуля,  $U_1$  станет уменьшаться (рис. 2.59).

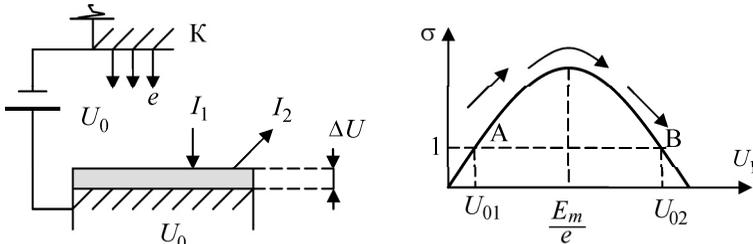


Рис. 2.59. Особенности вторичной электронной эмиссии диэлектрика на металлической подложке

Таким образом, точка В – устойчивая точка, при этом  $U_1 = U_{02}$ . Если  $U_0 < U_{01}$ , то  $\sigma < 1$ , поверхность заряжается отрицательно.  $\Delta U > 0$ ,  $U_1 \downarrow \rightarrow \sigma \downarrow$  – отрицательная обратная связь приведет к  $U_1 \rightarrow 0$  – потенциал на поверхности будет равен потенциалу на катоде, это будет тоже устойчивый режим.

### 2.4.8. Эффект Молтера

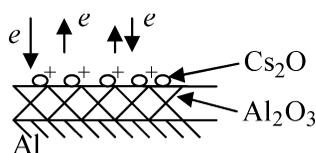


Рис. 2.60. Аномальная вторичная эмиссия

Молтер в 1936 г. обнаружил очень большую вторичную электронную эмиссию ( $\sigma_m = 100 \div 1000$ ) с алюминия, покрытого тонкой пленкой оксида  $Al_2O_3$ , обработанного парами Cs (рис. 2.60). Эффект Молтера имеет большую инерционность – секунды по

сравнению с безинерционной обычной вторичной электронной эмиссией ( $\sim 10^{-9}$  с). Толщина пленки не должна быть больше 1 мкм, этот факт позволил самому Молтеру объяснить эффект. Тонкий слой  $Al_2O_3$  является диэлектриком, наличие оксида цезия еще более увеличивает коэффициент вторичной электронной эмиссии, это приводит к положительному заряду на поверхности. Возникает очень сильное электрическое поле  $\sim 10^6 \div 10^7 \frac{В}{см}$ . Начинается ин-

тенсивная автоэлектронная эмиссия из металла. При больших толщинах пленки диэлектрика напряженность поля в ней не велика, и автоэлектронной эмиссии не происходит. Автоэлектроны, вышедшие из металла, проходя через диэлектрик, возбуждают и ионизуют атомы диэлектрика. Через диэлектрическую пленку протекает лавинный электрический разряд. Условия для развития лавин при наличие примесей неоднородны, этим объясняется наличие «эмиссионных пятен» при молтеровской эмиссии. Таким образом, в данном случае роль первичных электронов сводится к поддержанию положительного заряда на поверхности.

## 2.4.9. Применение вторичной электронной эмиссии в электронных приборах

Наиболее распространенным применением вторичной электронной эмиссии являются электронные умножители, принцип действия которых показан на рис. 2.61. Максимально полное попадание вторичных электронов на следующий эмиттер может обеспечиваться электрической (см. рис. 2.61, *а*) или магнитной фокусировкой (см. рис. 2.61, *в* – фотоумножитель Кубецкого). Между входным электродом и предпоследним прикладывается такая разность потенциалов, которая обеспечивает значение коэффициента вторичной электронной больше единицы между двумя соседними электродами. Именно при этом условии происходит размножение электронов, коэффициент которого для жалюзийного усилителя (см. рис. 2.61, *з*) составляет  $\sim 10^5$ . При регистрации фотонов используются специальные фотоэмиссионные катоды, а сам прибор помещают в колбу (ФЭУ). Для регистрации корпускулярного излучения – ионов, электронов, быстрых атомов – используют умножители открытого типа (ВЭУ-1, ВЭУ-2).

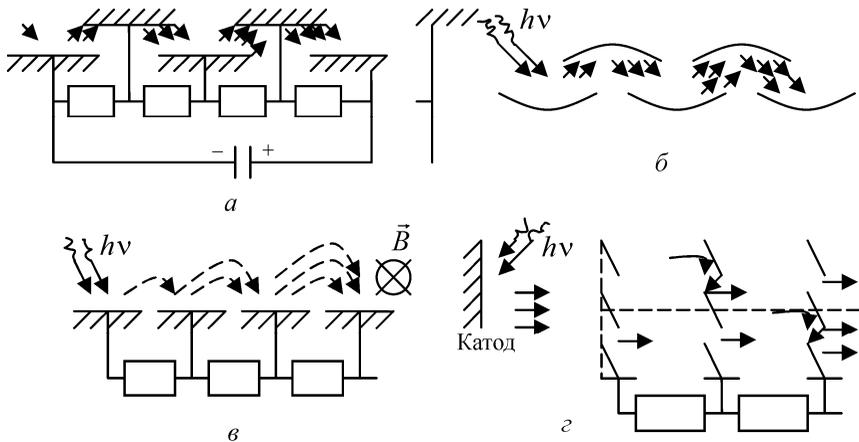


Рис. 2.61. Принцип действия вторичного электронного умножителя: *а* – с электрической фокусировкой; *б* – с электрической и геометрической фокусировкой, использующей обратную связь; *в* – с магнитной фокусировкой; *з* – «жалюзий» Векшинского

Разновидностью вторичного электронного умножителя является умножитель канального типа, который представляет собой изогнутый канал из специального полупроводящего стекла. Сам материал канала и его изогнутая форма обеспечивают более высокие коэффициенты эмиссии за счет наклонного попадания электронов на стенки с распределенным вдоль них потенциалом. Прикладываемая разность потенциалов 3 – 4 кВ, а коэффициент умножения составляет  $10^6 - 10^8$  (ВЭУ-4, ВЭУ-6). Для слабых плотностей потоков используют микроканальные пластины (МКП).

## 2.5. Вторичная ионно-электронная эмиссия

Испускание электронов твердым телом при бомбардировании его ионами называется *ионно-электронной эмиссией*. Ионно-электронная эмиссия характеризуется коэффициентом  $\gamma_{ei} = \frac{n_e}{n_i}$ , где

$n_e$  – число эмитированных электронов;  $n_i$  – число ионов, упавших на ту же поверхность за то же время. Различают потенциальную и кинетическую ионно-электронную эмиссию. Потенциальная ионно-электронная эмиссия характеризуется коэффициентом  $\gamma_n$  и связана с передачей электронам мишени энергии, выделяющейся при нейтрализации пришедшего на мишень иона. Кинетическая ионно-электронная эмиссия, характеризуемая коэффициентом  $\gamma_k$ , связана с передачей электронам мишени кинетической энергии иона. При ионной бомбардировке обычно идут оба процесса. При подлете ионов к поверхности сначала происходит их нейтрализация и, соответственно, потенциальная ионно-электронная эмиссия. Затем при соударении атомов с мишенью возникают электроны кинетической ионно-электронной эмиссии, поэтому  $\gamma_{ei} = \gamma_n + \gamma_k$ .

### 2.5.1. Потенциальная ионно-электронная эмиссия

Потенциальная ионно-электронная эмиссия была открыта голландским физиком Пеннингом в 1928 г. При исследовании зависимости ионно-электронной эмиссии металлических мишеней от энергии падающих ионов он обнаружил, что эмиссия остается и

при очень малых, практически нулевых, энергиях ионов. Из этого он сделал вывод, что эмиссия электронов не связана с кинетической энергией ионов. В экспериментах было выяснено, что потенциальная ионно-электронная эмиссия происходит только для ионов, потенциал ионизации которых  $U_i$  в два раза больше работы выхода материала эмиттера  $\varphi_a$ :  $U_i > 2\varphi_a$ . Это находит объяснение

в процессе оже-нейтрализации иона. Приближаясь к поверхности металла, ион изменяет своим полем поверхностный потенциальный барьер, понижая его. Один электрон, имея в металле энергию  $E_1$ , совершит туннельный переход и нейтрализует ион (рис. 2.62). При этом выделенная энергия  $eU_i - |E_1|$  может быть передана второму электрону, имеющему в металле энергию  $E_2$ . Для того, чтобы второй

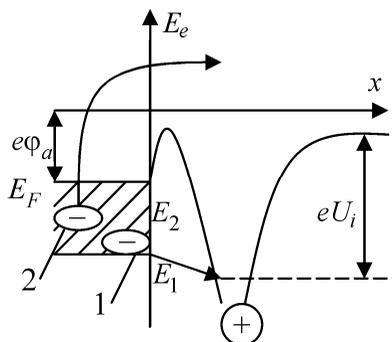


Рис. 2.62. Схема потенциальной ионно-электронной эмиссии

электрон вышел из металла, его кинетическая энергия должна быть больше нуля:  $\frac{mV^2}{2} = eU_i - |E_1| - |E_2| > 0$ . С учетом того, что при низких температурах  $E_1$  и  $E_2$  ниже уровня Ферми, т.е.  $|E_1|, |E_2| > e\varphi_a$ , то  $U_i > 2\varphi_a$ . Опыт показывает, что коэффициент  $\gamma_n$  растет линейно с увеличением разности  $U_i - 2\varphi_a$  для различных пар ион-мишень. Для чистых поверхностей эту зависимость можно описать эмпирической формулой:  $\gamma_n \approx 0,01(U_i - 2\varphi_a)$  [эВ]. Например, для  $Ne^+ - Mo$   $\gamma_n \approx 0,28$ , для  $Ag^+ - Mo$   $\gamma_n \approx 0,11$ , для  $Kr^+ - Mo$   $\gamma_n \approx 0,75$ . Коэффициент  $\gamma_n$  тем больше, чем больше заряд иона (кратность ионизации):  $\gamma_n(A^+) > \gamma_n(A^{++}) > \gamma_n(A^{+++})$ . В случае многозарядности ионов захват электронов ионом происходит последовательно со ступенчатым понижением заряда иона.

При этом  $\gamma_n$  может превысить 1. При невысоких энергиях ионов ( $E_p < 1$  кэВ), если поверхность мишени достаточно чистая,  $\gamma_n$  слабо зависит от энергии падающих ионов (немного уменьшается с ростом  $E_p$ ). При больших энергиях  $E_p$  коэффициент  $\gamma_n$  снижается до нуля. При большой величине разности  $U_i - 2\phi_a \gg kT_W$ , где  $T_W$  – температура поверхности, коэффициент  $\gamma_n$  не зависит от температуры поверхности мишени. При малой разности  $U_i - 2\phi_a \approx kT_W$  термическое увеличение энергии электронов повышает вероятность эмиссии,  $\gamma_n$  растет с увеличением  $T_W$ , при этом эмиссия возможна и при  $U_i < 2\phi_a$ . Для некоторых пар ион-мишень (например,  $\text{Ne}^+ - \text{Mo}$ ) возможна нейтрализация ионов не в основном, а в возбужденное состояние. В этом случае эмиссия электронов осуществляется путем оже-деактивизации. Энергия, выделяющаяся при переходе второго электрона в основное состояние, передается электрону 1, оказавшемуся на возбужденном уровне. Получив эту энергию, электрон с возбужденного уровня покидает металл.

При этом условии появления эмиссии:  $eU^* > 2e\phi_a$ , где  $eU^*$  – энергия возбужденного атома. Форма энергетического спектра эмитируемых электронов имеет максимум около значения

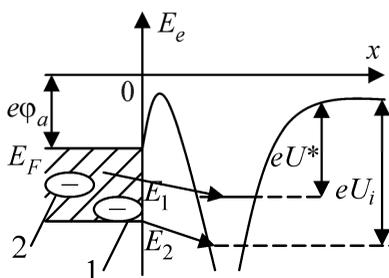


Рис. 2.63. Схема оже-деактивизации при потенциальной ион-электронной эмиссии

для оже-деактивизации. Ионно-электронная эмиссия существует и для диэлектрических мишеней и для полупроводников. Соотношение на эмиссию электронов при этом заменяется следующим:  $U_i > \frac{\Delta E_3 + \chi_{cp}}{e}$ , где  $\Delta E_3$  – ширина запрещенной зоны, а  $\chi_{cp}$  – сродство электрона к эмиттеру.

## 2.5.2. Кинетическая ионно-электронная эмиссия

При высоких энергиях падающих ионов кинетическая ионно-электронная эмиссия преобладает над потенциальной. Экспериментально было обнаружено, что существует пороговое значение энергии ионов  $(E_p)_{гр} \sim 1,5$  кэВ, меньше которого коэффициент эмиссии металлов  $\gamma_k \approx 0$ , для диэлектриков  $(E_p)_{гр} \sim 0,1 \div 0,2$  кэВ. В припороговой области энергий ионов ( $1,5$  кэВ  $< E_p < 10$  кэВ) коэффициент эмиссии пропорционален энергии:  $\gamma_k = C \cdot (E_p - (E_p)_{гр})$ , где  $C = \text{const}$ . Для чистых металлов  $C \leq 0,2 \cdot 10^{-2} \text{ эВ}^{-1}$ . При более высоких энергиях  $\gamma_k \sim E_p^{1/2}$ , затем выходит на плато и далее уменьшается. Например, при бомбардировке ионами  $\text{H}^+$  поверхность из вольфрама максимум эмиссии наблюдается для  $E_p = 100$  кэВ ( $\gamma_k^{\text{max}} = 1,5$ ). При облучении монокристаллов коэффициент  $\gamma_k$  зависит от угла падения ионов на поверхность, так как  $\gamma_k$  различен для разных граней. Причем эта зависимость носит периодический характер. Распределение эмитированных электронов по энергиям имеет максимум в диапазоне  $1 \div 3$  эВ и затем протяженный спад, на котором выделяются пики, связанные с оже-переходами. По положению этих пиков можно анализировать состав поверхности, на этом основана ионная оже-спектроскопия. Современные представления кинетической ионно-электронной эмиссии (модель Парилуса, Петрова, Кишиневского) основываются на двухэтапности процесса. На первом этапе кинетическая энергия иона передается электронной системе металла с образованием «дырок» (получая энергию, электроны атомов совершают межзонный переход в зону проводимости, образуя дырки). На втором этапе происходит рекомбинация дырки и электрона проводимости металла с передачей выделяющейся энергии за счет оже-процесса другому электрону проводимости, который эмитируется из металла мишени. Таким образом, второй этап кинетической ионно-электронной эмиссии близок по природе потенциальной эмиссии.

Следует учитывать, что разогревание поверхности мишени интенсивным ионным пучком может приводить к появлению термоэлектронной эмиссии, а в случае мишени из диэлектрика зарядка поверхности может привести к автоэлектронной эмиссии.

## 2.6. Поверхностная ионизация

### 2.6.1. Формула Саха – Ленгмюра

При попадании потока атомов или молекул на поверхность нагретого до высокой температуры металла некоторая их часть покинет поверхность в виде тех же нейтральных частиц, но будет некоторое количество покидающих поверхность в виде положительных или отрицательных ионов. Явление ионизации на поверхности раскаленного металла получило название *поверхностной ионизации* – положительной и отрицательной соответственно. Впервые положительную поверхностную ионизацию атомов на вольфраме наблюдали в 1923 г. Ленгмюр и Кингдон. Поверхностная ионизация отличается от неравновесных процессов эмиссии ионов с поверхности, вызванных воздействием быстрых нейтральных частиц (нейтрал-ионная эмиссия), электронов (электрон-ионная эмиссия), фотонов (фотодесорбция ионов) тем, что адсорбированные на поверхности из газовой фазы атомы (адатомы) приходят к термическому равновесию с металлом, так что испарение происходит за счет теплового возбуждения. Поверхностная ионизация характеризуется двумя параметрами:  $\alpha = \frac{n_i}{n_a}$  – степень ионизации;

$\beta = \frac{n_i}{n} = \frac{n_i}{n_a + n_i} = \frac{\alpha}{\alpha + 1}$  – коэффициент ионизации, где  $n_i$  и  $n_a$  –

плотности потока испаряющихся частиц в виде ионов и атомов соответственно, в стационаре  $n_a + n_i = n$ , где  $n$  – плотность потока падающих частиц. Из кинетической теории газов  $n = \frac{1}{4} N \bar{v} = \frac{P}{\sqrt{2\pi m_a k T}}$ , где  $P$  и  $T$  – давление и температура газа;  $N$  – плотность частиц. Степень поверхностной ионизации определяется

формулой Саха – Ленгмюра:  $\alpha = \frac{g_i}{g_a} \exp\left(\frac{e(\varphi_a - U_i)}{kT}\right)$ , где  $\frac{g_i}{g_a}$  – отношение статистических весов ионного и атомного состояния ионизирующихся частиц;  $e\varphi_a$  – работа выхода металла, на котором происходит ионизация атомов;  $U_i$  – потенциал ионизации.

### Температурная зависимость плотности тока положительной ионизации

С целью проверки формулы Саха – Ленгмюра многими исследователями экспериментально изучалась температурная зависимость плотности ионного тока:

$$j_i = en_i = en\beta = en \frac{1}{1 + \frac{1}{\alpha}} = \frac{en}{1 + \frac{g_a}{g_i} \exp\left(\frac{e(U_i - \varphi_a)}{kT}\right)}$$

Если  $U_i - \varphi_a < 0$  и  $|e(U_i - \varphi_a)| \gg kT$ , это соответствует легко ионизируемым элементам (например, Cs на W); если  $\alpha \gg 1$ ,  $j_i = en$  не зависит от температуры.

Если  $U_i - \varphi_a < 0$  и  $|e(U_i - \varphi_a)| \sim kT$  (например, K на W) при росте  $T$   $\alpha$  уменьшается, следовательно, и  $j_i \downarrow$ .

При  $e(U_i - \varphi_a) \gg kT$  (например, Na на W),  $\alpha \ll 1$ ,  $j_i = \frac{g_a}{g_i} en \exp\left(\frac{e(U_i - \varphi_a)}{kT}\right)$ ,

$\ln j_i = \ln\left(\frac{g_a}{g_i} en\right) - \frac{e(U_i - \varphi_a)}{kT}$ . С ростом  $T$   $j_i \uparrow$  (рис. 2.64).

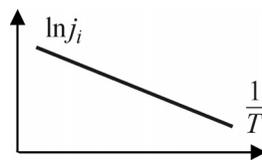


Рис. 2.64. Зависимость плотности тока от обратной температуры

### Термодинамический вывод формулы Саха – Ленгмюра

Рассмотрим систему газ-металл в равновесии, т.е. потоки частиц (ионов, атомов, электронов) на стенку и со стенки равны, и температура газа и металла равна  $T$ . Запишем равенство потоков электронов. Плотность приходящего потока электронов

$n'_e = \frac{1}{4} N_e \bar{v}_e (1 - \bar{R})$ , где  $\bar{v}_e = \sqrt{\frac{8kT}{\pi m}}$  – средняя скорость электронов в газе;  $\bar{R}$  – средний коэффициент отражения от стенки;  $N_e$  – плотность электронов.

Плотность уходящего потока электронов равна плотности тока термоэмиссии:  $n_e = \frac{j_T}{e} = \frac{A_0}{e} (1 - \bar{R}) T^2 \exp\left(-\frac{e\varphi_a}{kT}\right)$ , где

$A_0 = \frac{4\pi m k^2 e}{h^3}$  – универсальная постоянная Ричардсона, потому что

эмиссия частиц возникает не в результате действия падающих на стенку частиц, а в результате теплового возбуждения на поверхности разогретого металла. Приравниваем  $n'_e = n_e$ , получим

$N_e = \frac{2(2\pi m k)^{3/2}}{h^3} T^{3/2} \exp\left(-\frac{e\varphi_a}{kT}\right)$ . Используя известное в термодинамике выражение для константы равновесия процесса  $a \leftrightarrow i + e$ :

$C = \ln \frac{N_e N_i}{N_a} = -\frac{eU_i}{kT} + \frac{3}{2} \ln T + \ln \left( 2 \frac{g_i}{g_a} \frac{(2\pi m k)^{3/2}}{h^3} \right)$ , и подставляя в

него выражение для  $N_e$ , получим:

$$\ln \frac{N_i}{N_a} = C - \ln N_e = -\frac{e(U_i - \varphi_a)}{kT} + \ln \left( \frac{g_i}{g_a} \right),$$

$$\text{т.е. } \frac{N_i}{N_a} = \frac{g_i}{g_a} \exp \frac{e(\varphi_a - U_i)}{kT}.$$

Учитывая равенство масс и средних скоростей атомов и ионов, получим:  $\frac{n_i}{n_a} = \frac{N_i \bar{v}_i}{N_a \bar{v}_a} = \frac{g_i}{g_a} \exp \frac{e(\varphi_a - U_i)}{kT}$ .

Экспериментальная проверка этих зависимостей подтвердила верность соотношения Саха – Ленгмюра.

## Статистический вывод формулы Саха – Ленгмюра

Согласно теории Зоммерфельда электроны в металле находятся в потенциальной яме глубиной  $W_a$ , валентный электрон адсорбированного атома (адатома) также находится в потенциальной яме (рис. 2.65). Ширина потенциального барьера на границе металл-адатом  $\Delta x$  конечного размера, и электроны металла и адатомов за счет туннельного эффекта могут преодолевать его, при этом адатом может находиться на поверхности не только в нейтральном состоянии, но и в состоянии частичной ионизации. Адатом и металл образуют единую систему, их электроны принадлежат всей системе в целом, так, что электронные облака распределяются как в объеме металла, так и в объеме адатома.

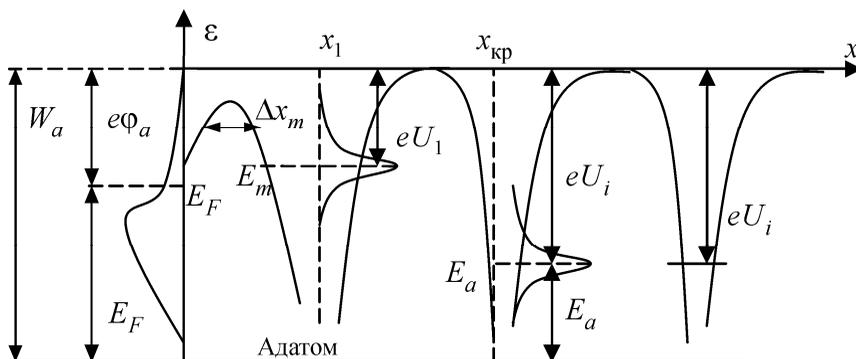


Рис. 2.65. Схема поверхностной ионизации

Таким образом, энергетический уровень валентно электрона  $U_i$  расплывается и изменяется, так что энергия  $E_m$  наиболее вероятного нахождения электронов в адатоме отличается от  $U_i$  и лежит немного выше  $E_F$ . Поэтому если  $eU_i > 2e\phi_a$ , то адатом заряжен отрицательно, если  $eU_i < 2e\phi_a$  – положительно. Расширение и изменение уровня валентного электрона при приближении атома к поверхности происходит только, если он находится на уровне зоны проводимости металла. Если он расположен ниже дна зоны проводимости, то расширения не происходит, ион остается дискретным

на любом расстоянии от поверхности, при этом электрон будет принадлежать только адатому, и адатом будет нейтральным. При удалении адатома от поверхности ширина потенциального барьера увеличивается, обмен электронами между металлом и адатомом затрудняется, электроны металла стягиваются внутрь металла, валентный электрон адатома локализуется на дискретном уровне. Вероятность обмена электронами практически прекращается на некотором расстоянии  $x_{кр}$ . Энергия локализации электрона –  $E_a$ , вероятность нахождения электрона на уровне  $E_a$  по статистике Ферми:

$$\omega(E_a) = \frac{1}{1 + \exp\left(\frac{E_a - E_F}{kT}\right)}. \text{ Вероятность того, что этот уровень не}$$

занят, т.е. вероятность того, что на расстоянии  $x_m$  будет находиться

$$\text{ион: } 1 - \omega(E_a) = \frac{\exp\left(\frac{E_a - E_F}{kT}\right)}{1 + \exp\left(\frac{E_a - E_F}{kT}\right)}. \text{ Следовательно, отношение}$$

этих вероятностей дает отношение числа ионов к числу нейтралов

$$\text{на расстоянии } x_{кр}: \left. \frac{n_i}{n_a} \right|_{x_{кр}} = \frac{g_i}{g_a} \exp\left(\frac{e\varphi_a - U'_i}{kT}\right). \text{ При } x_{кр} \rightarrow \infty$$

$U'_i = U_i$ , получим формулу Саха – Ленгмюра.

В случае наличия сильного внешнего электрического поля, вытягивающего ионы от поверхности эмиттера, степень ионизации растет в соответствии с уменьшением работы испарения иона с поверхности металла. Если провести те же рассуждения, что и в случае эффекта Шоттки для термоэлектронов, то это уменьшение работы испарения равно  $e^{3/2}\sqrt{E}$ , поэтому зависимость степени ионизации от электрического поля имеет вид

$$\alpha = \alpha_0 \exp\left(\frac{e^{3/2}\sqrt{E}}{kT}\right) = \frac{g_i}{g_a} \exp\left(\frac{e\varphi_a + e^{3/2}\sqrt{E} - U_i}{kT}\right).$$

## 2.6.2. Отрицательная поверхностная ионизация

Некоторые атомы (например, H, O, F, Cl, ...) могут присоединять к себе электроны, превращаясь в отрицательный ион, на разрушение которого (удалить электрон) требуется работа  $eS$ , называемая *спродством электрона к атому*. Можно теоретически показать на примере водорода, что отрицательный ион энергетически устойчив. Действительно, при испарении атома с поверхности нагретого металла на некотором критическом расстоянии  $x_{кр}$ , так же как и в случае положительной поверхностной ионизации, возникает локализованный уровень  $eS$  электрона в системе металл-адатом. При дальнейшем удалении адатома, когда обмен электронами в системе металл-адатом прекращается, если этот уровень будет занят электроном, то с поверхности эмитируется отрицательный ион, если нет, то атом. Следовательно, для степени отрицательной ионизации получим формулу, аналогичную формуле Саха – Ленгмюра:

$$\alpha_n = \frac{n_n}{n_a} = \frac{g_n}{g_a} \exp\left(\frac{e(S - \varphi_a)}{kT}\right).$$

Как правило, для всех атомов величина  $eS \ll e\varphi_a$ , т.е.  $n_n \ll n_a$ , т.е.  $n_a \approx n \Rightarrow \beta_n = \frac{n_n}{n} = \frac{g_n}{g_a} \exp\left(\frac{e(S - \varphi_a)}{kT}\right)$ .

Плотность отрицательного ионного тока

$$j_i = \frac{g_n}{g_i} en \exp\left(\frac{e(S - \varphi_a)}{kT}\right).$$

Экспериментальная проверка этой зависимости в сравнении с положительным поверхностным ионным током затруднена тем, что помимо отрицательных ионов на анод приходят термоэлектроны, и даже в гораздо больших количествах. Лишь применение масс-сепараторов позволяет разделить эти потоки и одновременно измерить плотности тока ионов  $j_n$  и термоэлектронов  $j_e$ . Проведенные эксперименты подтвердили данную зависимость. Измерение угла наклона экспериментальной зависимости  $\ln \frac{j_e}{i_n T^2} = \ln \frac{A_0}{en} - \frac{eS}{kT}$  дает возможность экспериментального определения  $S$ .

## 2.7. Вторичные потоки частиц при взаимодействии пучков ионов с поверхностью твердого тела

### 2.7.1. Отражение

К *отраженным* относятся частицы, которые после взаимодействия с мишенью сохранили какую-то долю своей первоначальной кинетической энергии  $E_0$ . Отражение частиц от поверхности конденсированного вещества характеризуют интегральными и дифференциальными коэффициентами отражения.

К *интегральным характеристикам* относятся коэффициент отражения частиц

$$R_N = N / N_0$$

и коэффициент отражения энергии

$$R_E = \sum_0^N E_i / \sum_0^{N_0} E_0 ,$$

где  $N$  и  $N_0$  – общее число отраженных и упавших на поверхность частиц соответственно, а  $E_i$  и  $E_0$  – энергии отраженных и упавших частиц соответственно. В случае моноэнергетического пучка

$$R_E = \sum_0^N E_i / N_0 E_0 .$$

*Дважды дифференциальный коэффициент отражения* это относительное (к падающему количеству) число частиц, рассеянных в заданном направлении в пределах единичного телесного угла и в единичном интервале энергий

$$d^2 N / dE \cdot d\Omega .$$

Определение этого коэффициента во всем полупространстве характеризует пространственное и энергетическое распределения отраженных частиц. Путем интегрирования дважды дифференциального коэффициента по какому-либо параметру можно получить угловое распределение рассеянных частиц безотносительно к энергии:

$$I_\Omega = \int_0^{E_0} \frac{d^2 N}{dE d\Omega} dE \quad (2.7)$$

или интегральное по углам энергетическое распределение:

$$\frac{dN}{dE} = \int_{\Omega} \frac{d^2N}{dEd\Omega} d\Omega. \quad (2.8)$$

Отраженные частицы могут находиться в различных состояниях возбуждения и ионизации. *Зарядовая фракция*  $\eta_v^i$  может определяться как отношение дважды дифференциального коэффициента отражения частиц, находящихся в том или ином зарядовом состоянии  $i$  или состоянии возбуждения электронной системы  $v$  отлетающей частицы, к интегральному значению этого же коэффициента, определенного по всем зарядовым состояниям. Кроме того, зарядовой фракцией иногда считают отношение интегрального по энергиям числа частиц, рассеянных в заданном направлении в данном зарядовом состоянии, к суммарному по зарядам числу частиц, рассеянных в этом же направлении:

$$\eta_{\Omega}^i = N^i / N^{\Sigma}.$$

Кинематика в классическом представлении парного соударения падающих атомных частиц (характеризуемых атомным номером  $Z_1$  и массой  $M_1$ ) с атомами вещества ( $Z_2, M_2$ ) (рис. 2.66) дает следующие значения энергии  $E_1$  рассеянной на угол  $\vartheta_1$  частицы:

$$E_1 = E_0 \left( \frac{M_1}{M_1 + M_2} \right)^2 \times \left( \cos \vartheta_1 \pm \sqrt{\left( \frac{M_2}{M_1} \right)^2 - \left( \frac{M_2}{M_1} \right) \left( \frac{M_1 + M_2}{M_1} \right) \frac{Q}{E_0} - \sin^2 \vartheta_1} \right)^2, \quad (2.9)$$

где  $Q$  – неупругая часть потери энергии в единичном акте соударения.

Энергия атома отдачи:

$$E_2 = E_0 \frac{M_1 M_2}{(M_1 + M_2)^2} \left( \cos \vartheta_2 \pm \sqrt{\cos^2 \vartheta_2 - \left( \frac{M_1 + M_2}{M_2} \right) \frac{Q}{E_0}} \right)^2. \quad (2.10)$$

Как правило, неупругие потери энергии малы по сравнению с начальной энергией частицы  $Q/E_0 \ll 1$ . При  $Q = 0$  максимально

возможная потеря энергии налетающей частицей в парном соударении составляет:

$$E_2 = E_0 \frac{4M_1M_2}{(M_1 + M_2)^2} \equiv \zeta E_0. \quad (2.11)$$

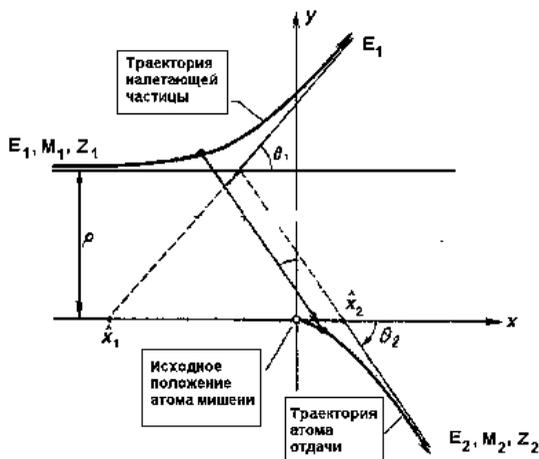


Рис. 2.66. Кинематика парного соударения в лабораторной системе координат

Выражения (2.9) и (2.10) определяют максимальную энергию частиц, отраженных от поверхности твердого тела (ТТ) или выбитых из него в результате однократного соударения с атомом среды, находящимся на ее поверхности (и поэтому часто используются при анализе атомного состава поверхности методами ионного

рассеяния). Для вычисления  $Q$  при рассеянии на малые углы и при разнице атомных номеров взаимодействующих частиц не более чем в четыре раза используют полученную Фирсовым в приближении Томаса – Ферми формулу

$$Q = \frac{4,3 \cdot 10^{-8} (Z_1 + Z_2)^{5/3} v_0}{\left[1 + 3,1 \cdot 10^7 (Z_1 + Z_2)^{1/3} R_0\right]^5}, \quad (2.12)$$

где  $v_0$  – скорость налетающей частицы, см/с;  $Q$  выражено в электрон-вольтах;  $R_0$  – расстояние наибольшего сближения, см.

Частицы, испытавшие больше одного соударения с атомами поверхности и отраженные на тот же угол, теряют энергии меньше, чем получается по соотношению (2.9). Если же энергии частицы достаточно, чтобы проникнуть в глубь вещества, то она рассеивается в последовательности соударений с атомами среды и тормозится, возбуждая электронные системы отдельных атомов или ТТ как целого, а также теряя энергию в упругих соударениях с отдель-

ными атомами среды или их ансамблями (многочастичное взаимодействие). Таким образом, отражение является многопараметрической задачей, для решения которой применяются различные модельные представления, включая парные взаимодействия частиц; их торможение в непрерывной среде; многократные соударения, описываемые кинетическим уравнением; многочастичные взаимодействия, описываемые классической или квантовой механикой.

В области низких энергий частиц, сравнимых с энергией связи атомов в решетке, часто используется метод молекулярной динамики (МД), когда одновременно решаются уравнения движения падающей частицы и атомов среды, при больших энергиях эффективно приближение последовательных парных соударений (ППС). Оба подхода реализованы в доступных компьютерных кодах, например метод МД в доступном через Интернет коде SIMULATION KIT, а метод ППС в коде TRIM-95, SRIM, MARLOWE и др., в частности в разработанном в МИФИ коде SCATTER.

### *Интегральные коэффициенты отражения*

Вероятность отражения растет по мере увеличения атомного номера мишени, уменьшения начальной энергии и угла рассеяния. Если энергию  $E$  падающей частицы выразить в виде безразмерной энергии  $\epsilon$  в соответствии с выражением (1.53) из разд. 1.6, то значения  $R_N$  для разных комбинаций легких ионов и мишеней и падения частиц по нормали к мишени по данным измерений разных авторов приближенно соответствуют некоей «универсальной зависимости» (рис. 2.67). Приближенно  $R_N$  можно найти по аппроксимационной формуле:

$$R_N = 0,19 - 0,237 \log \epsilon, \quad 10^{-3} < \epsilon < 5. \quad (2.13)$$

Одними из самых простых аппроксимаций, учитывающих также зависимость коэффициентов отражения легких ионов от угла падения частиц и справедливых в интервале  $0,01 < \epsilon < 1,0$  с точностью  $\sim 30\%$ , являются следующие:

$$R_N \approx \exp(-2,5 \epsilon^{1/2} \cos \vartheta_0) \quad (2.14a)$$

$$R_E \approx 0,66 \exp(-2,3 \epsilon^{1/2} \cos \vartheta_0), \quad (2.14б)$$

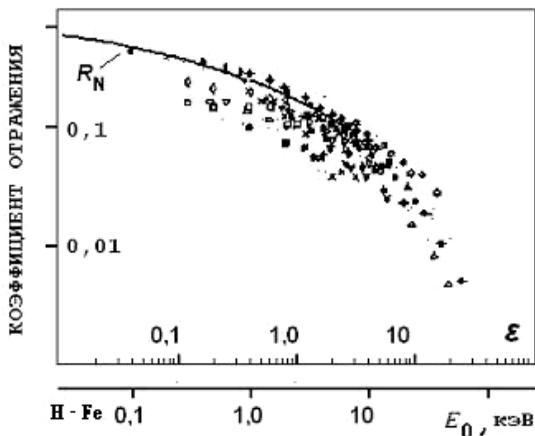


Рис. 2.67. Зависимость коэффициента отражения частиц от разных материалов (эксперименты) как функция безразмерной энергии  $\epsilon$ . Сплошная кривая – компьютерное моделирование. Нижняя шкала соответствует энергии протонов, бомбардирующих мишень из железа

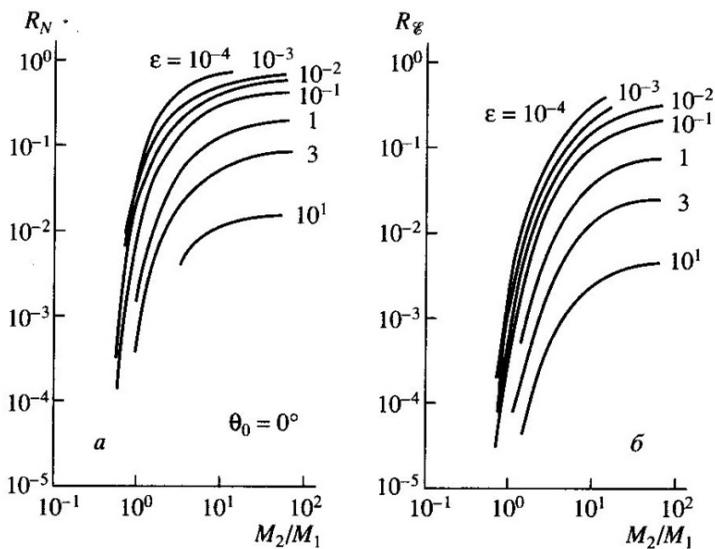


Рис. 2.68. Компьютерные расчеты по программе TRIM коэффициентов отражения частиц и энергии в зависимости от отношения массы атома мишени  $M_2$  и налетающей частицы  $M_1$  при различных значениях энергии  $\epsilon$

Для более тяжелых налетающих частиц таких простых аппроксимаций нет, и значения этих величин удобнее всего получить из результатов компьютерного моделирования с помощью хорошо апробированных программ, например TRIM. Из результатов подобных вычислений (рис. 2.68), находя значение безразмерной энергии  $\epsilon$ , можно определить значения  $R_N$  и  $R_E$  практически для любых комбинаций ион-мишень в случае падения налетающих частиц по нормали к поверхности. В качестве ориентировочной оценки значения  $R_E$  (с 30 %-й точностью) можно использовать простую аппроксимацию  $R_E \approx (R_N)^2$ .

В области энергий ниже 100 эВ экспериментальных данных весьма мало. Компьютерное моделирование с учетом дополнительной поверхностной энергии связи  $E_s$  ионов с атомами мишени предсказывает уменьшение коэффициентов отражения при энергии падающих частиц меньшей  $3E_s$ . Поэтому наличие на поверхности химически активных к падающим ионам компонентов может чрезвычайно сильно повлиять на значения  $R_N$  и  $R_E$ , которые в интервале нескольких электрон-вольт могут изменяться в зависимости от состояния поверхности на порядок по величине (рис. 2.69).

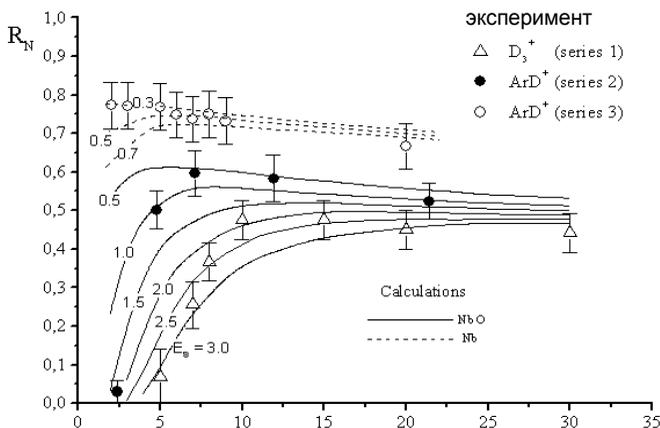


Рис. 2.69. Коэффициенты отражения дейтерия от ниобиевой мишени: треугольник соответствует наименее чистой мишени, пустые кружочки – наиболее чистой, кривые – расчет по программе бинарных соударений SCATTER при различных значениях энергии связи  $E_s$

Для случая, когда масса налетающей частицы сравнима или больше массы атома мишени  $M_1/M_2 > 1$ , коэффициенты отражения даже в отсутствие химического сродства ( $E_s = 0$ ) при малых энергиях ( $\epsilon < 10^{-3}$  для  $M_1/M_2 \geq 1$ ) уменьшаются.

Угловые распределения отраженных частиц меняются от косинусоидального при облучении мишени по нормали к поверхности до близкого к зеркальному (рис. 2.70).

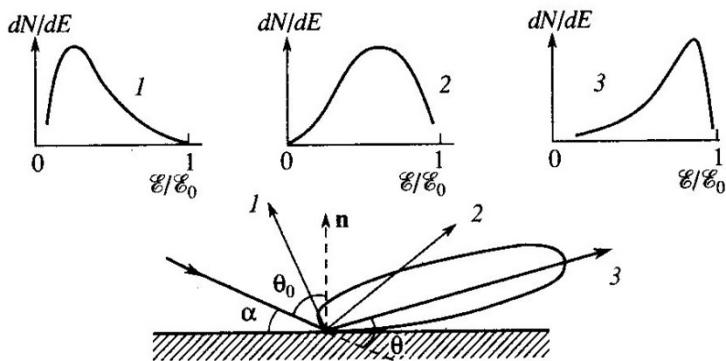


Рис. 2.70. Энергетические спектры частиц, рассеянных на разные углы, и угловое распределение отраженных частиц при скользящем падении. Номера спектров соответствуют направлению вылета частиц из мишени

Аналитические теории, эксперимент и компьютерное моделирование показывают, что при  $M_1/M_2 \ll 1$  закон отражения от гладкой поверхности достаточно быстрых частиц является универсальным со значением наиболее вероятного угла рассеяния  $\vartheta_m$ , меньшим угла зеркального отражения  $\vartheta_m \approx 1,75\alpha$ . Шероховатость изменяет закон отражения частиц, приближая его к диффузному. При малых энергиях и больших значениях  $M_1/M_2$  база экспериментальных данных весьма ограничена, и основные сведения о характере угловых распределений можно получить компьютерным моделированием.

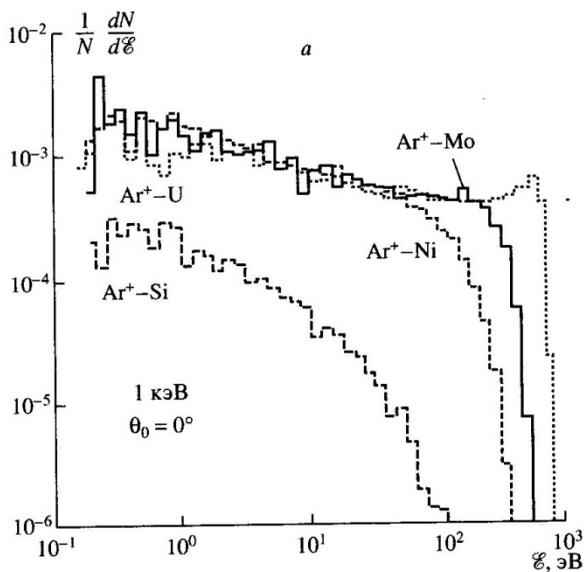
Энергетические распределения отраженных частиц определяются соотношением между сечениями торможения (упругого и неупругого) и рассеяния при столкновении налетающих частиц с атомами среды. Сечения упругого и неупругого торможения поразному зависят от энергии (рис. 1.84, разд. 1.6), а сечение рассея-

ния с ростом энергии всегда уменьшается. Поэтому энергетические спектры отраженных частиц зависят от атомных номеров атомов среды и налетающих частиц, их энергии, угла вылета из мишени (по отношению к первоначальному направлению их движения). При скользких углах падения, больших атомных номерах мишени и падающей частицы, малых начальных энергиях частицы отражаются, не успев потерять заметную долю энергии внутри твердого тела и, наоборот, для легких ионов, мишеней с малым атомным номером, больших энергиях и углах отражения спектры сдвигаются в область меньших энергий (см. рис. 2.70). При этом наиболее вероятная энергия отраженных частиц (соответствующая положению максимума в спектре) может на порядок и более отличаться от энергии падающих ионов.

### *Влияние параметров мишени на отражение*

Наиболее важным параметром, влияющим на кинетические характеристики отражения, является топография поверхности: ее микроструктура и рельеф (шероховатость). Как показали эксперименты и компьютерное моделирование с разными моделями шероховатости, последняя мало влияет на параметры отражения при падении частиц по нормали к мишени.

Измеренные и рассчитанные коэффициенты отражения отличаются незначительно, за исключением случаев, когда рельеф поверхности сильно развит (как, например, на некоторых материалах, производимых путем вакуумного осаждения или специально подвергнутых обработке с целью создания глубокоразвитого рельефа). Следует отметить, что для сильноразвитого рельефа при падении пучка по нормали коэффициенты отражения могут даже возрастать по сравнению с гладкой поверхностью. В общем же случае наличие шероховатости приводит к более слабой зависимости  $R_N$  и  $R_E$  от угла падения частиц. При наклонном падении частиц наиболее сильно трансформируются угловые распределения отраженных частиц (рис. 2.71), в то время как форма энергетических спектров меняется незначительно. Следует отметить, различным типам рельефа соответствует свой закон отражения (зависимость наиболее вероятного угла отражения от угла падения), поэтому предсказать заранее влияние того или иного типа рельефа на параметры отражения весьма затруднительно.



$I$ , отн. ед.

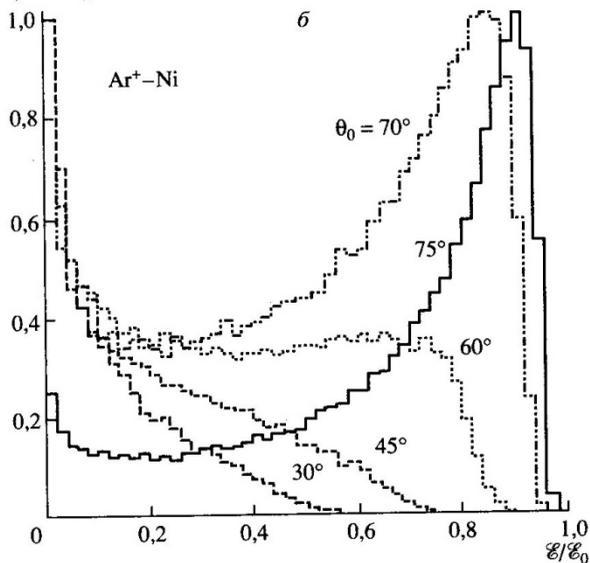


Рис. 2.71. Энергетические спектры отраженных частиц при облучении ионами аргона с энергией 1 кэВ: *a* – мишеней из различных материалов по нормали к поверхности; *б* – при различных углах падения на никелевую мишень (компьютерное моделирование)

Вторым по важности фактором является изменение состава поверхности за счет адсорбции атомов и молекул из газовой фазы, за счет имплантации бомбардирующих поверхность частиц, а также в результате обогащения поверхности при прогреве содержащимися в объеме материала примесями (рис. 2.72).

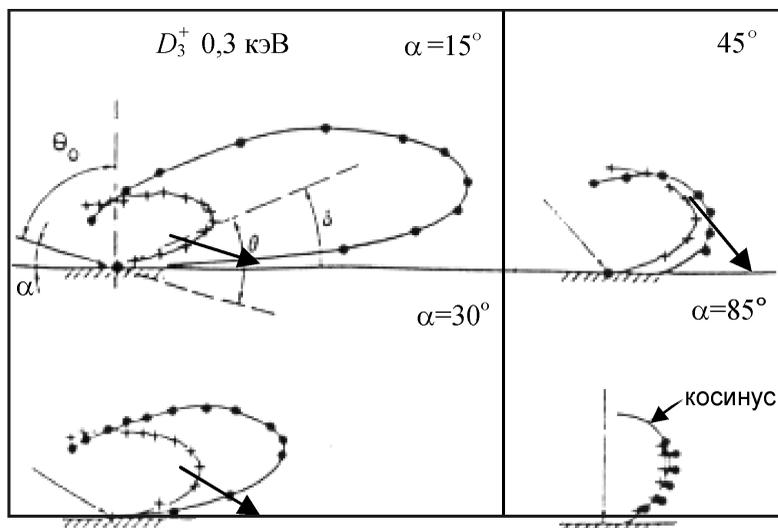


Рис. 2.72. Отражение ионов  $D_3^+$  0,3 кэВ от механически шлифованной мишени из вольфрама при разных углах падения пучка вдоль (черные кружки) и поперек (крестики) направления обработки

### 2.7.2. Распыление

*Коэффициент распыления*  $Y$  определяют как отношение числа распыленных атомов ТТ к числу бомбардирующих ионов (атомов). Коэффициент распыления зависит от атомного номера и массы ионов, их энергии, угла падения, а также от материала и температуры мишени. *Физическое распыление* имеет место, если причиной распыления является кинетическая энергия бомбардирующих частиц. При этом рассматриваются три основных механизма:

- 1) линейных каскадов атомных столкновений;
- 2) прямого выбивания атомов мишени падающими частицами;
- 3) термических пиков.

Таким образом, на величину коэффициента распыления влияет не только величина переданной атомам твердого тела энергии, но и вероятность их эмиссии с поверхности, что определяет характерный вид зависимости  $Y(E)$  с максимумом и пороговой энергией, ниже которой распыление не происходит (рис. 2.73).

Для расчета коэффициентов распыления применяется целый ряд компьютерных кодов, наиболее известные и доступные из которых TRIM.SP и TRIDYN; последний позволяет также учитывать изменение стехиометрического состава мишени в процессе облучения и эффекты динамического перемешивания разных атомов под действием ионной бомбардировки. Следует, однако, иметь в виду, что экспериментальные измерения коэффициентов распыления имеют большой разброс, поэтому моделирование описывает опытные данные с точностью до фактора 2.

На рис. 2.73 приведены значения коэффициентов распыления никеля ионами различной массы в зависимости от их энергии при

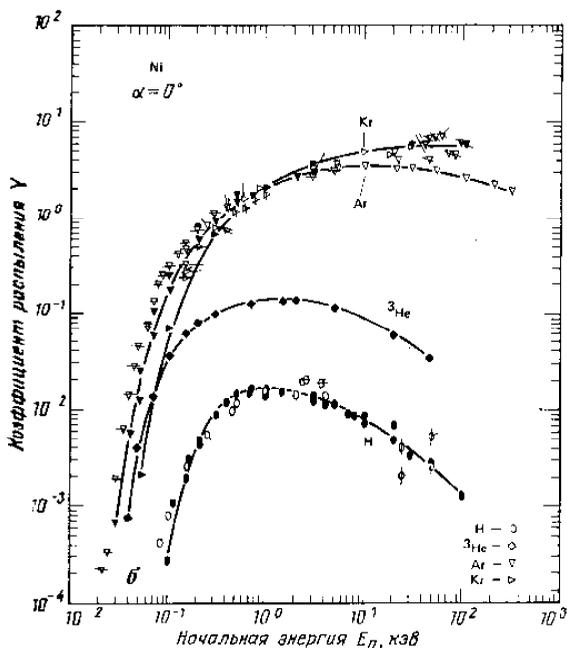


Рис. 2.73. Зависимость коэффициентов распыления никеля от энергии для падающих по нормали ионов разной массы. Затемненные символы – результаты расчета с помощью кода TRIM.SP

нормальном падении частиц на мишень. Видно, что если для пучков легких ионов даже в максимуме (при энергии порядка 1 кэВ) на каждые сто падающих протонов расплывается лишь один атом поверхности, то для тяжелых ионов коэффициент распыления может существенно превышать единицу, что и используется при травлении материалов ионными пучками.

Общий характер зависимости коэффициента распыления  $Y$  от параметров взаимодействия может быть выражен эмпирической формулой:

$$Y = \left( \frac{20E}{U} \right) \cdot \left( \frac{M_1}{M_2} \right) \cdot \left( \frac{Z_1 Z_2}{E + 50Z_1 Z_2} \right)^2, \quad (2.15)$$

где энергия падающих частиц  $E$  и энергия связи  $U$  поверхностных атомов выражены в электрон-вольтах ( $U$ , как правило, полагают равной энергии сублимации, отнесенной к одному атому). Максимум  $Y$  имеет место при энергиях  $E_m \approx 50Z_1 Z_2$  эВ. Для легких ионов (H, D, He) коэффициент распыления лежит в диапазоне  $Y(E_m) \approx 10^{-3} - 10^{-2}$  ат./ион. Для тяжелых ионов  $Y(E_m)$  достигает значений  $\geq 10$  ат./ион.

Часто для определения  $Y$  используют формулу Бодански, которая хорошо описывает результаты измерений:

$$Y = Q \cdot S_n(E_0) \cdot \left[ 1 - \left( \frac{E_{th}}{E_0} \right)^{2/3} \right] \cdot \left[ 1 - \left( \frac{E_{th}}{E_0} \right)^2 \right]. \quad (2.16a)$$

Здесь  $S_n(E_0)$  – сечение упругого торможения (см. (1.57), разд. 1.6);  $E_{th}$  – пороговая энергия распыления;  $Q$  – множитель, который зависит от  $M_1$ ,  $M_2$  и  $E_{th}$ . (см. прил. 2). В удобном для практического применения виде при  $E/E_{th} < 20$

$$Y = 6,4 \cdot 10^{-3} \zeta^{5/3} M_2 \left( \frac{E}{E_{th}} \right)^{1/4} \left[ 1 - \left( \frac{E_{th}}{E} \right)^{7/2} \right]. \quad (2.16б)$$

Порог распыления с точностью до множителя 2 может быть оценен из эмпирических соотношений:

$$E_{th} = \frac{U}{\zeta(1-\zeta)} \quad \text{при} \quad M_1 \leq 0,3 \cdot M_2, \quad (2.17a)$$

$$E_{th} = 8 \cdot U \left( \frac{M_1}{M_2} \right)^{5/2} \quad \text{при} \quad M_1 \geq 0,3 \cdot M_2, \quad (2.176)$$

где  $\zeta$  определена в (2.11).

Для легких ионов, попадающих на мишени с большим атомным номером, порог распыления определяется энергией, которая может быть передана атому мишени

$$E_{th} = \frac{(M_1 + M_2)^4}{4M_1M_2(M_1 - M_2)^2} U. \quad (2.18)$$

При малых энергиях вблизи порога коэффициент распыления  $Y(E)$  может быть аппроксимирован формулой:

$$Y = \frac{11,3 \cdot 10^{-8}}{M_2 \cdot \zeta^{5/3}} \left( \frac{E}{E_{th}} \right)^{1/4} \left( 1 - \frac{E_{th}}{E} \right)^{7/2}. \quad (2.19)$$

Значение коэффициента распыления периодически меняется по мере увеличения атомного номера материала мишени (рис. 2.74)

$Y$ , ат./ион

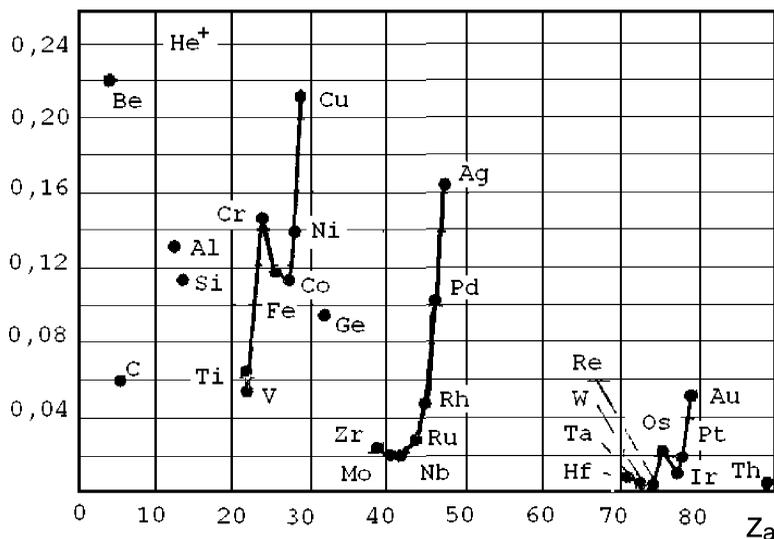


Рис. 2.74. Зависимость коэффициента распыления от атомного номера мишени (для ионов  $He^+$  с энергией 400 эВ)

в силу зависимости  $Y$  от энергии связи  $U$ , которая периодически зависит от  $Z_2$  (см. прил. 2), минимуму  $U(Z_2)$  соответствует максимум  $Y(Z_2)$ . Значения  $Y$  минимальны для материалов из атомов с незаполненными электронными  $p$ - и  $d$ -оболочками: тугоплавких W, Re, Ta, затем Zr, Mo и Nb, при меньших  $Z_2$  для Ti, V и, наконец, C, а максимальны для Cu, Ag и Au.

Для сплавов или соединений в формулах (2.15) – (2.19) в первом приближении можно использовать средние значения  $Z_2$  и  $M_2$ , а в качестве энергии связи  $U$  брать энергию атомизации. В принципе, многокомпонентные материалы подвержены селективному распылению, т.е. преимущественному распылению одной или нескольких компонент. В стационарном же состоянии распыления, при условии отсутствия сильной сегрегации диффузии из объема, состав поверхности должен соответствовать стехиометрическому составу мишени. Ситуация меняется в области энергий, близких к порогу распыления. В этом случае одна из компонент мишени может распыляться падающим пучком, в то время как для другой, существенно отличающейся по массе, энергия падающих частиц может оказаться ниже порога распыления.

В процессе облучения происходит также насыщение поверхностного слоя имплантированными атомами. В этом случае, например, изначально однокомпонентную мишень можно рассматривать как двухкомпонентную с соответствующими парциальными выходами распыленных компонент.

Одновременное облучение разными ионами (например, ионами дейтерия и 3-зарядными ионами углерода, что характерно для пристеночной плазмы термоядерных установок) дает весьма сложную картину распыления. Действительно, низкоэнергетичные ионы углерода вплоть до энергий, когда коэффициент самораспыления превысит единицу, осаждаются на мишени. Поэтому в зависимости от процентного содержания ионов  $C^{3+}$  в потоке падающих на мишень частиц, а также их энергии и дозы облучения происходит рост слоя углерода либо эрозия мишени.

С увеличением угла падения вплоть до  $\theta_0 \leq 70^\circ$  коэффициент распыления увеличивается приблизительно как

$$Y \sim \left( \frac{1}{\cos \theta_0} \right)^Y, \quad (2.20)$$

где  $v$  меняется в зависимости от энергии и вида иона в интервале  $1 < v < 2$ . После достижения максимального значения  $Y_{\max}$  при  $\theta_0 \approx 70 - 80^\circ$  коэффициент распыления резко убывает из-за отражения ионов при скользющем падении на поверхность твердого тела. Отношение  $Y_{\max}/Y_0$ , где  $Y_0$  – коэффициент распыления при  $\theta_0 = 0$ , тем больше, чем больше энергия иона (рис. 2.75) и меньше масса иона по сравнению с массой атомов мишени. Резкое увеличение коэффициента распыления при касательном падении необходимо учитывать в случаях, когда пучки частиц (ионов или перезарядившихся нейтралов) могут бомбардировать элементы конструкции или ионно-оптической системы установки под малыми к поверхности углами, осаждение распыленных атомов на изоляторах снижает их диэлектрические свойства.

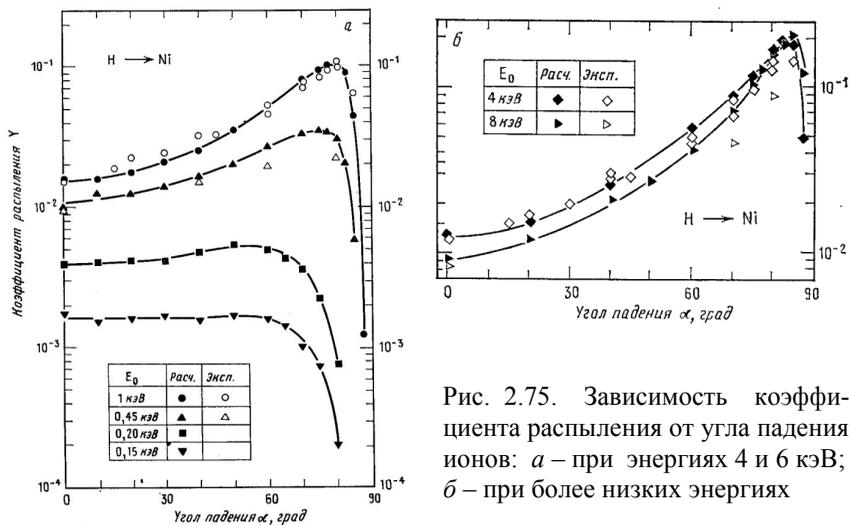


Рис. 2.75. Зависимость коэффициента распыления от угла падения ионов: а – при энергиях 4 и 6 кэВ; б – при более низких энергиях

Коэффициент физического распыления практически не зависит от температуры мишени вплоть до высоких температур  $T > 0,7T_{\text{пл}}$ . Резкое увеличение коэффициента физического распыления при этих температурах связывают с тем, что распыляться начинают слабосвязанные междоузельные атомы. Такой процесс можно отнести к радиационно-ускоренной сублимации.

При повышенной температуре  $T \sim 1000^\circ\text{C}$  ( $T \sim 0,3T_{\text{пл}}$ ) может также наблюдаться и подпоговое распыление (распыление ионами с энергией меньше пороговой). Так, коэффициент распыления поликристаллического вольфрама при облучении ионами дейтерия с энергией 5 эВ в плотной плазме оказался равным значению  $Y$ , характерному для ионов дейтерия с энергией 250 эВ. При этом на поверхности у границ зерен наблюдалось образование волнистой структуры (рис. 2.76).

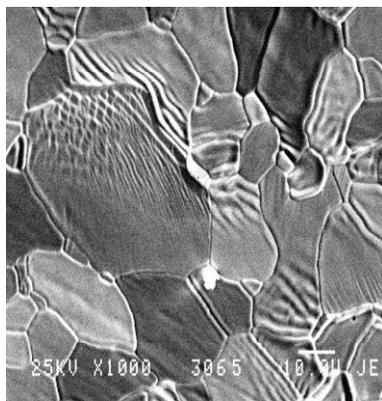


Рис. 2.76. Поверхность мишени поликристаллического образца (W-0,04 % Mo) после облучения при  $T = 1470\text{ K}$  ионами дейтерия низкой энергии в плазме с плотностью потока  $5 \cdot 10^{21}\text{ м}^{-2}\text{ с}^{-1}$  при дозе облучения  $- 5 \cdot 10^{25}\text{ м}^{-2}$

Данный эффект объяснен потенциальным распылением ионами слабосвязанных адсорбированных атомов вольфрама, которые при повышенной температуре поступают на поверхность из пространства между зернами (в результате освобождения из ловушек междоузельных атомов). Значительная концентрация на поверхности таких атомов связана с существенно большими значениями коэффициента их поверхностной диффузии по сравнению с атомами решетки. Однако следует иметь в виду, что концентрация междоузельных атомов в пространстве между зернами может зависеть от технологии изготовления материала.

Энергетический спектр распыленных частиц зависит от природы распыления. При физическом распылении наиболее вероятная энергия распыленных атомов соответствует  $\sim U$ , а высокоэнергетическая часть простирается вплоть до максимальной переданной энергии, определяемой (2.11), уменьшаясь с энергией  $\sim E^{-2}$  (рис. 2.77). Из рис. 2.78 можно видеть, что максимум энергии распыленных частиц сдвигается в низкоэнергетичную область при высокой температуре мишени (см. рис. 2.77, а) или при бомбардировке тяжелыми ионами. Это можно объяснить исходя из представлений об образовании термического пика, когда смещенные из своих

положений атомы отдачи решетки твердого тела, сталкиваясь друг с другом, формируют некую локальную область высокой температуры. Такая модель справедлива при больших каскадах в мишени, когда коэффициент распыления  $Y > 10$ . При этом  $Y$  перестает линейно зависеть от сечения упругого торможения (см. (2.16)):  $Y \propto S_n^\alpha$ , где  $\alpha > 1$ .

С увеличением энергии ионов, угла падения ионов и угла вылета средняя энергия распыленных атомов растет. При эмиссии под действием ионной бомбардировки слабосвязанных атомов или продуктов разложения химических соединений их энергетический спектр более узкий, чем при физическом распылении, и смещен в область низких энергий.

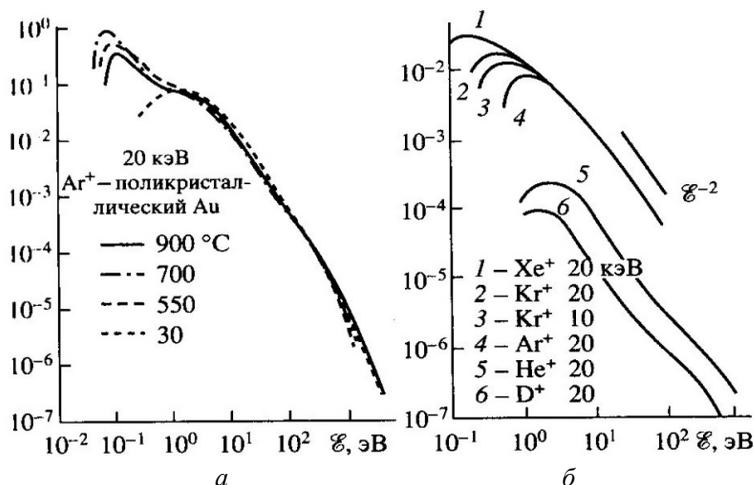


Рис. 2.77. Энергетические спектры распыленных частиц золота при изменении температуры мишени (а) и массы бомбардирующего иона (б)

Угловое распределение распыленных атомов для энергий  $E > 1$  кэВ подчиняется закону косинуса (см. рис. 2.78). При уменьшении энергии ( $E < 1$  кэВ) это распределение трансформируется с преобладанием количества атомов, распыленных ближе к поверхности твердого тела. Для не слишком высоких энергий, при наклонном падении ионов, наблюдается преимущественное распыление в направлении, близком к зеркальному, все более доминирующее по мере увеличения угла падения.

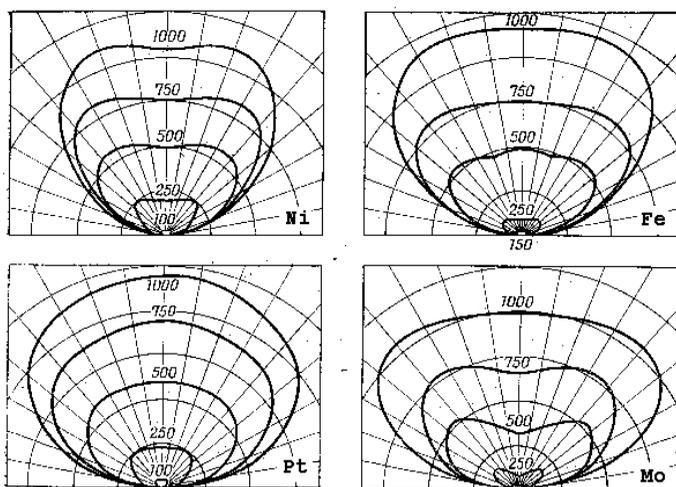


Рис. 2.78. Полярные диаграммы распыленного вещества мишеней (Ni, Fe, Pt и Mo) при их облучении ионами ртути с энергией 100 – 1000 эВ по нормали к поверхности

Распределение по массам распыленных частиц (рис.2.79) зависит от массы падающего иона. С ростом  $M_1$  общее количество частиц, распыляемых в виде кластеров, возрастает, как и максимальная масса выбиваемого кластера. По мере роста числа атомов в кластере их средняя энергия быстро убывает. Так, если для распыленных ионов вольфрама она спадает как  $E^{-2}$ , то для димеров  $W_2^+$  энергетический спектр убывает как  $E^{-3}$ , а для ионов  $W_3^+$  как  $E^{-4}$ .

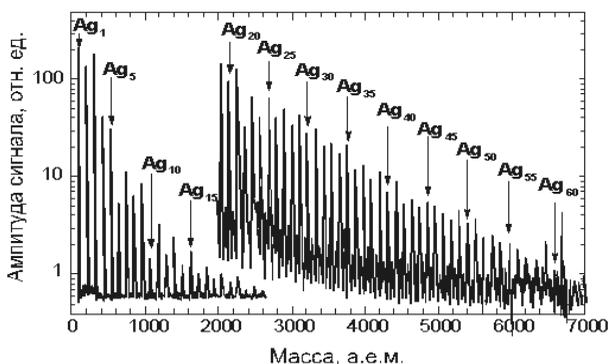


Рис. 2.79. Распределение по массам продуктов распыления при облучении Ag мишени ионами  $Xe^+$  с энергией 15 кэВ

При возможности образования из бомбардирующих частиц и атомов мишени летучих соединений (как это, например, может происходить для водорода и углерода) возможно так называемое химическое распыление материала (рис. 2.80).

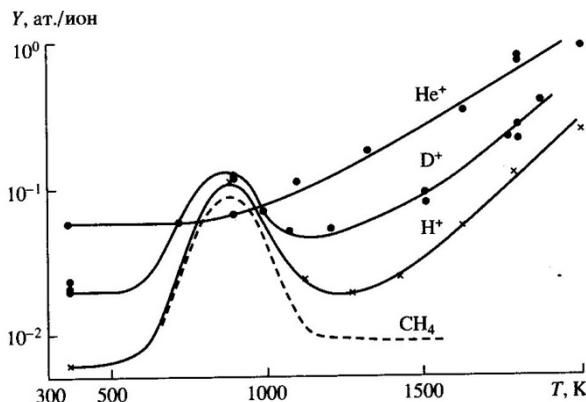


Рис. 2.80. Эффективный коэффициент распыления графита под действием ионов водорода и гелия в зависимости от температуры мишени

Как видно из рис. 2.80, для гелия коэффициент распыления до некоторой температуры постоянен, а затем начинает увеличиваться за счет радиационно-ускоренной сублимации. В случае же водорода при температуре  $\sim 800\text{ }^\circ\text{C}$  происходит интенсивное образование метана. Эрозия материала в этом случае, как всякая химическая реакция, имеет максимум при определенной для каждой пары взаимодействующих атомов температуре, однако значение этой температуры может зависеть от энергии бомбардирующих частиц (рис. 2.81) и плотности их потока.

Как ясно из природы этого процесса, в отличие от физического распыления химическое распыление не имеет порога по кинетической энергии частиц и наблюдается даже при тепловых энергиях падающих частиц, особенно если последние химически активны, как, например, атомарный водород или же радикалы.

Так, коэффициент химического распыления графитов в водородной плазме (в стационарном режиме) может быть представлен в виде

$$Y_{\text{chem}} = Y_{\text{surf}} + Y_{\text{therm}} (1 + DY_{\text{phys}}),$$

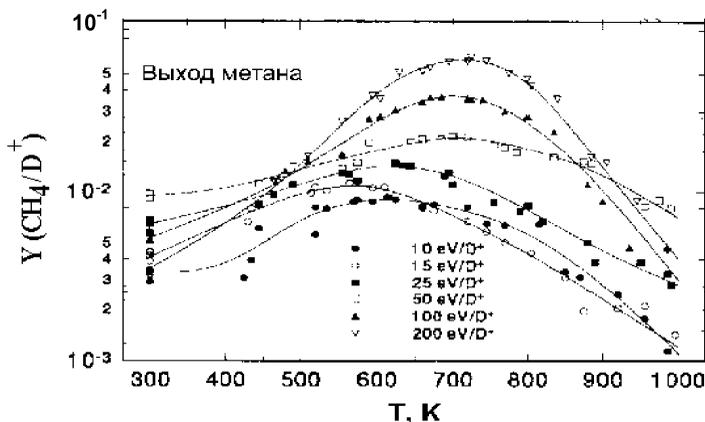


Рис. 2.81. Выход метана как функция температуры при облучении графитовой мишени потоком плазмы с разной энергией частиц

где  $Y_{\text{surf}}$  – коэффициент десорбции с поверхности образовавшихся на ней и потому слабосвязанных с ней углеводородов.  $Y_{\text{surf}}$  пропорционален концентрации углеводородов на поверхности и коэффициенту их физического распыления падающим потоком, член  $Y_{\text{therm}}$  определяется скоростью образования комплексов  $\text{CH}_3$  из промежуточных состояний углеродных атомов на поверхности с незаполненными водородом связями. Эта скорость, в свою очередь, помимо скорости собственно химической реакции зависит от сечений присоединения атома водорода к промежуточному состоянию комплекса, а также от сечения образования молекулярного водорода и, соответственно, вероятности его термической десорбции.  $D$  – коэффициент, зависящий от массы изотопа водорода,  $Y_{\text{phys}}$  – коэффициент физического распыления. Общий коэффициент распыления равен сумме  $Y_{\text{phys}}$  и  $Y_{\text{chem}}$ .

Особое значение в эрозии материалов имеет их взаимодействие с кислородом, образующим химические соединения с большим числом конструкционных материалов и всегда в небольших количествах, содержащимся в остаточной атмосфере установок. С одной стороны, оксиды металлов ( $\text{Al}_2\text{O}_3$ ,  $\text{W}_2\text{O}_5$ ,  $\text{BeO}$  и др.) имеют значительно меньший коэффициент физического распыления, чем чистые металлы. С другой стороны, в отличие от физического распыления, образование летучих соединений компонентов

облучаемого материала (например, типа CO или CO<sub>2</sub> при облучении кислородом графита) резко увеличивает эрозию последнего (рис. 2.82), когда каждый попадающий на поверхность атом кислорода приводит к эмиссии атома углерода. Для материалов (Mo, W, Be и др.), образующих с кислородом устойчивые соединения, динамика распыления оказывается критически зависящей от наличия в камере кислорода и температуры как распыляемого материала, так и окружающих его элементов установки.

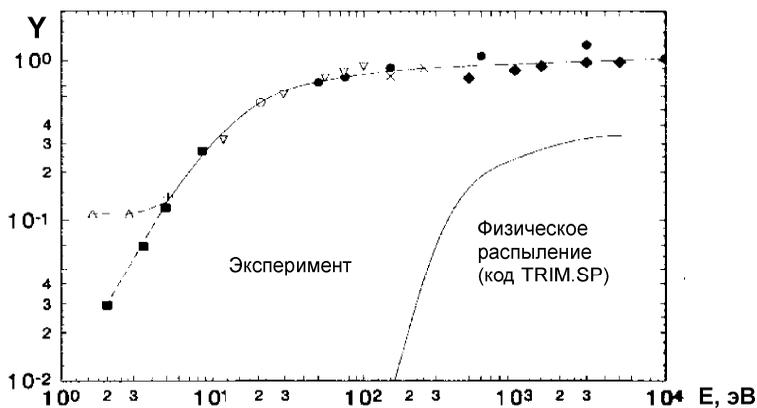


Рис 2.82. Распыление графита ионами и атомами кислорода в зависимости от их энергии в сравнении с физическим распылением

### 2.7.3. Другие механизмы образования вторичных частиц под действием пучков

Эрозия подвергающегося облучению пучками частиц материала может происходить и за счет других процессов. Прежде всего, это обычное испарение металлов или сублимация (для графита) при больших тепловых потоках, скорость такой эрозии можно найти в справочниках. При очень больших мощностях падающего на поверхность пучка  $\sim 100 \text{ МВт/м}^2$  происходит плавление или возгонка материала, он может разбрызгиваться и разрушаться в виде макроскопических кластеров размерами от сотых долей до десятков микрометров (рис.2. 83). В процессе взаимодействия мощного потока частиц из материала мишени образуется плотная плазма, частично экранирующая поверхность от падающего потока, при этом эрозия

материала может ослабевать во много раз. Эмиссия мелких зерен графита размером от 0,01 до 40 мкм под действием интенсивных тепловых потоков плазмы возможна из-за возникновения упругих термонапряжений в силу анизотропии упругих и тепловых свойств последнего, если напряжение между зернами превосходит предел прочности. Энергия упругой деформации, запасенная в зерне, переходит в его кинетическую энергию, придавая субмикронным частицам скорость  $\sim 10^4$  см/с. Для частиц же больших размеров эта скорость в несколько раз меньше.

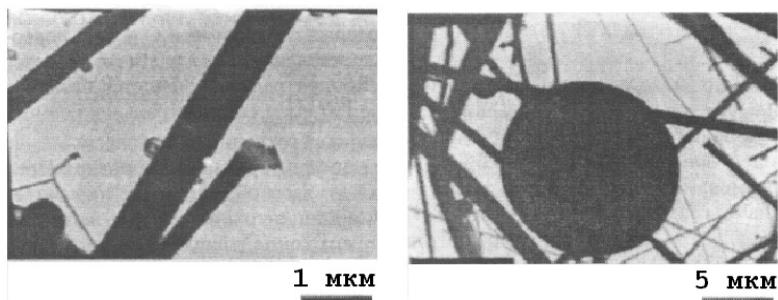


Рис. 2.83. Частицы пыли, осевшие в базальтовом фильтре после облучения графита мощным потоком частиц

К нетрадиционным механизмам эрозии относятся *распыление электронами* и *неупругое (потенциальное) распыление*, в том числе многозарядными ионами, макроскопическая деструкция материалов при облучении пучками газовых ионов за счет трансформации поверхности в виде *блистеринга* и *флексинга*.

В экспериментах с моноэнергетическими пучками ионов гелия на поверхности металлических мишеней после некоторых доз облучения были замечены вздутия или блистеры (рис. 2.84).

Появление их связано с тем, что при определенной концентрации внедрившихся частиц в зоне торможения под поверхностью образуются газовые пузыри. Превышение в них давления над пределом прочности оболочки твердого тела, ограничивающей такой газовый пузырь со стороны вакуума, приводит к разрыву оболочки с освобождением внедрившегося газа. Тонкостенная (порядка глубины пробега ионов) оболочка в отличие от массивного элемента

резко меняет теплопроводность материала на его поверхности. Под действием приносимой пучком мощности может происходить перегрев этой оболочки и испарение. Для хрупких веществ разрушение материала за счет накопления в нем газа происходит в виде флешинга, когда в отличие от пластичных материалов с поверхности слетает вся «крышка» сдерживавшего давление материала.

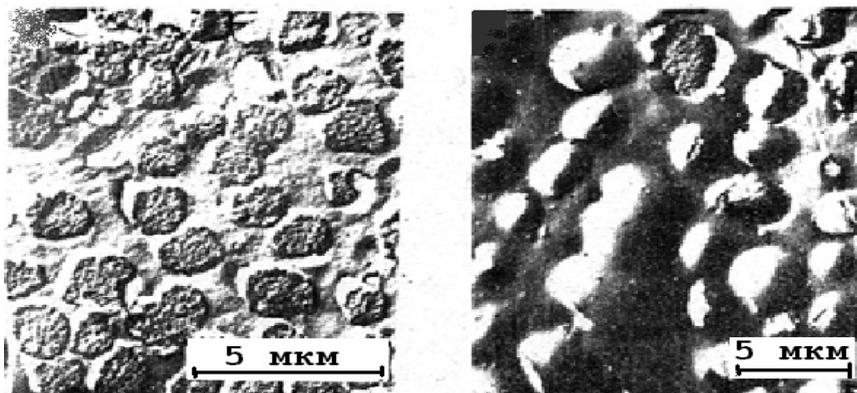


Рис. 2.84. Поверхность нержавеющей стали после облучения ионами  $\text{He}^+$  с энергией 20 кэВ и дозой  $10^{17} \text{см}^{-2}$  (справа) и  $10^{18} \text{см}^{-2}$  (слева)

Следует также иметь в виду, что при нагреве поверхность насыщенных газом электродов также может трансформироваться с образованием подповерхностных газовых пузырей.

Из-за малой массы электрон может передать атому мишени лишь малую часть своей энергии (см. формулу (2.11)), поэтому эмиссия атомов возможна за счет других механизмов передачи энергии, например при образовании и распаде в кристаллическом твердом теле экситонов (пары связанных электрона и дырки). Вероятность такого процесса довольно велика для щелочно-галогидных кристаллов, энергетический порог распыления соответствует ширине запрещенной зоны, а максимум наблюдается при наибольшем значении сечения ионизации ( $\sim 300$  эВ).

Потенциальное распыление, например, адсорбированных атомов медленными ионами связано с тем, что поле подлетающего

иона возбуждает электрон адсорбированного атома из основного состояния на отталкивательный терм, т.е. электрон за счет притяжения к налетающему иону переходит из положения между адсорбированным атомом и поверхностью в положение над адсорбированным атомом.

Многоярдные ионы широко используются как для исследования физики взаимодействия атомных частиц с поверхностью, так и в технологических целях. При ускорении электрическим полем такому иону сообщается кинетическая энергия, пропорциональная его заряду. Одновременно такие ионы обладают большой потенциальной энергией, которая при взаимодействии передается конденсированному веществу. В зависимости от скорости и заряда такого иона при его подлете к поверхности внешние электронные оболочки быстро заполняются, образуя так называемый “полый атом/ион”. Последующая релаксация электронов в основные состояния по оже-механизму приводит к эмиссии энергетичных электронов и возбуждению электронной подсистемы твердого тела с последующим образованием дефектов и эмиссией атомов. Кроме того, попадание в мишень иона с большим зарядом приводит к резкому увеличению удельных потерь энергии, что может проявляться в существенном возрастании (на 3 порядка в пересчете на один падающий атом) коэффициента распыления, и к увеличению доли кластерных частиц.

Следует также иметь в виду, что после бомбардировки ионными пучками происходит трансформация рельефа поверхности, по границам зерен распыление более интенсивно, поэтому происходит неоднородное травление. Более того, в некоторых случаях рельеф поверхности приобретает совершенно экзотический вид с образованием на нем конусов или пирамид (рис. 2.85). При наклонном попадании пучка на поверхность материала при больших дозах облучения может образоваться крайне неоднородный рельеф в виде ориентированной вдоль пучка «щетины».

Такого ряда рельеф резко изменяет эмиссионные свойства поверхности, снижает электрическую прочность элементов ионной оптики за счет возникновения полевой эмиссии электронов с острий.

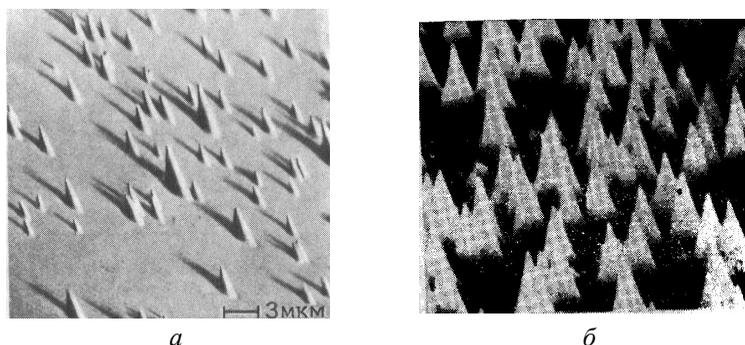


Рис. 2.85. Трансформация рельефа поверхности при облучении пучком ионов: *а* – формирование конусов на поверхности грани (852) серебра при наклонной бомбардировке ионами  $\text{Ag}^+$  с энергией 10 кэВ; *б* – то же при облучении поверхности (1131) никелевой мишени ионами  $\text{Ag}^+$  с энергией 25 кэВ

#### 2.7.4. Радиационно-стимулированная десорбция

Радиационно-стимулированная десорбция происходит под действием различных компонентов волнового и корпускулярного излучения плазмы. Количество десорбированных атомов или молекул в расчете на падающую частицу (или квант) называется *коэффициентом радиационно-стимулированной десорбции*  $\gamma$  (табл. 2.4).

Таблица 2.4

**Коэффициенты  $\gamma$  для различных частиц и квантов**

Вид излучения	Значение коэффициента $\gamma$ для десорбции молекул водорода	Значение $\gamma$ для десорбции примесей с поверхности нержавеющей стали
Ионы водорода, быстрые нейтральные атомы	$\gamma_i \sim 1$	2
Электроны	$\gamma_e = 5 \cdot 10^{-3} - 10^{-4}$	$5 \cdot 10^{-4}$
Электромагнитное излучение	$\gamma_{hv} = 3 \cdot 10^{-5} - 10^{-8}$	$4 \cdot 10^{-4}$

Приведенные в среднем столбце табл. 2.4 значения весьма приблизительны и могут колебаться в широких пределах не только в

зависимости от энергии частиц и угла падения на поверхность, но также и от ее состояния и степени покрытия адсорбированными молекулами и атомами.

Поток десорбируемого газа  $Q_i$  при известном значении  $\gamma$  и потоке частиц на стенку  $\Gamma_i$  в вакуумных единицах равен  $Q_i = \gamma (kT) \Gamma_i$ . При определении десорбции газа под действием электромагнитного излучения поток на стенку удобно представлять как отношение полной мощности потерь на излучение  $P_r$  к средней энергии кванта  $\langle hv \rangle$ :

$$Q_{hv} = \gamma_{hv} (kT) P_r / \langle hv \rangle.$$

Аналогично, поток газа, десорбированного под действием электронов, равен отношению потерь с электронами  $P_e$  к средней энергии электрона  $\langle E_e \rangle$ :

$$Q_e = \gamma_e (kT) P_e / \langle E_e \rangle.$$

Как следует из табл. 2.4, основным десорбирующим фактором являются наиболее тяжелые частицы – ионы и быстрые нейтралы. Поток десорбции при этом формируется:

- 1) из атомов, выбитых непосредственным ударом налетающей частицы;
- 2) атомами, отраженными от более глубоких слоев вещества;
- 3) распыленными атомами твердого тела, вылетающими из твердого тела в вакуум.

Сечение десорбции равно сумме сечений всех трех перечисленных выше процессов  $\sigma_1 \div \sigma_3$ , соответственно,  $\sigma^\Sigma = \sigma_1 + \sigma_2 + \sigma_3$ . Зависимость  $\sigma^\Sigma$  от параметров облучения определяется зависимостью  $\sigma_1 \div \sigma_3$  от массы и энергии налетающей частицы (рис. 2.86).

Составляющие ионно-стимулированной десорбции  $\sigma_1$  и  $\sigma_2$  с ростом энергии падают, так как при этом уменьшается сечение упругого взаимодействия, а  $\sigma_3$ , согласно описанным выше закономерностями распыления, имеет вид кривой с максимумом, который с ростом массы налетающей частицы растет по абсолютной величине и смещается в область все более высоких энергий. В итоге, зависимость суммарного сечения десорбции от энергии будет отличаться для падающих частиц различной массы из-за разного относительного вклада приведенных выше составляющих. Легкие ионы лучше отражаются, но хуже распыляют, чем тяжелые, а бо-

лее тяжелые ионы лучше десорбируют, так как для них выше коэффициент распыления. С ростом массы адсорбата и массы атомов подложки (адсорбента) сечение десорбции также увеличивается (рис. 2.87).

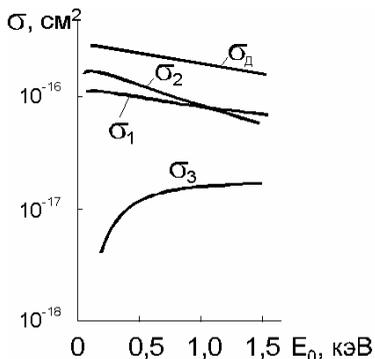


Рис. 2.86. Зависимость от энергии различных составляющих ионно-стимулированной десорбции:  $\sigma_1$  – выбивание прямым ударом;  $\sigma_2$  – отраженным потоком;  $\sigma_3$  – распыленными атомами

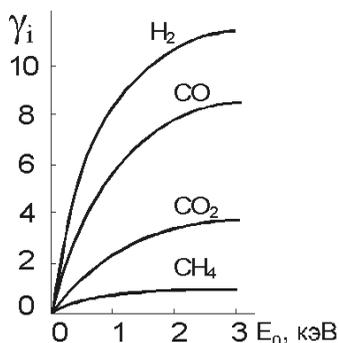


Рис. 2.87. Коэффициент ионно-стимулированной десорбции различных молекул ионами аргона в зависимости от их энергии

Энергия связи адсорбата на поверхности подложки  $U$  сильно влияет на сечение десорбции:  $\sigma \sim U^{-1}$ . Так, для слабосвязанных слоев (например, конденсированных на криопанелях газов) коэффициент ионно-стимулированной десорбции может составить  $10^2$  для примесей ( $\text{Ag}$ ,  $\text{N}_2$ ,  $\text{CO}$ ) и  $10^4$  для водорода. Увеличение угла падения частиц приводит к возрастанию сечения десорбции, и при углах падения около  $60^\circ - 70^\circ$  наблюдается максимальная десорбция, в несколько раз превышающая величину десорбции при падении частиц по нормали к поверхности. Угловые распределения десорбированных частиц практически не изучены.

Что касается закономерностей десорбции, стимулированной электронами и фотонами, то они во многом определяются релаксацией возбуждения электронных систем адсорбированных на поверхности частиц (вызванного падающими из плазмы частицами и квантами). Сечения таких процессов в отличие от десорбции, свя-

занной с передачей адсорбированным атомам кинетической энергии падающих частиц (см. рис. 2.86), имеют намного меньшие сечения (порядка  $10^{-18}$ – $10^{-25}$  см<sup>2</sup>). Десорбция в данном случае происходит за счет передачи потенциальной энергии отталкивающихся частиц, если в результате возбуждения система адсорбированный атом – твердое тело переходит в антисвязанное состояние.

Вероятность такой десорбции  $W_d$  зависит от скорости электронных переходов  $R(x) \approx A \exp(-ax)$  между частицей и поверхностью и определяется изменением заселенности антисвязанных состояний  $N(x)$  со временем:

$$dN(x)/dt = -N(x)R(x),$$

откуда

$$W_d = \exp\left(-\int \frac{R(x) dx}{v(x)}\right).$$

В предположении, что в начальный момент (при  $x = x_0$ ) десорбируемая частица покоилась, для вероятности десорбции справедливо выражение:

$$W_d \approx \exp\{-MA a^{1/2}[\exp(-ax_0)]F_r^{1/2} \cos\theta\}, \quad (2.21)$$

где  $M$  – масса частицы;  $F_r = -dU/dr$  – сила, создаваемая потенциалом отталкивания;  $\theta$  – угол между вектором скорости десорбирующейся частицы и нормалью к поверхности.

Приведенное выражение качественно описывает наблюдаемые экспериментально закономерности данного вида десорбции, а именно: преимущественное направление десорбции по нормали к поверхности; сильный изотопический эффект (большая вероятность десорбции более легких изотопов); малую вероятность вызванной электронными переходами десорбции атомов с металлических поверхностей (в силу большого значения величины  $A$  для металлов).

При электронном возбуждении данного вида десорбции характерно наличие порога при начальной энергии электронов 5÷40 эВ, потом скорость десорбции достигает максимума при энергии ~ 100 эВ, а затем с ростом энергии электронов спадает.

Энергетическое распределение десорбированных частиц, обладая максимальным значением в области единиц электрон-вольт, имеет быстро спадающий "хвост", который тянется вплоть до энергий, определяемых кинематикой парного соударения (первично

выбитые атомы). При десорбции, вызванной электронными переходами, энергетические распределения весьма узкие с наиболее вероятной энергией меньше 1 эВ. Ширина и положение максимума спектра зависят от энергии связи частиц с поверхностью твердого тела, для хемосорбированных частиц энергия десорбированных частиц больше, чем для случая физической сорбции (рис. 2.88).

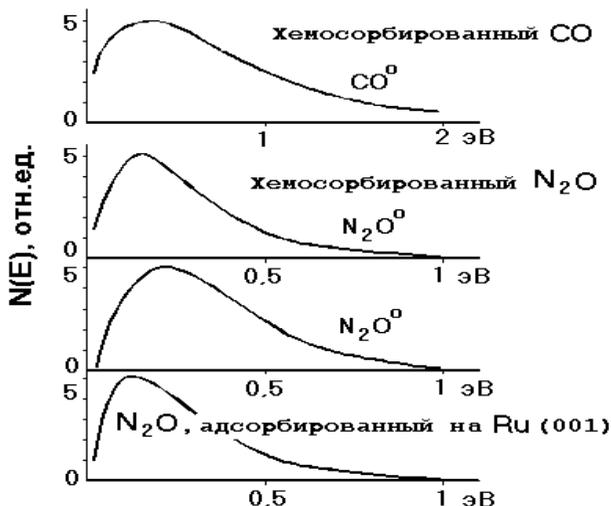


Рис. 2.88. Энергетическое распределение нейтральных частиц, десорбированных с грани (001) рутения электронами с энергией 250 эВ

### 2.7.5. Зарядовые фракции отраженных или распыленных частиц

Электрически заряженный компонент отраженного потока частиц и распыленных падающими частицами ионизованных атомов твердого тела определяется сортом и энергией первичных частиц и электронным строением поверхности. При этом ввиду большого сечения электронного обмена между налетающей частицей и конденсированной средой первоначальный заряд падающей частицы (за исключением многозарядных ионов) оказывается несущественным.

Выход отраженных или вторичных (в случае распыления) ионов  $P^i$  есть отношение полного числа ионов к суммарному по зарядам числу вылетевших из мишени частиц.

Зарядовые фракции отраженных частиц  $\eta^i$  сильно зависят от энергии, с которой они покидают поверхность твердого тела. С увеличением энергии доля положительно заряженных ионов возрастает, а для отрицательно заряженных ионов наблюдается максимум при некоторой энергии (рис. 2.89).



Рис. 2.89. Положительные (а) и отрицательные (б) зарядовые фракции отраженных частиц как функция их энергии при касательном падении протонов на мишени из различных материалов ( $\alpha = 5^\circ$ ,  $\delta = 20^\circ$ )

В некоторых задачах пучковой электроники возникает необходимость зарядового преобразования пучка. С этой целью используют газовые мишени или сверхтонкие фольги, при прохождении которых частицы теряют мало энергии, но меняют свой заряд в процессах захвата и потери энергии. Так, динамика изменения положительно заряженной фракции  $\eta^+$  (т.е. отношения числа положительно заряженных частиц к суммарному по зарядам числу частиц) двухкомпонентного пучка, состоящего, например, из положительных ионов и нейтральных атомов (что соответствует  $\eta^+ + \eta^0 = 1$ ) вдоль направления распространения  $z$  в мишени, описывается очевидным уравнением:

$$\frac{d\eta^+}{dz} = \eta^0 \sigma_{\Pi} - \eta^+ \sigma_{\Pi} = \sigma_{\Pi} - (1 - \eta^+) \sigma_3, \quad (2.22)$$

где  $\sigma_{\text{п}}$  – сечение потери электрона нейтральным атомом;  $\sigma_3$  – сечение захвата электрона положительным ионом. Решение этого уравнения дает следующую зависимость положительной фракции пучка от пройденного в мишени пути  $z$ :

$$\eta^+ = \frac{\sigma_{\text{п}}}{\sigma_{\text{п}} + \sigma_3} \left\{ 1 + \exp \left( -(\sigma_{\text{п}} + \sigma_3) \int_0^z ndz \right) \right\}. \quad (2.23)$$

На бесконечности зарядовая фракция оказывается лишь функцией соотношения зависящих от энергии сечений  $\sigma_{\text{п}}$  и  $\sigma_3$ , таким образом, при достаточно «толстой» ( $(\sigma_{\text{п}} + \sigma_3) nl \gg 1$ ) мишени зарядовый состав пучка будет определяться только энергией частиц, что соответствует равновесному зарядовому составу.

Равновесное распределение по зарядам для ионов водорода в диапазоне энергий от 1 кэВ до 1 МэВ при перезарядке на газовых и твердотельных мишенях показано на рис. 2.90. Видно, что в пучке помимо положительных ионов и нейтральных частиц также присутствует и отрицательная фракция, которая при высоких энергиях становится пренебрежимо малой. При энергии выше примерно 100 – 200 кэВ основную долю (более 90 %) прошедшего пучка составляют положительные ионы, а при энергии выше ~ 400 кэВ нейтральной фракцией можно пренебречь. Следует иметь в виду, что процессы зарядового обмена на поверхностях ускорительных систем, которые, как правило, находятся в равновесии со средой остаточного газа, процессы равновесной зарядовой фракции имеют те же значения, как и для фольг, покрытых адсорбированным газом. Поэтому, зная параметры отражения частиц – угловое и энергетическое распределения (или вычислив их с помощью доступных компьютерных кодов), по приведенным на рис. 2.89 – 2.91 кривым можно определить, какое количество частиц пучка отразится в виде нейтральных атомов, какая доля останется в ионизованном состоянии (либо дополнительно захватит электрон и превратится в ион  $\text{H}^-$ ). Для гелия возможно отражение в виде двухзарядных ионов  $\text{He}^{++}$ , доля которых быстро растет с энергией и в МэВ-ном диапазоне может составлять доминирующую часть отраженного потока.

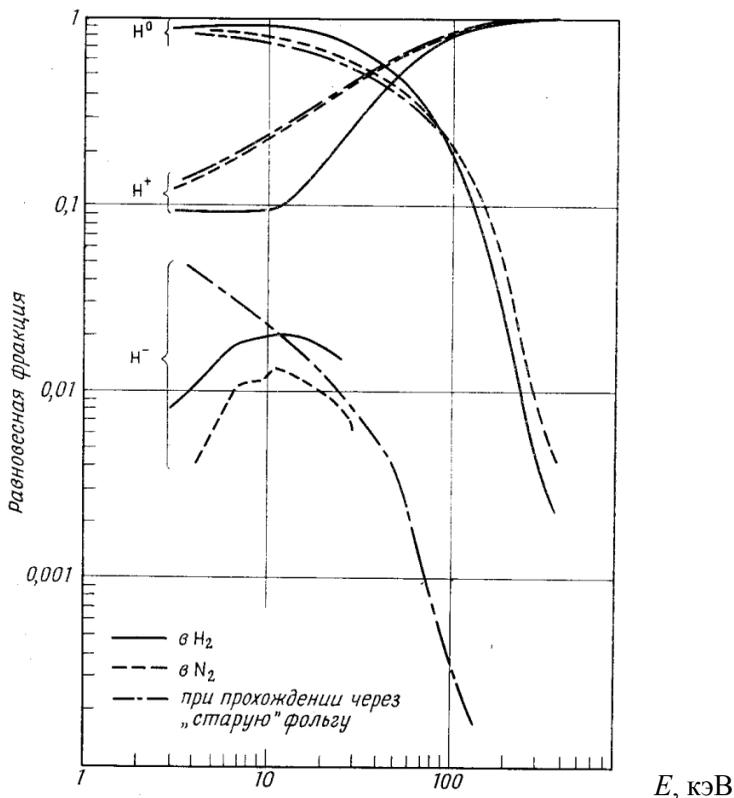


Рис. 2.90. Равновесное распределение по зарядам для пучка ионов водорода в диапазоне 1 – 1000 кэВ, прошедших через «равновесную» газовую мишень в камере обдирки, наполненной водородом или азотом, а также через фольгу, покрытую сорбированным газом

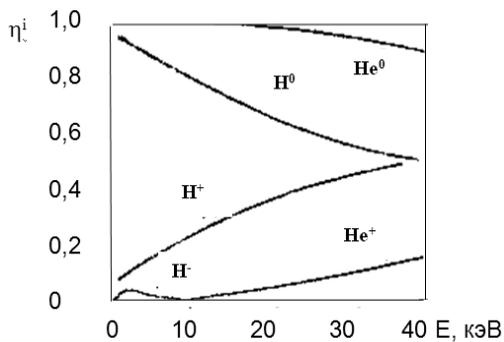


Рис. 2.91. Зарядовые фракции пучка после прохождения ионов водорода и гелия через углеродные фольги

Более точные оценки зарядовых фракций при отражении от элементов вакуумных камер или электродов ускоряющей системы для диапазона 0,5 – 40 кэВ можно получить из рис. 2.91.

Для положительной зарядовой фракции ионов водорода в этом диапазоне энергий может быть применена очень простая аппроксимация:

$$\eta^+ \approx 0,08 \sqrt{E} \text{ кэВ.} \quad (2.24)$$

Для углеродной фольги толщиной  $d$  положительную зарядовую фракцию частиц, попадающих в нее с начальной энергией  $E$ , можно также найти из выражения:

$$\eta^i = \frac{0,03E_{out}}{1 + 0,03E_{out}}, \quad (2.25)$$

где 
$$E_{out} = \left( \sqrt{E} - \frac{1,6 \cdot 10^{-3} d}{\sqrt{A}} \right)^2, \quad E < 25 \text{ кэВ.}$$

Здесь  $E$  – энергия частиц перезарядки;  $E_{out}$  – энергия ионов после выхода из мишени;  $A = 1$  для водорода и  $A = 2$  для дейтерия;  $d$  выражено в  $\text{Å}$ , энергия в кэВ. Следует иметь в виду, что величины зарядовых фракций для различных изотопов одного и того же элемента одинаковы при равных скоростях частиц.

При отражении от поверхности твердого тела ионов или атомов, имеющих высокий потенциал ионизации, в спектрах частиц, отраженных в виде ионов, формируется так называемый «поверхностный пик» (см. рис. 2.88). Его относительная величина сильно зависит от энергии частиц и возрастает по мере ее уменьшения. Этот пик связан с тем, что для частиц, испытавших однократное (или близкое к однократному) соударение с атомами твердого тела, равновесное зарядовое распределение устанавливаться не успевает. Положение этого пика на энергетическом спектре близко к положению, определяемому кинематикой парного соударения атомных частиц (см. формулу (2.9)).

Зарядовые состояния в пике однократного рассеяния определяются в основном электронными переходами в системе квазимолекулы – рассеивающаяся частица – атом мишени. Так, в отличие от водорода, при рассеянии, инертных газов частицы, испытавшие однократное рассеяние, имеют существенно большее значение по-

ложительно заряженных фракций, нежели частицы, отраженные от более глубоких слоев мишени (рис. 2.92). При скользящем падении на мишень (ситуация типичная для пучковых экспериментов) ионов с высоким потенциалом ионизации, когда частицы не успевают глубоко проникать в мишень, велика вероятность сохранения заряда первичных ионов в отраженном потоке частиц.

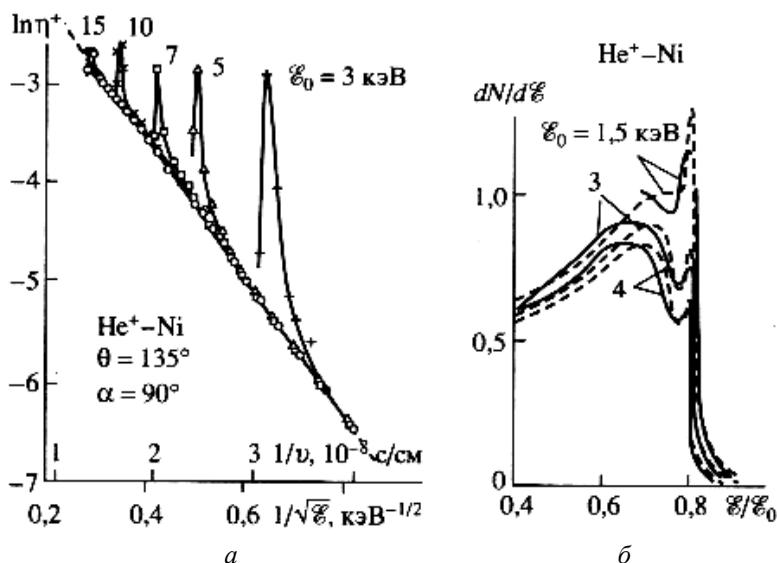


Рис. 2.92. Энергетическая зависимость положительной зарядовой фракции ионов He<sup>+</sup> (а) и энергетических спектров суммарного по зарядам потока отраженных частиц по сравнению с ионной фракцией (б) при отражении от никелевой мишени при разных начальных энергиях частиц

Таким образом, именно «поверхностный» пик в зарядовой фракции, а не кинематически формируемый пик суммарного по зарядам потока отраженных частиц, ответственен за высокую чувствительность и разрешающую способность при анализе поверхности твердых тел по ионному рассеянию.

Для молекулярных пучков ионов с энергиями много больше энергии связи в молекулярном ионе при взаимодействии с поверхностью твердого тела происходит практически полная их диссоциация. Однако при скользящем падении на мишень, когда попе-

речная к ее поверхности составляющая скорости существенно уменьшается, возможно выживание как самого молекулярного иона, так его фрагментов (рис. 2.93). Энергия фрагмента пропорциональна его массе. Доля нераспавшихся фрагментов растет с уменьшением поперечной энергии и увеличением атомного номера материала мишени. Спектры нераспавшихся фрагментов достаточно узкие, так как именно малые потери при соударении с поверхностью обеспечивают их выживание, а энергетический спектр фрагментов диссоциации (спектр  $D^+$  на рис. 2.93) получает дополнительное уширение за счет потерявших электрон составляющих молекулу ионов. Это уширение легко вычисляется при переходе из системы центра масс в лабораторную систему координат:

$$\Delta E = \pm \sqrt{E} E_d \cos \chi, \quad (2.26)$$

где  $E_d$  – энергия диссоциации молекулярного иона;  $\chi$  – угол между осью молекулы и направлением пучка.

При облучении молекулярными ионами с высокой скоростью  $v > v_0$  тонких пленок с малой концентрацией свободных электронов, так что экранирование поля молекулярного электрона движущейся в веществе мишени молекулы оказывается слабым, наоборот, по мере увеличения энергии вероятность выживания молекулярного иона возрастает.

При анализе потоков отраженных частиц, особенно их ионизованной части, необходимо принимать во внимание присутствие в них быстрых *первично выбитых атомов отдачи*. Их энергия определяется выражением (2.10). В случае бомбардировки тяжелыми ионами и особенно при углах, когда в силу кинематики соударения

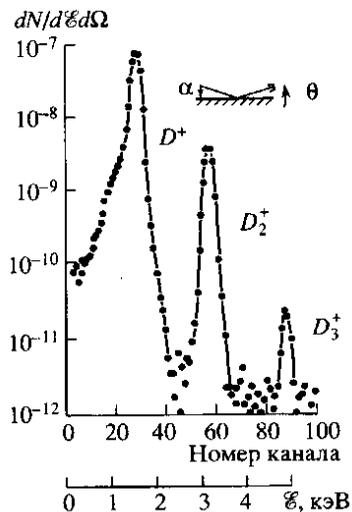


Рис. 2.93. Энергетический спектр после рассеяния ионов  $D_3^+$  с энергией  $\sim 5$  кэВ от мишени из золота ( $\alpha = 5^\circ$ ,  $\theta = 10^\circ$ )

однократное рассеяние более тяжелых ионов от легких атомов мишени запрещено условием

$$\theta < \theta_{\max} = \arcsin(M_2/M_1), \quad (2.27)$$

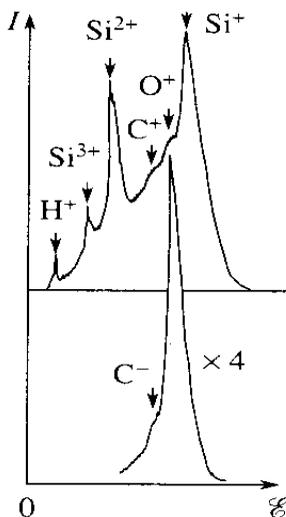


Рис. 2.94. Энергетические спектры ионов отдачи при облучении кремниевой мишени ионами  $\text{Ar}^+$  с энергией 7,8 кэВ;  $\alpha = 40^\circ$ ,  $\theta = 45^\circ$

поток покидающих твердое тело энергетических частиц может содержать значительное число ионизированных атомов отдачи (рис. 2.94) (наряду с частицами, рассеянными в результате кратных и многократных соударений). Зарядовые фракции при отражении низкоэнергетических ионов зависят от соотношения потенциалов ионизации (а также энергии возбужденных уровней) и работы выхода поверхности. Для ионов водорода (см. рис. 2.89) и инертных газов с энергиями меньше 1 кэВ отражение от поверхности сопровождается практически полной их нейтрализацией. Лишь в случае присутствия в системе щелочных элементов заряженные фракции отраженных частиц могут составлять заметную величину (табл. 2.5).

Таблица 2.5

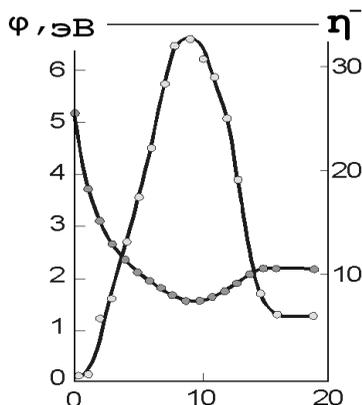
**Зарядовая фракция отраженных от W-мишени при энергии 560 эВ различных щелочных ионов  $P_r^+$  (в %) и коэффициент поверхностной ионизации, рассчитанный по формуле Саха – Ленгмюра**

Заряженные фракции	$\text{Cs}^+$	$\text{Rb}^+$	$\text{K}^+$	$\text{Na}^+$
$P_r^+$	100	69	64	57
$\alpha_T^+$	100	92	74	0.5

С другой стороны, если работа выхода поверхности мала или специально понижена за счет покрытия атомами с низким потенциалом ионизации, при отражении атомов, имеющих сродство к электрону (H, O, C и др.), значительно возрастает доля отрицатель-

ных ионов. Эта доля зависит от скорости отлетающей частицы, угла вылета и работы выхода поверхности и в некоторых случаях может превышать несколько десятков процентов (рис. 2.95). Этот эффект используется не только в источниках отрицательных ионов, но и может быть применен для формирования пучков отрицательных ионов при отражении положительных ионов от таких поверхностей.

Рис. 2.95. Изменение значения выхода ионов  $H^-$  (в процентах к падающему пучку), а также работа выхода поверхности  $W$ -мишени при нанесении на нее атомов цезия (по оси абсцисс отложено число импульсов напыления)



Если скорость эмитированных с поверхности твердого тела атомных частиц превышает тепловую, то движение частицы у поверхности приводит к ряду особенностей электронных переходов, влияющих на их зарядовое состояние. Во-первых, на движущуюся вблизи мишени с большой концентрацией свободных электронов заряженную частицу действует сила зеркального изображения

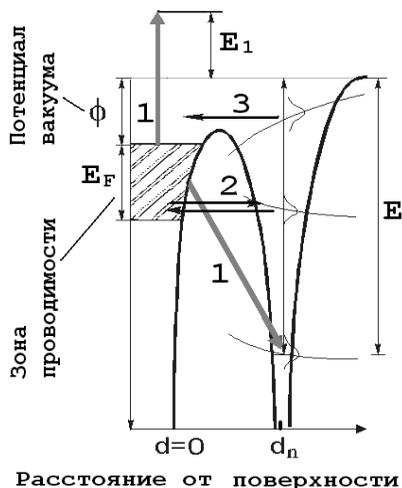
$$F_m = -Z_1 e^2 / x^2,$$

которая изменяет положение электронных уровней в атоме: сдвигает их вверх для незанятых уровней и сдвигает их вниз для уровней электронного сродства (рис. 2.96). Во-вторых, при приближении к поверхности в силу принципа неопределенности Гейзенберга уровень расширяется. Поэтому скорость наиболее вероятных резонансных переходов между электронами мишени и уровнями движущейся частицы оказывается функцией как распределения заполненных и свободных состояний в твердом теле и вылетающем из него атоме, так и величины направления скорости последнего относительно поверхности. Для формирования зарядовых фракций

важно также соотношение между временем электронного перехода и временем взаимодействия атомной частицы с твердым телом. В подавляющем большинстве случаев для вторичных ионов справедлива экспоненциальная зависимость зарядовой фракции от нормальной к поверхности составляющей скорости атома:

$$\eta^+ \sim \exp(-v_0 / v_{\perp}).$$

Рис. 2.96. Диаграмма, иллюстрирующая различные электронные переходы между атомом и поверхностью твердого тела: 1 – оже-переход; 2 – резонансный туннельный переход; 3 – переход электрона с уровня среднего атома



Для решения задач изменения зарядового состояния частиц при резонансном взаимодействии с электронной системой металла разработан метод распространения волновых пакетов. Сущность метода состоит в исследовании эволюции волновой функции электрона, принимающего участие в процессе электронного обмена. Полагают, что эволюция волнового пакета происходит под действием суперпозиции потенциала атомного остова  $V_a$  и потенциала поверхности  $V_s$ . Эволюция во времени волновой функции участвующего в переносе заряда электрона находится из решения нестационарного (зависящего от времени) уравнения Шредингера:

$$i d\Psi/dt = \{W_k + V_a + V_s\} \Psi(r, t),$$

а процесс распространения волновой функции электрона со временем описывается оператором эволюции  $U(t)$

$$\Psi(r, t + \Delta t) = U(\Delta t) \Psi(r, t),$$

где  $U(\Delta t) = \exp(-iH\Delta t)$ , а  $H$  – гамильтониан системы.

Как правило, для чистых металлических поверхностей выход положительных ионов мишени  $P^+$  мал:  $10^{-2} < P^+ < 10^{-4}$ , однако наличие на поверхности электроотрицательных элементов (например, кислорода) может увеличить значение  $P^+$  на 2–3 порядка (табл. 2.6).

Энергетическое распределение вторичных ионов есть суперпозиция распределения по энергии суммарного по зарядам потока распыленных атомов и вероятности их вылета в том или ином зарядовом состоянии, поэтому оно обычно уже спектра распыленных нейтралей.

Таблица 2.6

**Выход вторичных ионов ( $P^+ \cdot 10^3$ ) при бомбардировке чистой и оксидированной поверхности ионами  $Ag^+$  с энергией 3 кэВ**

Мишень	Al	Ba	Cu	Fe	Mg	Mo	Ni	Si	W
Чистая поверхность	7	0,2	0,3	1,5	10	0,65	0,6	8,4	0,09
Оксидированная поверхность	700	30	70	350	900	400	45	580	35

## Глава 3. ФОРМИРОВАНИЕ ПОТОКОВ ЗАРЯЖЕННЫХ ЧАСТИЦ

### 3.1. Движение заряженных частиц в однородном электрическом и магнитном полях

#### 3.1.1. Траектории заряженных частиц в однородном электрическом и магнитном полях

Уравнение движения для частицы в электрическом и магнитном поле:  $m d\vec{V}/dt = q\vec{E} + (q/c)[\vec{V}\vec{H}]$ , где  $m$ ,  $q$ ,  $\vec{V}$  – масса, заряд, скорость заряженной частицы соответственно;  $\vec{E}$  – напряженность электрического поля;  $\vec{H}$  – напряженность магнитного поля. Уравнение движения записано в *гауссовой* системе (присутствует множитель  $1/c$ ), где  $c = 3 \cdot 10^{10}$  см/с (скорость света). Соотношение величин в различных системах приведено в табл. 3.1.

Таблица 3.1

**Соотношение величин**

Система	Си	Гауссова
Закон Кулона	$F = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{q_1 q_2}{r^2} \quad [F] \text{ мН,}$ $\epsilon_0 = \frac{10^7}{4\pi c^2} = 0.885 \cdot 10^{-11} \text{ Ф/м}$	$F = \frac{q_1 q_2}{r^2},$ $[F] = \text{дин,}$ $1 \text{ Н} = 10^5 \text{ дин}$
Электрический заряд	$[q] = \text{Кл.}$ Заряд электрона $e = 1,6 \cdot 10^{-19} \text{ Кл}$	$[q] = \text{СГСЭ – ед. заряда,}$ $1 \text{ Кл} = 3 \cdot 10^9,$ $\text{СГСЭ – ед. заряда}$
Напряженность электрического поля	$E = F/q$ $[E] = \text{В/м}$	$E = F/q,$ $[E] = \text{СГСЭ ед.,}$ $1 \text{ СГСЭ ед.} = 3 \cdot 10^4 \text{ В/м}$
Электрический ток	$[I] = \text{А}$	$[I] = \text{СГСЭ – ед. заряда,}$ $1 \text{ А} = 3 \cdot 10^9,$ $\text{СГСЭ – ед. заряда}$
Напряженность магнитного поля	$H = I/(2R),$ $[H] = \text{А/м}$	$H = 2\pi I/(cR),$ $[H] = \text{Э,}$ $1 \text{ А/м} = 4\pi \cdot 10^{-3} \text{ Э}$

Система	Си	Гауссова
Магнитная индукция	$B = \mu_0 \mu H,$ $\mu_0 = 4\pi \cdot 10^{-7}$ – магнитная постоянная, $[B] = \text{Тл}$	$B = \mu H,$ $\mu$ – магнитная проницаемость среды (в вакууме $\mu = 1$ ), $[\mu] = \text{Г/м}$ $[B] = \text{Гс}, 1\text{Тл} = 10^4\text{Гс}$

Энергия, приобретаемая заряженной частицей в ускоряющей разности потенциалов  $\Delta U$ :  $W = q\Delta U$ . В физике плазмы в качестве единицы энергии используют 1 эВ (электрон-вольт), равный энергии, которую приобретает электрон, ускоренный в разности потенциалов 1 В:  $1 \text{ эВ} = 1,6 \cdot 10^{-19} \text{ Дж}$ .

$$\text{Скорость электрона : } \vec{V}_e \text{ [см/с]} = \sqrt{\frac{2W_e}{m_e}} = 5,93 \cdot 10^7 \sqrt{W_e \text{ [эВ]}}.$$

$$\text{Скорость иона : } \vec{V}_i \text{ [см/с]} = \sqrt{\frac{2W_i}{m_i}} = 1,39 \cdot 10^6 \sqrt{\frac{W_i \text{ [эВ]}}{m_i \text{ [а.е.м.]}}}.$$

### Однородное ускоряющее электрическое поле

Ускорение вдоль поля (электронная пушка). Рассмотрим ускорение электронов в однородном электрическом поле (рис. 3.1). Траектория электрона описывается уравнением:  $m_e \ddot{x} = eE$  (по-прежнему  $e$  – модуль заряда электрона),

тогда  $\dot{x} = \frac{eE}{m_e} t + W_0$ , где  $W_0 = \frac{m_e V_0^2}{2}$  –

начальная энергия электрона. Будем считать, что электроны выходят с катода с нулевой начальной скоростью ( $V_0 = 0$ ).

Это предположение оправдано, так как начальная энергия термоэлектронов, как показано ранее, равна  $2kT_k$ , где  $T_k$  – температура катода, которая не может быть более 4000 К.

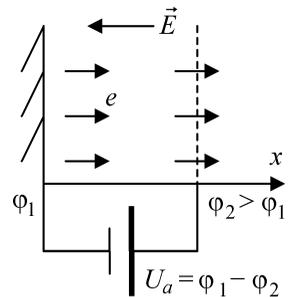


Рис. 3.1. Схема электронного пучка в нерелятивистском случае

Учитывая, что температура в 11600 К соответствует 1 эВ, следовательно, начальная энергия не более 0,3 эВ. Прикладываемое ускоряющее напряжение, как правило, более 100 В, следовательно, начальная энергия электронов пренебрежимо мала по сравнению с приобретаемой в ускоряющем электрическом поле ( $eU_a \gg kT_K$ ).

Зависимость координаты от времени:  $x = \frac{1}{2} \frac{eE}{m_e} t^2$ . Приобретаемая

электроном энергия  $W_k = \frac{mV^2}{2} = eE\Delta x = e|\phi_2 - \phi_1| = eU_a$ .

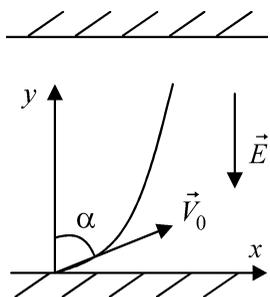


Рис. 3.2. Ускорение под углом к полю

Ускорение при старте под углом к полю. Рассмотрим случай, когда начальная скорость электрона  $\vec{V}_0$ , влетающего в промежуток с ускоряющим электрическим полем, не пренебрежимо мала и направлена под углом к полю (рис. 3.2). Система уравнений для траектории частицы имеет вид:

$$\begin{cases} x = V_0 \sin \alpha \cdot t; \\ y = \frac{1}{2} \frac{eE}{m_e} t^2 + V_0 \cos \alpha \cdot t. \end{cases}$$

Выразив время из первого уравнения системы и подставив во второе, получим уравнение для траектории:

$$y(x) = \frac{1}{2} \frac{eE}{m_e} \frac{x^2}{V_0^2 \sin^2 \alpha} + \frac{\cos \alpha}{\sin \alpha} x. \quad (3.1)$$

Соотношение (3.1) описывает квадратичную зависимость. Следовательно, траектория будет параболой, положение вершины которой зависит от угла влета  $\alpha$ . При  $\alpha = \frac{\pi}{2}$   $y(x) = \frac{eE}{2mV_0^2} x^2$  – вершина параболы в точке старта.

## Однородное тормозящее электрическое поле

*Рекуператор энергии.* Электронный пучок, который до этого был ускорен до некоторой энергии и выполнил некоторую функцию (например, пропущенный через плазмохимический реактор), направляется в систему торможения (рис. 3.3). Такая система торможения, получившая название *рекуператора энергии*, имеет техническое применение, когда необходимо преобразовать кинетическую энергию заряженных частиц в потенциальную (*рекуперировать*), вернув ее таким образом в накопитель.

Электроны влетают в промежуток с некоторой начальной энергией  $W_{к0} = eU_0$ , где  $U_0$  – потенциал, в котором электроны были ускорены до входа в систему торможения. По мере движения к коллектору электроны теряют скорость, «забираясь» на все поле «высокий» потенциал, придя на коллектор, электроны отдают свой заряд в накопитель. Для того, чтобы электроны полностью потеряли кинетическую энергию и пришли на коллектор с нулевой скоростью, необходимо, чтобы тормозящий потенциал был равен

$$U_a = \varphi_2 - \varphi_1 = \frac{W_{к0}}{e}.$$

*Торможение и фокусировка под углом к электрическому полю.* Рассмотрим торможение под углом к полю (рис. 3.4). Траектория будет описываться зависимостью, аналогичной (3.1), с той лишь разницей, что электрическое поле имеет противоположный знак:

$$y(x) = -\frac{1}{2} \frac{eE}{m_e V_0^2 \sin^2 \alpha} x^2 +$$

$+ \operatorname{ctg} \alpha x$ , т.е. траектория тоже является параболой, но ее ветви направлены вниз. Положение вершины параболы определяется из соотношения:  $\dot{y} = V_0 \cos \alpha -$

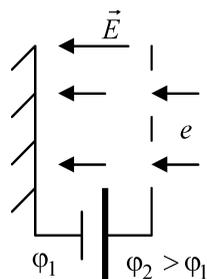


Рис. 3.3. Схема рекуператора энергии

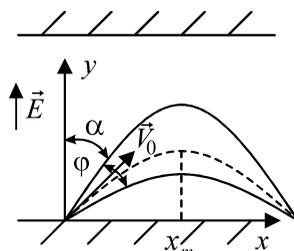


Рис. 3.4. Торможение электронов под углом к полю

$-\frac{eE}{m}t = 0 \Rightarrow t_m = \frac{mV_0 \cos \alpha}{eE}$ . Тогда координата вершины параболы:

$$x_m = V_0 \sin \alpha \cdot t_m = \frac{mV_0^2}{2eE} \sin 2\alpha = \frac{W_{к0}}{eE} \sin 2\alpha \quad (3.2)$$

Предположим, что входящий пучок электронов имеет угловой разброс  $\varphi$ . Если угол влета пучка будет равен  $\pi/4$ , то для верхнего граничного электрона вершина параболы будет находиться в точке:

$$x'_m = \frac{W_0}{eE} \sin \left( 2 \left( \frac{\pi}{4} + \frac{\varphi}{2} \right) \right) = \frac{W_0}{eE} \sin \left( \frac{\pi}{2} + \varphi \right) = \frac{W_0}{eE} \sin \left( \frac{\pi}{2} + \varphi \right),$$

для нижнего —  $x''_m = \frac{W_0}{eE} \sin \left( \frac{\pi}{2} - \varphi \right)$ , т.е.,  $x''_m = x'_m$ . Учитывая, что электроны вернуться на электрод, с которого стартовали, на расстоянии  $l = 2x'_m = 2x''_m$  от точки старта, следовательно, происходит фокусировка.

Таким образом, тормозящее электрическое поле можно использовать для фокусировки пучков, если направлять их под углом  $\pi/4$  к направлению поля.

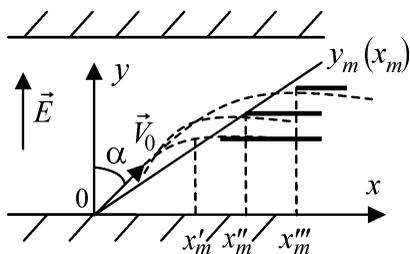


Рис. 3.5. Торможение моноэнергетического пучка электронов

*Рекуператор моноэнергетического пучка.* Часто возникает необходимость рекуперировать энергию пучка, заряженные частицы которого имеют разброс по энергиям. Следовательно, необходимо, чтобы частицы с разными энергиями приходили на электроды, находящиеся на разной высоте (рис. 3.5).

Требуется найти геометрию электродной системы торможения, т.е., под каким углом необходимо произвести «срез» электродов. Координата  $x_m$  вершины параболы траектории электрона определяется соотношением (3.2), координата  $y_m$  определяется из соотношения:  $y_m eE = W_{к0} \cos^2 \alpha$ . Тогда  $y_m = \frac{1}{2} \operatorname{ctg} \alpha \cdot x_m$ , т.е. вершины

парабол лежат на прямой, наклоненной к поверхности входного электрода под углом, равным  $\arctg\left(\frac{1}{2}\operatorname{ctg}\alpha\right)$ .

### Движение заряженных частиц в однородном магнитном поле

Рассмотрим случай постоянного во времени и однородного в пространстве поля  $\vec{H} = \text{const}$  (рис. 3.6). На движущуюся частицу с зарядом  $q$  в магнитном поле действует сила Лоренца  $\vec{F}_L = \frac{q}{c}\vec{V} \times \vec{H}$

(в системе СГС множитель  $\frac{1}{c}$ ).

Уравнение движения домножим скалярно на скорость:

$m\dot{\vec{V}} = \frac{q}{c}[\vec{V} \times \vec{H}] \cdot \vec{V}$ . Правая часть

будет равна нулю, следовательно,

$$m\vec{V} \cdot \dot{\vec{V}} = 0, \quad \frac{\partial}{\partial t} \left( \frac{m\vec{V}^2}{2} \right) = 0, \quad \text{т.е.}$$

$\frac{mV^2}{2} = \text{const}$  – стационарное магнитное поле не изменяет кинетическую энергию частицы.

Разобьем скорость частицы на две составляющие  $V_{\parallel}$  и  $V_{\perp}$  – вдоль и поперек поля  $\vec{V} = \vec{V}_{\parallel} + \vec{V}_{\perp}$ ;

$\vec{F} = \frac{q}{c}\vec{V}_{\parallel} \times \vec{H} = 0$ , т.е. вдоль поля частица движется как свободная.

Уравнение для поперечной составляющей:  $m\dot{\vec{V}}_{\perp} = \frac{q}{c}\vec{V}_{\perp} \times \vec{H}$ , т.е.

$\ddot{\vec{r}} = \frac{qH}{mc}\dot{\vec{r}}$ . Уравнение  $\ddot{\vec{r}} = \omega_L \dot{\vec{r}}$  описывает вращение по окружности

с частотой  $\omega_L = \frac{qH}{mc}$ , называемой ларморовской (циклотронной).

Ларморовская частота не зависит от энергии частицы. Период

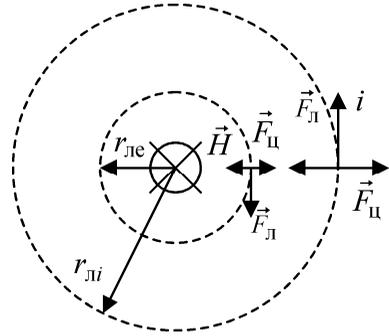


Рис. 3.6. Вращение заряженных частиц в магнитном поле

вращения  $T_{\perp} = \frac{2\pi}{\omega_{\perp}}$ . Частоты вращения электронов и ионов

сильно отличаются. Ларморовская частота электрона:  $\omega_e [\text{с}^{-1}] = \frac{eH}{m_e c} = 1,76 \cdot 10^7 \cdot H [\text{Э}]$ . Ларморовская частота иона:  $\omega_i [\text{с}^{-1}] = \frac{eH}{m_i c} = 9649 \cdot H [\text{Э}] / m_i [\text{а.е.м.}]$ , так что  $\frac{\omega_{\text{ле}}}{\omega_{\text{ли}}} = \frac{m_i}{m_e} \gg 1$  (примерно в

1800 раз), т.е. электрон «осциллирует» на фоне медленно вращающегося иона. Для определения радиуса вращения используем баланс так называемой эффективной центробежной силы (силы инерции) и силы Лоренца:

$$\frac{mV_{\perp}^2}{r_{\perp}} = \frac{qH}{c} V_{\perp}, \text{ получаем } r_{\perp} = \frac{V_{\perp}}{\omega_{\perp}} = \frac{c\sqrt{2mW_{\perp}}}{eH}$$

– ларморовский радиус. Ларморовский радиус электрона:  $r_{\text{ле}} [\text{см}] =$

$$= \frac{V_{\perp}}{\omega_{\text{ле}}} = 3,37 \frac{\sqrt{W_e^{\perp} [\text{эВ}]}}{H [\text{Э}]}.$$

Ларморовский радиус иона:  $r_{\text{ли}} [\text{см}] =$

$$= \frac{V_{\perp}}{\omega_{\text{ли}}} = 144 \frac{\sqrt{W_i^{\perp} [\text{эВ}] m_i [\text{а.е.м.}]}}{H [\text{Э}]}.$$

Отношение  $\frac{r_{\text{ли}}}{r_{\text{ле}}} = \sqrt{\frac{m_i}{m_e}} \gg 1$  (при-

мерно в 40 раз). Таким образом, магнитное поле сильнее «привязывает» электроны к своим силовым линиям. Направление вращения такое, чтобы возникающее за счет движения заряженной частицы собственное магнитное поле было направлено против внешнего, т.е. своим вращением заряженная частица стремится ослабить внешнее магнитное поле. В этом причина *диамагнетизма* плазмы, она стремится ослабить внешнее поле, «избегает» сильного магнитного поля (выталкивается). Двигаясь по окружности, частица

создает замкнутый ток  $I = \frac{q}{T_{\perp}} = \frac{q\omega_{\perp}}{2\pi}$ . Круговой ток обладает маг-

нитным моментом, который можно выразить через площадь круга  $S = \pi r_{\perp}^2$ , охватываемого ларморовской окружностью:  $\mu = \frac{1}{c} IS =$

$$= \frac{1}{c} \frac{q\omega_{\perp}}{2\pi} \pi r_{\perp}^2 = \frac{1}{c} \frac{q\omega_{\perp}}{2} \frac{V_{\perp}^2}{\omega_{\perp}^2} = \frac{qmcV_{\perp}^2}{cqH \cdot 2} = \frac{W_{\perp}}{H}.$$

Магнитный момент на-

правлен против поля  $\vec{\mu} = -\mu \frac{\vec{H}}{H} = -\frac{W_{\perp}}{H^2} \vec{H}$ . Диамагнетизм плазмы будет проявляться, если плазма будет *замагничена*, т.е. ларморовский радиус много меньше характерного размера системы, и время ларморовского вращения много меньше характерного времени рас-

считываемого процесса: 
$$\begin{cases} r_{\perp} \ll l_{\text{хар}}; \\ \tau_{\perp} = \frac{1}{\omega_{\perp}} \ll \tau_{\text{хар}}. \end{cases}$$
 Таким образом, в маг-

нитном поле заряженная частица равномерно движется вдоль силовой линии поля по спирали с постоянным шагом  $h = \frac{V_{\parallel}}{\omega_{\perp}} \cdot 2\pi$ , вра-

щаясь вокруг силовой линии по окружности ларморовского радиуса  $r_{\perp}$  с постоянной ларморовской частотой  $\omega_{\perp}$ . Вектор угловой скорости положительно заряженной частицы антипараллелен, а отрицательно заряженной частицы (например, электрона) – параллелен магнитному полю, т.е., если магнитное поле направлено в плоскость листа, электрон вращается по часовой стрелке (см. рис. 3.6), а положительный ион – против.

### 3.1.2. Движение в скрещенных электрическом и магнитном полях

Рассмотрим движение заряженных частиц в скрещенных полях  $\vec{E} \perp \vec{H}$  в дрейфовом приближении. Дрейфовое приближение применимо в случае, если можно выделить некоторую одинаковую для всех частиц одного сорта постоянную скорость дрейфа, не зависящую от направления скоростей частиц:  $\vec{V} = \vec{u} + \vec{V}_{\text{др}}$ , где  $\vec{V}_{\text{др}} = \text{const}$  – скорость дрейфа. Покажем, что это можно сделать для движения заряженных частиц в скрещенных  $\vec{E} \perp \vec{H}$  полях. Как было показано ранее, магнитное поле не влияет на движение частиц в направлении магнитного поля. Поэтому скорость дрейфа может быть направлена только перпендикулярно магнитному, т.е. пусть:  $\vec{V} = \vec{V}_{\perp} + \vec{V}_{\parallel}$ , причем  $\vec{V}_{\perp} = \vec{u} + \vec{V}_{\text{др}}$ , где  $\vec{V}_{\text{др}} = \text{const}$ . Уравнение

движения:  $m\dot{\vec{V}} = q\vec{E} + \frac{q}{c}\vec{V} \times \vec{H}$  (по-прежнему в СГС пишем множитель  $\frac{1}{c}$ ). Тогда для поперечной составляющей скорости:

$m\dot{\vec{V}}_{\perp} = q\vec{E} + \frac{q}{c}\vec{V}_{\perp} \times \vec{H}$ , подставляем разложение через скорость

дрейфа:  $m\left(\vec{u} + \vec{V}_{\text{др}}\right) = q\vec{E} + \frac{q}{c}\left(\vec{u} + \vec{V}_{\text{др}}\right) \times \vec{H}$ , т.е.  $m\dot{\vec{V}}_{\text{др}} + m\dot{\vec{u}} = q\vec{E} + \frac{q}{c}\vec{u} \times \vec{H} + \frac{q}{c}\vec{V}_{\text{др}} \times \vec{H}$ . Заменяем это уравнение на два для каждой

компоненты и с учетом  $\vec{V}_{\text{др}} = \text{const}$ , т.е.  $\dot{\vec{V}}_{\text{др}} = 0$ , получим уравнение для скорости дрейфа:  $0 = q\vec{E} + \frac{q}{c}\vec{V}_{\text{др}} \times \vec{H}$ .

Домножим векторно на магнитное поле, получим:

$$q\vec{E} \times \vec{H} = \frac{q}{c}[\vec{H}[\vec{V}_{\text{др}} \times \vec{H}]].$$

С учетом правила  $\vec{a} \times [\vec{b} \times \vec{c}] = \vec{b}(\vec{a}\vec{c}) - \vec{c}(\vec{a}\vec{b})$ , получим

$$q\vec{E} \times \vec{H} = \frac{q}{c}\vec{V}_{\text{др}} H^2,$$

откуда  $\vec{V}_{\text{др}} = c \frac{\vec{E} \times \vec{H}}{H^2}$  – скорость дрейфа. (3.3)

$$\left[\frac{\text{см}}{\text{с}}\right] V_{\text{др}} = c \frac{E}{H} = 10^8 \frac{E [\text{В/см}]}{H [\text{Э}]}.$$

Скорость дрейфа не зависит от знака заряда и от массы. Из соотношения (3.3) видно, что при  $E > H$  скорость дрейфа становится больше скорости света, а значит, теряет смысл. И дело не в том, что необходимо учитывать релятивистские поправки. При  $E > H$  будет нарушено условие дрейфового приближения и частица перейдет в режим непрерывного ускорения. Условие дрейфового приближения для дрейфа заряженных частиц в магнитном поле заключается в том, что влияние силы, вызывающей дрейф, должно быть незначительно в течение периода обращения частицы в магнитном поле,

только в этом случае скорость дрейфа будет постоянна. Это условие можно записать в виде  $\delta V = \frac{eE}{m} \delta t = \frac{eE}{m} \cdot \frac{1}{\omega_L} \ll V$ , откуда

чим условие применимости дрейфового движения в  $\vec{E} \perp \vec{H}$  полях:  $\frac{E}{H} \ll \frac{V}{c}$ .

Для определения возможных траекторий заряженных частиц в  $\vec{E} \perp \vec{H}$  полях рассмотрим уравнение движения для вращающейся компоненты скорости  $u$ :  $m\dot{\vec{u}} = \frac{q}{c} \vec{u} \times \vec{H}$ , откуда  $\dot{\vec{u}} = \frac{qH}{mc} [\vec{u} \times \vec{e}_H]$ .

Пусть плоскость  $(x, y)$  перпендикулярна магнитному полю. Вектор  $\vec{u}$  вращается с частотой  $\omega_L = \frac{qH}{mc}$  (электрон и ион вращаются в разные стороны) в плоскости  $(x, y)$ , оставаясь постоянным по модулю.

В плоскости скоростей  $(V_x, V_y)$  можно выделить четыре области характерных траекторий.

*Область 1.* На рис. 3.7 круг, описываемый неравенством  $0 < u < V_{др}$  в координатах  $(x, y)$ , соответствует трохоиде без петель (эпициклоида) с «высотой», равной  $2r_e$ , где  $r_e = u / \omega_L$  (рис. 3.8).

Если вектор начальной скорости частицы попадет в этот круг, то частица будет двигаться по эпициклоиде.

*Область 2.* Окружность, задаваемая уравнением  $u = V_{др}$ , соответствует циклоиде. При вращении  $\vec{u}$  вектор скорости на каждом периоде будет проходить через начало координат, т.е. в этот момент скорость будет равна нулю. Эти моменты соответствуют точкам в основании циклоиды. Траектория аналогична той, что описывает точка, находящаяся на ободе колеса радиуса  $r_c = \frac{V_{др}}{\omega_L}$ .

Высота циклоиды равна  $2r_c$ , т.е. пропорциональна массе частицы, поэтому ионы будут двигаться по гораздо более высокой циклоиде, чем электроны, что не соответствует схематическому изображению на рис. 3.8.

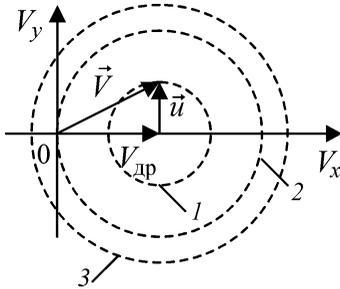


Рис. 3.7. Области характерных траекторий в плоскости скоростей

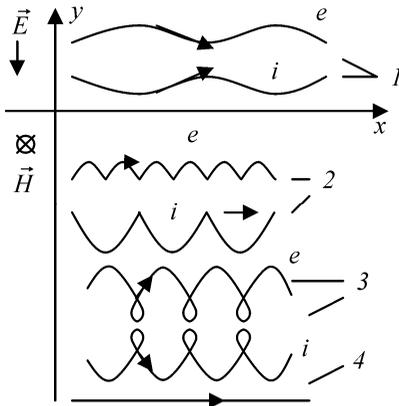


Рис. 3.8. Характерные траектории частиц в  $\vec{E} \perp \vec{H}$  полях: 1 – трохоида без петель; 2 – циклоида; 3 – трохоида с петлями; 4 – прямая

*Область 3.* Область вне круга, в которой  $u > V_{др}$ , соответствует трохоиде с петлями (гипоциклоида), высота которой  $2r_e > 2r_c$ . Петли соответствуют отрицательным значениям компоненты скорости  $V_x$ , когда частицы движутся в обратном направлении.

*Область 4.* Точка  $u = 0$  ( $\vec{V}_0 = \vec{V}_{др}$ ) соответствует прямой. Если запустить частицу с начальной скоростью  $\vec{V}_0 = \vec{V}_{др}$ , то силы действия электрического и магнитного полей в каждый момент времени уравновешены, поэтому частица движется прямолинейно. Можно представить, что все эти траектории соответствуют движению точек находящихся на колесе радиуса

$r_c = \frac{V_{др}}{\omega_l}$ , поэтому для всех траекторий продольный пространственный период  $L = 2\pi r_c =$

$$= \frac{2\pi V_{др}}{\omega_l}. \text{ За период } T = \frac{2\pi}{\omega_l} \text{ для}$$

всех траекторий происходит взаимная компенсация действия электрического и магнитного поля. Средняя кинетическая энергия частицы остается постоянной  $\bar{W}_k = W_{k0}$ . Важно еще раз отметить, что не зависимо от траектории, скорость дрейфа одинакова для частиц любого заряда. В случае невыполнения условия дрейфового приближения, т.е. при  $E > H$  действие электрического поля не ком-

пенсироваться действием магнитного, поэтому частица переходит в режим непрерывного ускорения. Все выводы, сделанные выше, верны, если вместо электрической силы  $\vec{F} = q\vec{E}$  использовать произвольную силу  $\vec{F}$ , действующую на частицу, причем  $\vec{F} \perp \vec{H}$ . Скорость дрейфа в поле произвольной силы:

$$\vec{V}_{\text{др}} = \frac{c}{q} \frac{\vec{F} \times \vec{H}}{H^2} \quad (3.4)$$

зависит от заряда. Например, для гравитационной силы  $\vec{F} = m\vec{g}$ :  
 $V_{\text{др}} = \frac{cm}{qH^2} [\vec{g} \times \vec{H}]$  – скорость гравитационного дрейфа.

## 3.2. Отклонение и фокусировка заряженных частиц в постоянном электрическом поле

### 3.2.1. Отклонение электронного пучка в однородном электрическом поле электростатического конденсатора

Наиболее простой является система в виде плоского конденсатора. Пусть пучок электронов запускается параллельно пластинам (рис. 3.9), найдем угол отклонения пучка  $\alpha$  в зависимости от энергии частиц  $W_{\text{к0}}$ . Поперечная скорость, приобретаемая в отклоняющем электрическом поле:  $V_{\perp} = \frac{eE}{m_e} t_{\text{пр}} = \frac{eE}{m_e} \frac{l}{V_0}$ , где  $t_{\text{пр}}$  – время пролета отклоняющей системы;  $l$  – протяженность области действия поля. Тангенс угла вылета электрона:

$$\text{tg } \alpha = \frac{V_{\perp}}{V_0} = \frac{eE}{mV_0^2} l = \frac{eU_{\text{откл}}}{2W_{\text{к0}}} \frac{l}{d},$$

где  $U_{\text{откл}}$  – отклоняющее напряжение;  $d$  – расстояние между пластинами конденсатора. Поперечное смещение электрона в пределах отклоняющей системы:  $\Delta y_1 = \frac{1}{2} \frac{eE}{m} t_{\text{пр}}^2 = \frac{1}{2} \frac{eE}{m} \frac{l^2}{V_0^2}$ , следовательно, тангенс угла прямой, соединяющей центр системы с точкой выле-

$$\text{та: } \operatorname{tg} \beta = \frac{\Delta y_1}{\frac{l}{2}} = \frac{eE}{m V_0^2} \frac{l}{2} = \frac{eU_{\text{откл}}}{2W_{\text{к0}}} \frac{l}{d} \Rightarrow \alpha = \beta, \text{ т.е. угол вылета сов-}$$

падает с углом  $\beta$ . Поперечное смещение на расстоянии  $x$  от центра системы определяется соотношением:

$$\Delta y = x \cdot \operatorname{tg} \alpha = \frac{eU_{\text{откл}}}{2W_{\text{к0}}} \frac{l}{d} x.$$

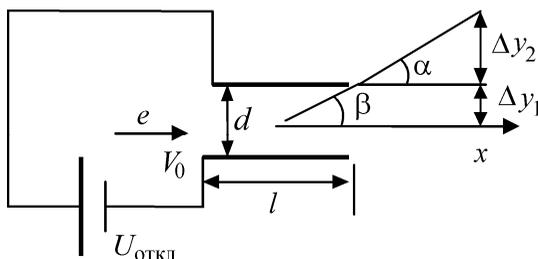


Рис. 3.9. Отклонение электронного пучка в поле плоского конденсатора

### 3.2.2. Фокусировка электронного пучка в однородном электрическом поле электростатического конденсатора

В поле плоского конденсатора можно не только отклонять, но и фокусировать пучки заряженных частиц. Благодаря различным значениям потенциала на верхней и нижней границах пучка (рис. 3.10), а значит, и различным скоростям частиц происходит фокусировка пучка. Такие системы используются в электронно-лучевых трубках. Можно оценить фокусное расстояние (расстояние от центра системы до точки фокусировки). Распределение по-

тенциала в отклоняющей системе:  $U(y) = U_0 + U_{\text{откл}} \frac{y}{d}$ . Тогда по-

тенциал в точках  $A$  и  $B$ :  $U_A = U_0 + U_{\text{откл}} \frac{\frac{d}{2} + \frac{\Delta h}{2}}{d}$ ,  $U_B = U_0 +$

$+U_{\text{откл}} \frac{\frac{d}{2} - \frac{\Delta h}{2}}{d}$ . Для малых углов отклонения:

$$\alpha \approx \operatorname{tg} \alpha = \frac{U_{\text{откл}}}{2\left(U_0 + \frac{1}{2}U_{\text{откл}}\right)} \frac{l}{d} \approx (U_{\text{откл}} \ll U_0) \approx \frac{U_{\text{откл}}}{2U_0} \frac{l}{d};$$

$$\alpha_1 \approx \operatorname{tg} \alpha_1 = \frac{U_{\text{откл}}}{2\left(U_0 + U_{\text{откл}} \left(\frac{\frac{d}{2} + \frac{\Delta h}{2}}{d}\right)\right)} \frac{l}{d} = \frac{U_{\text{откл}} l}{2U_0 d + U_{\text{откл}} (d + \Delta h)};$$

$$\alpha_2 \approx \operatorname{tg} \alpha_2 = \frac{U_{\text{откл}} l}{2U_0 d + U_{\text{откл}} (d - \Delta h)}.$$

Разность углов отклонения частиц на границах пучка:

$$\Delta\alpha = \alpha_1 - \alpha_2 = U_{\text{откл}} l \frac{U_{\text{откл}} (d + \Delta h - d + \Delta h)}{(2U_0 d + U_{\text{откл}} (d - \Delta h))(2U_0 d + U_{\text{откл}} (d + \Delta h))} \approx$$

$$\approx \frac{U_{\text{откл}}^2 l \Delta h}{2U_0^2 d^2} \approx \frac{2\alpha^2}{l} \Delta h.$$

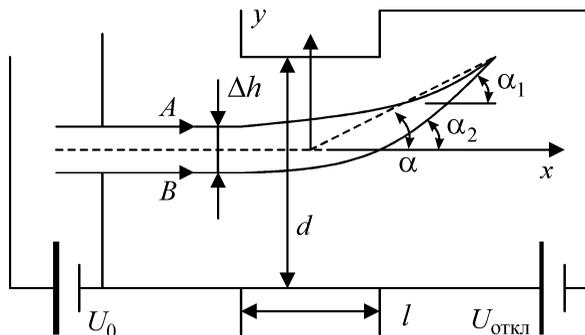


Рис. 3.10. Фокусировка электронного пучка в поле плоского конденсатора

Тогда фокусное расстояние можно оценить соотношением:

$$f = \frac{\Delta h}{2} \operatorname{ctg} \frac{\Delta\alpha}{2} = \frac{\Delta h}{2 \operatorname{tg} \frac{\Delta\alpha}{2}} \approx \frac{\Delta h}{\Delta\alpha} = \frac{l}{2\alpha^2}.$$

Таким образом, с ростом угла отклонения уменьшается расстояние до точки фокусировки, это является причиной выпуклости экранов.

### 3.2.3. Отклонение в однородном магнитном поле, ограниченном в пространстве

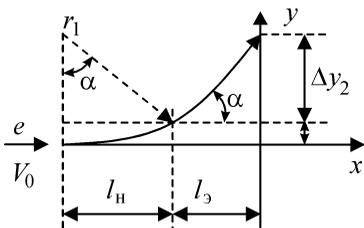


Рис. 3.11. Отклонение пучка в поперечном магнитном поле

$$-\sqrt{r_{\text{Л}}^2 - l_{\text{H}}^2}, \text{ за пределами } -\Delta y_2 = l_3 \operatorname{tg} \alpha = l_3 \frac{l_{\text{H}}}{\sqrt{r_{\text{Л}}^2 - l_{\text{H}}^2}}.$$

Суммарное отклонение:

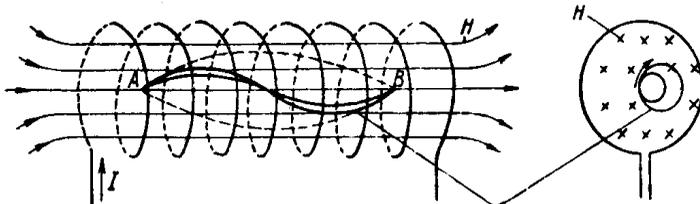
$$\Delta y = \Delta y_1 + \Delta y_2 = r_{\text{Л}} + \frac{l_{\text{H}}(l_{\text{H}} + l_3) - r_{\text{Л}}^2}{\sqrt{r_{\text{Л}}^2 - l_{\text{H}}^2}},$$

$$\text{где } r_{\text{Л}} = \frac{V_0}{\frac{eH}{mc}}.$$

Рассмотрим систему, в которой поперечное к движению пучка однородное магнитное поле существует в ограниченном пространстве протяженности  $l_{\text{H}}$  (рис. 3.11). Магнитное поле будет разворачивать частицы, отклонение в поперечном направлении в пределах действия магнитного поля  $\Delta y_1 = r_{\text{Л}} -$

### 3.2.4. Фокусировка пучка в продольном однородном магнитном поле

В продольном однородном магнитном поле фокусировка происходит в силу того, что вышедшие из одной точки частицы после совершения одного оборота по ларморовской окружности возвращаются на исходную силовую линию магнитного поля (рис. 3.12).



Электронные траектории

Рис. 3.12. Фокусировка в однородном продольном магнитном поле

Проекция движения частиц на перпендикулярную к силовым линиям плоскость представляет собой пучок окружностей, имеющих общую точку. Если угол расходимости пучка  $\alpha$  невелик, то фокусировка моноэнергетического пучка произойдет через один оборот на расстоянии  $l = t_{\text{л}} V \cos \alpha \approx 2\pi m V c / (eH)$ , где  $t_{\text{л}} = 2\pi m c / (eH)$  – период вращения по ларморовской окружности. Таким образом, расстояние до места фокусировки пучка зависит от скорости и массы частиц, и продольное однородное магнитное поле может быть использовано для энерго- и масс-сепарации частиц.

### 3.2.5. Фокусировка пучка в поперечном однородном магнитном поле энергоанализатора или массесепаратора

Благодаря зависимости радиуса вращения в магнитном поле от поперечной скорости  $V_{\perp}$  и массы  $m$  заряженной частицы возможно их разделение (сепарация) по энергиям и массам, а также фокусировка как в поперечном, так и в продольном однородном магнитном поле. В поперечном магнитном поле наиболее распространенной является схема с полукруговой фокусировкой (рис. 3.13). Выходящий из точечного источника  $A$  перпендикулярно силовым линиям пучок моноэнергетических частиц будет фокусироваться после полуоборота на расстоянии  $AB = 2r_{\text{л}}$ . Фокусировка частиц, вылетевших под одинаковым углом  $\alpha$  к центральной траектории

пучка, происходит из-за того, что круговые траектории частиц имеют одинаковые радиусы, и их траектории опираются на диаметры, расположенные под тем же углом  $\alpha$ , что и касательные к траекториям в начальной точке:

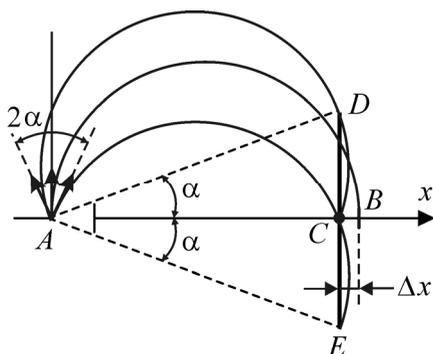


Рис. 3.13. Фокусировка пучка в поперечном магнитном поле

пучка, происходит из-за того, что круговые траектории частиц имеют одинаковые радиусы, и их траектории опираются на диаметры, расположенные под тем же углом  $\alpha$ , что и касательные к траекториям в начальной точке:

$$AC = AD \cos \alpha = AE \cos \alpha, \quad AD = AE = 2r_{\text{л}},$$

где  $r_{\text{л}} = \frac{c}{qH} \sqrt{2W_{\text{к}}} \sqrt{m}$ . Ширина щели, необходимая для прохождения всего пучка, зависит от расходимости  $2\alpha$  входящего пучка:

$$\Delta x = CB = AB - AC = 2r_{\text{л}}(1 - \cos \alpha).$$

Если известна масса и заряд, то можно определить энергию (энергоанализатор):  $m, q \rightarrow W_{\text{к}}$ .

Если известна энергия и заряд, то можно определить массу (масс-сепаратора):  $W_{\text{к}}, q \rightarrow m$ .

Если известна масса и энергия, то можно определить заряд (зарядоанализатор):  $m, W_{\text{к}} \rightarrow q$ .

### 3.2.6. Отклонение и фокусировка ионного пучка в неоднородном электрическом поле цилиндрического конденсатора (энергоанализатор)

Хорошую фокусировку позволяет получить цилиндрический конденсатор. Электрическое поле цилиндрического конденсатора обратно пропорционально расстоянию от центра системы:  $E(r) = c/r$ , так как по теореме Гаусса:  $E \cdot 2\pi \cdot r \cdot l = Q$ , т.е.  $E = \frac{Q}{2\pi l r} = \frac{c}{r}$ .

Следовательно, уравнение для потенциала  $\frac{d\varphi}{dr} = -\frac{c}{r}$ , тогда

$$\frac{d\varphi}{c} = -\frac{dr}{r} \Rightarrow c = \frac{\Delta\varphi}{\ln \frac{R_2}{R_1}}, \text{ где } R_1, R_2 - \text{ радиусы цилиндров (рис. 3.14).}$$

Таким образом, электрическое поле в цилиндрическом конденсаторе:  $E(r) = \frac{U_{\text{откл}}}{r \ln \frac{R_2}{R_1}}$ , где  $U_{\text{откл}} = U_2 - U_1$ ,  $U_1, U_2$  – потенциалы внутреннего и внешнего цилиндра. Через узкую выходную щель будут «успешно» проходить только частицы, имеющие круговые траектории и скорости, удовлетворяющие условию:

$$\frac{mV_0^2}{R_0} = qE(R_0)$$

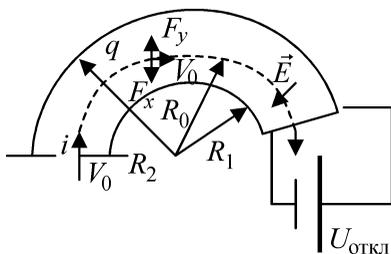


Рис. 3.14. Отклонение пучка в цилиндрическом конденсаторе

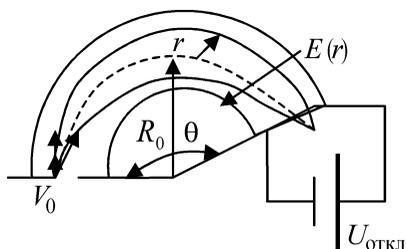


Рис. 3.15. Фокусировка пучка в цилиндрическом конденсаторе

(остальные попадут на стенки цилиндра), т.е. частицы, имеющие кинетическую энергию:

$$W_{к0} = \frac{1}{2} \frac{q \cdot U_{откл}}{\ln \frac{R_2}{R_1}}$$

уравнения движения для некруговых траекторий в полярных координатах введем угловую скорость  $\omega = \frac{V}{R}$  и угловое ускорение  $R\omega^2$ . На оси угловая скорость  $\omega_0 = \frac{V_0}{R_0}$ . Для центральной траектории выполняется баланс электрической и эффективной центробежной сил:

$$qE_0 = \frac{mV^2}{R_0} = mR_0\omega_0^2. \text{ Для не-}$$

центральной траектории уравнение движения:  $m\ddot{R} = mR\omega^2 - qE(R)$  (рис. 3.15). Исходя из равенства потока электрического поля  $E_0R_0 = ER \Rightarrow E(R) = E_0 \frac{R_0}{R}$ . Удобно рассмотреть отклонение траектории от круговой:  $r = R - R_0$  ( $r \ll R$ ). Тогда уравнение движения можно представить в виде:

$m\ddot{r} = mR\omega^2 - qE_0 \left(1 - \frac{r}{R}\right)$ . С учетом постоянства в поле центральных сил секторальной скорости  $RV = R^2\omega = R_0^2\omega_0 = \text{const}$  выполняется соотношение  $\omega = \omega_0 \frac{R_0^2}{R^2}$ , тогда получим уравнение:

$$m\ddot{r} + mR_0\omega_0^2 \left(1 - \frac{r}{R}\right) - m\omega_0^2 \frac{R_0^4}{(R_0 + r)^3} = 0. \text{ Приведем его к виду:}$$

$$\ddot{r} + \omega_0^2 \frac{R_0^2}{R_0 + r} - \omega_0^2 \frac{R_0^4}{(R_0 + r)^3} = 0 \quad \text{или} \quad \ddot{r} + \omega_0^2 \left( \frac{R_0^2 (R_0 + r)^2 - R_0^4}{(R_0 + r)^3} \right) = 0, \quad \text{в}$$

результате преобразований получим уравнение:

$$\ddot{r} + 2 \frac{R_0^3 r \omega_0^2}{(R_0 + r)^3} + \omega_0^2 \frac{r^2}{(R_0 + r)^3} = 0. \quad \text{Пренебрегая } r^2 \text{ и } r^3, \text{ имеем гармо-}$$

нические колебания:  $\ddot{r} + 2\omega_0^2 r = 0$ , решение которого представляет собой колебания около круговой траектории с полупериодом  $\theta = \frac{T}{2} = \frac{\pi}{\sqrt{2}} = 127^\circ 17'$ , т.е. после поворота на этот угол пучок фокусируется на круговой траектории (фокусировка по Юзу и Рожанскому).

### 3.3. Элементы электронной оптики

#### 3.3.1. Аналогия световой и электронной оптики

До сих пор рассматривалось движение отдельных частиц в электрическом и магнитном полях. Электронная оптика изучает законы распространения пучков заряженных частиц – электронов и ионов – в электрическом и магнитном полях. Пучки в электронной линейной оптике считаются достаточно редкими, так что электрические и магнитные микрополя от собственного объемного заряда пучка пренебрежимо малы по сравнению с макрополями отклоняющей системы. Уже первые эксперименты в конце XIX в. с катодными лучами показали, что законы распространения электронных лучей подобны законам распространения световых лучей в геометрической оптике. И дело вовсе не в том, что электроны можно считать электронной волной. Комптоновские длины волн электрона  $\lambda = \frac{h}{mV} = \frac{12,25}{\sqrt{U}} \text{ \AA}$  много меньше характерных размеров

оптических систем, т.е. электроны можно считать частицей. Аналогия между движением заряженной частицы и распространением света более фундаментальна, и лежит она в существовании вариационного принципа. В геометрической световой оптике

этот принцип имеет название принципа Ферма:  $\delta \int_{a_1}^{a_2} n dl = 0$ , т.е.

$\delta L = 0$ , где  $L = \int_{a_1}^{a_2} n dl$  – оптическая длина пути света;  $n = \text{const}$  –

показатель преломления. Оптическая длина реального пути света должна быть минимальна (свет распространяется по такому пути, на котором он тратит наименьшее время). Свет распространяется прямолинейно. В механике вариационный принцип имеет вид:

$\delta \int_{t_1}^{t_2} L dt = 0$ , где  $L = \frac{mV^2}{2} - Ze\varphi + \frac{Ze}{c} \vec{A} \cdot \vec{V}$ ;  $\vec{A}$  – векторный потенциал

( $\vec{H} = \text{rot } \vec{A}$ );  $L$  – функция Лагранжа. Вариация интеграла равна изменению этого интеграла при изменении обобщенных координат:

$$\delta \int_{t_1}^{t_2} L(q_i, \dot{q}_i) dt = \int_{t_1}^{t_2} L(q_i + \delta q_i, \dot{q}_i + \delta \dot{q}_i) dt - \int_{t_1}^{t_2} L(q_i, \dot{q}_i) dt.$$

То, что вариация равна нулю, говорит о том, что этот интеграл на действительной траектории имеет экстремум (рис. 3.16). Если  $H = 0$ , то функция Лагранжа  $L = T - U$ , где  $T$  – кинетическая энер-

гия, а  $U$  – потенциальная энергия. Величина  $\int_{t_1}^{t_2} (T - U) dt = S$  назы-

вается *действием*, а вариационный принцип называется *принципом наименьшего действия*:  $\delta S = 0$ . Принцип наименьшего действия можно записать через обобщенный импульс, который равен

$p = \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} = mV + \frac{Ze}{c} A$ :  $\delta \int_{a_1}^{a_2} p dl = 0$  – принцип Мопертюи для движе-

ния материального тела в постоянном потенциальном поле аналогичен принципу Ферма геометрической оптики для световых лучей.

При  $H = 0$   $\delta \int_{a_1}^{a_2} V dl = 0$ . Покажем, что принцип Ферма эквива-

лентен закону преломления геометрической оптики (рис. 3.17). Оптическая длина  $L = l_1 n_1 + l_2 n_2$ , ее вариация:

$$\begin{aligned} \delta L &= n_1 \delta l_1 + n_2 \delta l_2 \approx \\ &\approx -n_1 \delta x \cdot \sin \alpha_1 + n_2 \delta x \cdot \sin \alpha_2 = 0, \end{aligned}$$

откуда следует закон преломления геометрической оптики:  $\frac{\sin \alpha_1}{\sin \alpha_2} = \frac{n_2}{n_1}$ . Получим аналогичный закон для электронной оптики.

Так как параллельная границе раздела компонента скорости не меняется (рис. 3.18), то  $V_1 \sin \alpha_1 = V_2 \sin \alpha_2$ . Следовательно,

$$\text{но, } \frac{\sin \alpha_1}{\sin \alpha_2} = \frac{V_2}{V_1}, \text{ или } \frac{\sin \alpha_1}{\sin \alpha_2} = \frac{\sqrt{U_2}}{\sqrt{U_1}}$$

(где  $U$  – ускоряющее напряжение) – закон преломления электронной оптики. Таким образом,  $\sqrt{U}$  – аналог показателя преломления.

Но у электронной оптики есть и существенные отличия от световой, они в основном состоят в следующем.

1. Отдельные лучи в световой оптике независимы – электронные лучи взаимодействуют друг с другом.

2. Показатель преломления для электронов всегда непрерывен, для света он, как правило, меняется скачком.

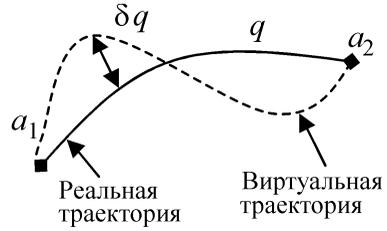


Рис. 3.16. Виртуальная и реальная траектории частиц

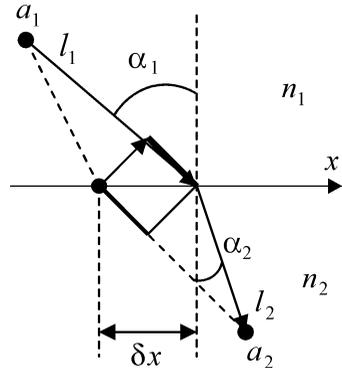


Рис. 3.17. Преломление света на границе двух сред

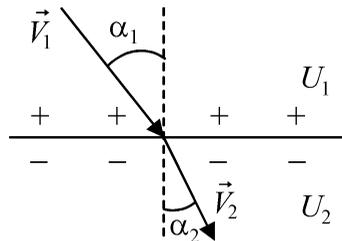


Рис. 3.18. Преломление пучка заряженных частиц на границе потенциалов

3. Диапазон изменения показателя преломления для электронов не ограничен, в оптике, как правило,  $n < 4$ .

4. Скорость электронов тем больше, чем больше показатель преломления, а скорость света наоборот.

5. Преломляющие поверхности для электронов, в отличие от световых лучей, не могут быть произвольными – распределение потенциалов всегда удовлетворяет уравнению Лапласа (линейная электронная оптика) или Пуассона (нелинейная электронная оптика).

### 3.3.2. Потенциал аксиально-симметричного электростатического поля

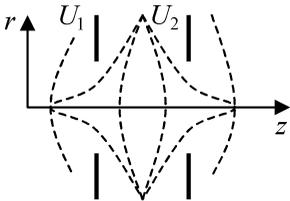


Рис. 3.19. Аксиально-симметричное поле диафрагм

Задание преломляющих поверхностей в виде сеток достаточно сложно технически, поэтому часто используют диафрагмы с аксиально-симметричным распределением потенциала  $U(r, z)$  (рис. 3.19).

Так как  $U(-r, z) = U(r, z)$ , то в результате разложения  $U$  по  $r$  будут только четные степени:

$$U(r, z) = b_0(z) + b_2(z)r^2 + b_4(z)r^4 + \dots + b_{2k}(z)r^{2k}.$$

Потенциал удовлетворяет уравнению Лапласа:

$$\frac{\partial^2 U}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial U}{\partial r} + \frac{\partial^2 U}{\partial z^2} = 0.$$

С учетом 
$$\frac{\partial^2 U}{\partial r^2} = 2b_2(z) + 12b_4(z)r^2 + 30b_6(z)r^4 + \dots;$$

$$\frac{1}{r} \frac{\partial U}{\partial r} = 2b_2(z) + 4b_4(z)r^2 + 6b_6(z)r^4 + \dots;$$

$$\frac{\partial^2 U}{\partial z^2} = b_0''(z) + r^2 b_2''(z) + r^4 b_4''(z) + \dots;$$

уравнение Лапласа переписывается в виде:

$$b_0''(z) + 4b_2(z) + (b_2''(z) + 16b_4(z))r^2 + (b_4''(z) + 36b_6(z))r^4 + \dots = 0.$$

Приравнявая к нулю коэффициенты при различных степенях  $r$ , получим систему:

$$\begin{cases} b_0''(z) + 4b_2(z) = 0; \\ b_2''(z) + 16b_4(z) = 0; \\ b_4''(z) + 36b_6(z) = 0; \\ \dots \\ \dots \end{cases} \Leftrightarrow \begin{cases} b_2 = -\frac{b_0''}{4}; \\ b_4 = -\frac{b_2''}{16} = \frac{b_0^{IV}}{64} = \frac{b_0^{IV}}{(2!)^2 2^4}; \\ b_6 = -\frac{b_4''}{32} = -\frac{b_0^{IV}}{(3!)^2 2^6}; \\ \dots \\ \dots \end{cases}$$

С учетом  $b_0(z) = U(0, z) = U(z)$  (потенциал на оси) получим распределение потенциала в пространстве в виде:

$$U(r, z) = U(z) - \left(\frac{r}{2}\right)^2 U''(z) + \frac{1}{2^2} \left(\frac{r}{2}\right)^4 U^{IV}(z) - \frac{1}{(3!)^2} \left(\frac{r}{2}\right)^6 U^{IV}(z) + \dots + (-1)^k \frac{U^{(2k)}(z)}{(k!)^2} \left(\frac{r}{2}\right)^{2k} + \dots$$

Таким образом, распределение потенциала аксиально-симметричного поля определяется значением потенциала на оси.

### 3.3.3. Движение заряженных частиц в аксиально-симметричном электрическом поле

Для приосевых электронов ( $r^2/L_{\text{хар}}^2 \ll r/L_{\text{хар}}$ , где  $L_{\text{хар}}$  – характерная длина системы), которые еще называют *параксиальными*, можно получить уравнение траектории. Так как  $E_\theta = 0$ , то электроны не вращаются вокруг оси  $z$ . Другие компоненты электрического поля определяются из соотношений:

$$\begin{aligned} \frac{\partial U}{\partial z} &= -E_z = U'(z) - \frac{r^4}{4} U'''(z) \approx U'(z); \\ \frac{\partial U}{\partial r} &= -E_r = -\frac{r}{2} U''(z) + \frac{r^3}{16} U^{IV}(z) \approx -\frac{r}{2} U''(z). \end{aligned}$$

Уравнение движения для электрона:

$$\begin{cases} m\dot{r} = -eE_r = -\frac{er}{2}U''(z); \\ m\ddot{z} = eU'(z). \end{cases} \quad (3.4)$$

Первое уравнение системы замечательно тем, что в полях с аксиальной симметрией радиальная фокусирующая или расфокусирующая сила пропорциональна удалению частицы от оси. Возьмем второе уравнение системы (3.4). Учитывая, что левые части уравнения содержат производные по времени, а правые производные по  $z$ , можно использовать переход к производной по переменной  $z$ :

$$\frac{d^2z}{dt^2} = \frac{d}{dt} \frac{dz}{dt} = \frac{dz}{dt} \frac{d}{dz} \frac{dz}{dt} = \frac{1}{2} \frac{d}{dz} \left( \frac{dz}{dt} \right)^2 = \frac{e}{m} \frac{dU(z)}{dz}.$$

Интегрируя последнее уравнение с учетом граничного условия при  $z = 0$   $U(z) = 0$  и  $\left. \frac{dz}{dt} \right|_0 = 0$  (пренебрегаем начальной скоростью частицы), получим  $\frac{dz}{dt} = \sqrt{2eU(z)/m}$ .

Возьмем первое уравнение системы (3.4) и перейдем к производной по переменной  $z$ :  $\frac{d^2r}{dt^2} = \frac{d}{dt} \frac{dr}{dt} = \frac{dz}{dt} \frac{d}{dz} \left( \frac{dr}{dz} \frac{dz}{dt} \right) = -\frac{e}{2m} r U''(z)$ .

Последнее уравнение перепишем в виде:  $\sqrt{U(z)} \frac{d}{dz} \left( \sqrt{U(z)} \frac{dr}{dz} \right) = -\frac{r}{4} U''(z)$ , получим уравнение траектории  $r(z)$  параксиального пучка:

$$\frac{d^2r}{dz^2} + \frac{U'(z)}{2U(z)} \frac{dr}{dz} + \frac{U''(z)}{4U(z)} r = 0. \quad (3.5)$$

Это уравнение называется *основным уравнением электронной оптики*.

Проведем анализ уравнения (3.5).

1. В уравнение входит только  $U(z)$ , траектория зависит только от значения потенциала на оси.

2. В уравнение не входит  $\frac{e}{m}$ , поэтому траектории электронов и ионов не отличаются.

3. Уравнение линейно и однородно относительно  $U(z)$ , следовательно, можно заменить на  $kU(z)$ .

4. Уравнение линейно и однородно относительно  $r(z)$ , а значит, можно заменить на  $kr(z)$ .

Таким образом, полученное линейное однородное дифференциальное уравнение 2-го порядка относительно  $U(z)$  и  $r(z)$  показывает, что возможно масштабное моделирование, т. е. если потенциал во всех точках пространства увеличить в  $k$  раз (увеличить потенциал на всех электродах системы в одинаковое число раз), то уравнение, а следовательно, и траектория электрона не изменятся. Кроме того, можно сделать вывод, что любое аксиально-симметричное поле есть линза, так как в любой плоскости сохраняется подобие траекторий относительно расстояния от оси (рис. 3.20):

$$\frac{r_{A'}}{r_{A''}} = \frac{r_{B'}}{r_{B''}}.$$

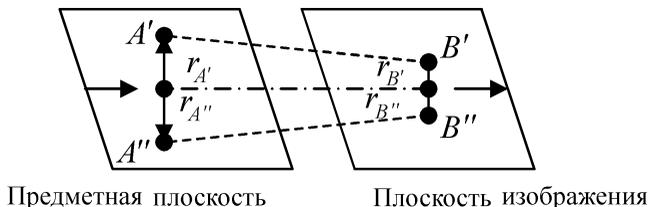


Рис. 3.20. Изображение в линзе

Фокусная сила линзы  $F_r = -\frac{er}{2}U''(z)$  возрастает с удалением от оси.

Линза будет фокусирующей (собирающей), если  $U'' > 0$ .

Линза будет расфокусирующей (рассеивающей), если  $U'' < 0$ .

### 3.3.4. Параметры увеличения в электронной линзе

Основное уравнение электронной оптики (3.5) является однородным дифференциальным уравнением относительно  $r$  второго порядка. Решение, как известно, можно представить в виде суммы двух частных решений:

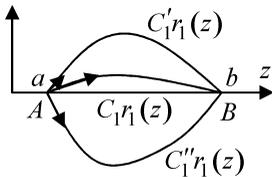


Рис. 3.21. Траектории осевых электронов в линзе

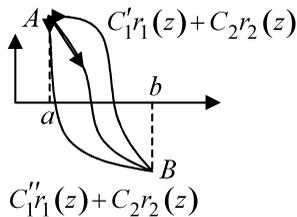


Рис. 3.22. Траектории неосевых электронов в линзе

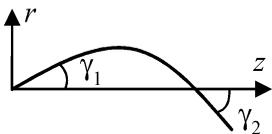


Рис. 3.23. Угловое увеличение в линзе

$$r(z) = C_1 r_1(z) + C_2 r_2(z),$$

где  $C_1$  и  $C_2$  – произвольные константы. Пусть  $C_2 = 0$ , а частное решение  $r_1(z)$  таково, что при  $z = a$  и  $z = b$   $r_1(a) = r_1(b) = 0$ . Тогда  $r(z) = C_1 r_1(z)$  – это совокупность траекторий, которые пересекают ось в точках  $A$  и  $B$ , т.е. в точке  $B$  соберутся все электроны, вышедшие из точки  $A$  (рис. 3.21). При  $C_2 \neq 0$   $r(a) = C_2 r_2(a)$  и  $r(b) = C_2 r_2(b)$  для всех электронов, т.е. если источник поместить в точку  $A$ , то в точке  $B$  будет его изображение (рис. 3.22). Тогда линейное увеличение линзы:  $M = \frac{r_2(b)}{r_2(a)}$ .

Рассмотрим снова траекторию с источником на оси, т.е.  $r(z) = C_1 r_1(z)$  (рис. 3.23). Угловое увеличение линзы определяется как отношение тангенсов углов наклона траектории к оси:

$$\Gamma = \frac{\operatorname{tg} \gamma_2}{\operatorname{tg} \gamma_1} = \frac{r_1'(b)}{r_1'(a)}.$$

Возьмем основное уравнение электронной оптики в виде:  $\sqrt{U(z)} \frac{d}{dz} \left( \sqrt{U(z)} \frac{dr}{dz} \right) = -\frac{r}{4} U''(z)$ . Для частного решения  $r_1(z)$ :  $\sqrt{U(z)} \frac{d}{dz} \left( \sqrt{U(z)} \frac{dr_1}{dz} \right) = -\frac{r_1}{4} U''(z)$ . Для частного решения  $r_2(z)$ :  $\sqrt{U(z)} \frac{d}{dz} \left( \sqrt{U(z)} \frac{dr_2}{dz} \right) = -\frac{r_2}{4} U''(z)$ . Первое умножим на  $r_2$ , второе – на  $r_1$  и вычтем их:  $\sqrt{U(z)} \left( r_2 \frac{d}{dz} \left( \sqrt{U(z)} \frac{dr_1}{dz} \right) - r_1 \frac{d}{dz} \left( \sqrt{U(z)} \frac{dr_2}{dz} \right) \right) = 0$ . Следовательно,

$\frac{d}{dz}(\sqrt{U}(r_2 r_1' - r_1 r_2')) = 0$ , т.е.  $\sqrt{U}(r_2 r_1' - r_1 r_2') = \text{const}$ . Для  $z = a$  и  $z = b$   $r_1(a) = r_1(b) = 0$ , т.е.

$$\sqrt{U(a)} r_2(a) r_1'(a) = \sqrt{U(b)} r_2(b) r_1'(b)$$

$$\text{или } \frac{\sqrt{U(a)}}{\sqrt{U(b)}} = \frac{r_2(b) r_1'(b)}{r_2(a) r_1'(a)}.$$

Получаем соотношение  $M \cdot \Gamma = \frac{\sqrt{U(a)}}{\sqrt{U(b)}}$ , которое является аналогом

теоремы Лагранжа – Гельмгольца:  $M \cdot \Gamma = \frac{n_1}{n_2}$ .

Найдем фокусные расстояния электронной линзы. Возьмем частные решения  $r_1(z)$  и  $r_2(z)$ , проходящие через фокусы. Так же, как это было сделано ранее, напомним для них основные уравнения электронной оптики, домножим на  $r_1$  и  $r_2$  и вычтем, получим:

$$\sqrt{U}(r_2 r_1' - r_1 r_2') = \text{const}.$$

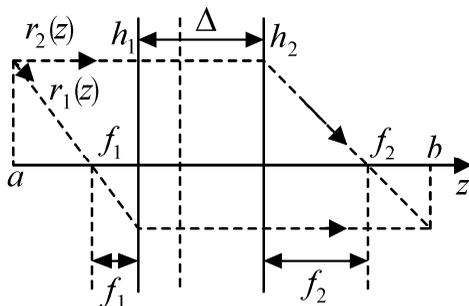


Рис. 3.24. Геометрические параметры линзы

Для предметного пространства:

$$\sqrt{U(a)} r_2(a) r_1'(a) = c.$$

Для пространства изображения:

$$-\sqrt{U(b)}r_1'(b)r_2'(b) = c.$$

Тогда фокусные расстояния слева  $f_1$  и справа  $f_2$  от главных плоскостей  $h_1$  и  $h_2$  электронной линзы можно определить через траектории, проходящие через фокус линзы  $r_1$  и параллельно оси  $r_2$  системы:

$$\text{мы: } f_2 = \frac{r_2(a)}{r_2'(b)}; \quad f_1 = \frac{r_1(b)}{r_1'(b)}. \quad \text{Отношение фокусных расстояний}$$

$$\left| \frac{f_2}{f_1} \right| = \frac{\sqrt{U(b)}}{\sqrt{U(a)}}.$$

### 3.3.5. Тонкие электростатические линзы

Рассмотрим тонкие линзы, главные плоскости которых находятся при  $z = a$  и при  $z = b$ . Для тонких линз расстояние между главными плоскостями много меньше фокусных расстояний  $(b - a) \ll f_1, f_2$ , т.е. главные плоскости сливаются. Линейное увеличение линзы

(рис. 3.25)  $M = \frac{f_1}{z_1} = \frac{f_2}{z_2}$ , следовательно,

$z_1 z_2 = f_1 f_2$ . Записав систему:

$$\begin{cases} l_1 = z_1 + f_1; \\ l_2 = z_2 + f_2; \\ z_1 z_2 = f_1 f_2, \end{cases}$$

из первых двух:  $\frac{f_1}{l_1} + \frac{z_1}{l_1} + \frac{f_2}{l_2} + \frac{z_2}{l_2} = 2$ , из третьего уравнения системы

$z_1 z_2 = (l_1 - z_1)(l_2 - z_2)$ . Из последнего соотношения

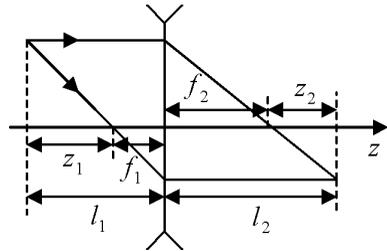


Рис. 3.25. Геометрические параметры тонкой оптической линзы

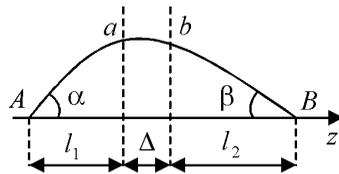


Рис. 3.26. Геометрические параметры тонкой электростатической линзы

$1 = \frac{z_1}{l_1} + \frac{z_2}{l_2}$ . Следовательно,  $\frac{f_1}{l_1} + \frac{f_2}{l_2} = 1$  – основное соотношение тонкой линзы. Возьмем основное уравнение электронной оптики в виде:  $\sqrt{U(z)} \frac{d}{dz} \left( \sqrt{U(z)} \frac{dr}{dz} \right) = -\frac{r}{4} U''(z)$ , которое можно привести к виду:

$$\frac{d}{dz} \left( \sqrt{U(z)} \frac{dr}{dz} \right) = -\frac{r(z) U''(z)}{4\sqrt{U(z)}}.$$

Проинтегрируем:

$$\sqrt{U(b)} \left( \frac{dr}{dz} \right)_b - \sqrt{U(a)} \left( \frac{dr}{dz} \right)_a = -\frac{1}{4} \int_a^b \frac{r(z) U''(z)}{\sqrt{U(z)}} dz.$$

Если линза – слабая, то  $r(a) \approx r(b)$ . Тогда заменяя  $\left( \frac{dr}{dz} \right)_b = -\text{tg} \beta = -\frac{r(b)}{l_2}$  и  $\left( \frac{dr}{dz} \right)_a = +\text{tg} \alpha = +\frac{r(a)}{l_1}$ , и вынося  $r(z)$  из под знака интеграла как множитель  $r(a)$ , получим:  $\frac{\sqrt{U(b)}}{l_2} + \frac{\sqrt{U(a)}}{l_1} = \frac{1}{4} \int_a^b \frac{U''(z)}{\sqrt{U(z)}} dz$  (сократили на  $r(a) \approx r(b)$ ). С уче-

том основного соотношения тонкой линзы  $\frac{f_1}{l_1} + \frac{f_2}{l_2} = 1$  получим фокусные расстояния слева и справа:  $\frac{1}{f_1} = \frac{1}{4\sqrt{U(a)}} \int_a^b \frac{U''(z)}{\sqrt{U(z)}} dz$  и

$$\frac{1}{f_2} = \frac{1}{4\sqrt{U(b)}} \int_a^b \frac{U''(z)}{\sqrt{U(z)}} dz.$$

Отношение фокусных расстояний:  $\frac{f_2}{f_1} = \frac{\sqrt{U(b)}}{\sqrt{U(a)}} = \frac{n_2}{n_1}$ . Возьмем

выражение для  $f_2$ :  $\frac{1}{f_2} = \frac{1}{4\sqrt{U(b)}} \int_a^b \frac{U''(z)}{\sqrt{U(z)}} dz$ . Проинтегрируем по частям ( $\int xdy = xy - \int ydx$ ), получим:

$$D = \frac{1}{f_2} = \frac{1}{4\sqrt{U(b)}} \left[ \frac{U'(b)}{\sqrt{U(b)}} - \frac{U'(a)}{\sqrt{U(a)}} \right] + \frac{1}{8\sqrt{U(b)}} \int_a^b \frac{(U'(z))^2}{U^{3/2}(z)} dz -$$

оптическая сила.

Если  $U'(a) = U'(b) = 0$  (т.е. на границе нет электрического поля), то линза всегда собирающая ( $D > 0$ ).

### 3.3.6. Основные типы электростатических линз

Для одиночной диафрагмы с круглым отверстием:  $\frac{1}{f_D} = \frac{E_{z1} - E_{z2}}{4U_d}$ , где  $E_{z1}$  и  $E_{z2}$  – напряженности электрических полей слева и справа от диафрагмы;  $U_d$  – потенциал диафрагмы. Для системы из двух линз – диафрагм с фокусами  $f_1$  и  $f_2$  и расстоянием между линзами  $l$  оптическая сила задается соотношением:  $\frac{1}{f} = \frac{1}{f_1} + \frac{1}{f_2} + \frac{l}{f_1 f_2}$ . В общем случае аксиально-симметричного поля траектория электрона описывается уравнениями:

$$\begin{cases} m\ddot{r} = -eE_r \approx -\frac{er}{2}U''(z); \\ m\ddot{z} = -eE_z \approx eU'(z), \end{cases}$$

т.е. фокусирующая сила определяется знаком второй производной от потенциала на оси системы. Если  $U''(z) > 0$ , то система – фокусирующая, если  $U''(z) < 0$ , то – расфокусирующая. На рис. 3.27 – 3.31 показаны примеры возможных типов электростатических линз.

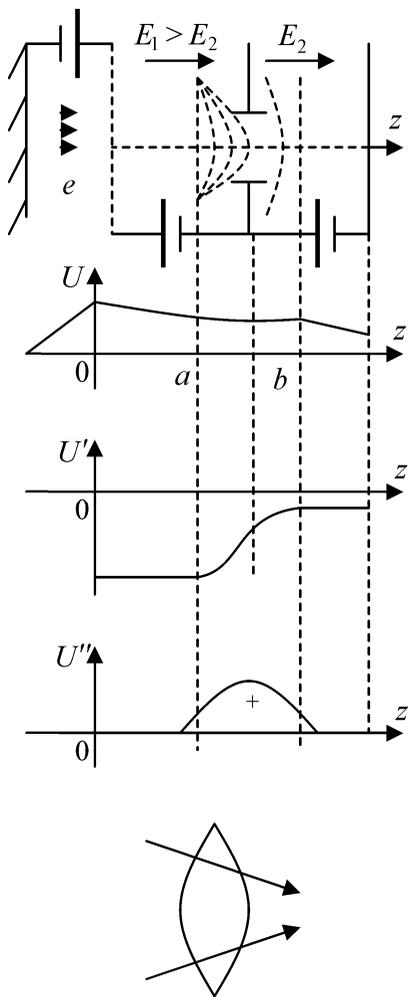


Рис. 3.27. Фокусирующая электростатическая линза с тормозящим электрическим полем

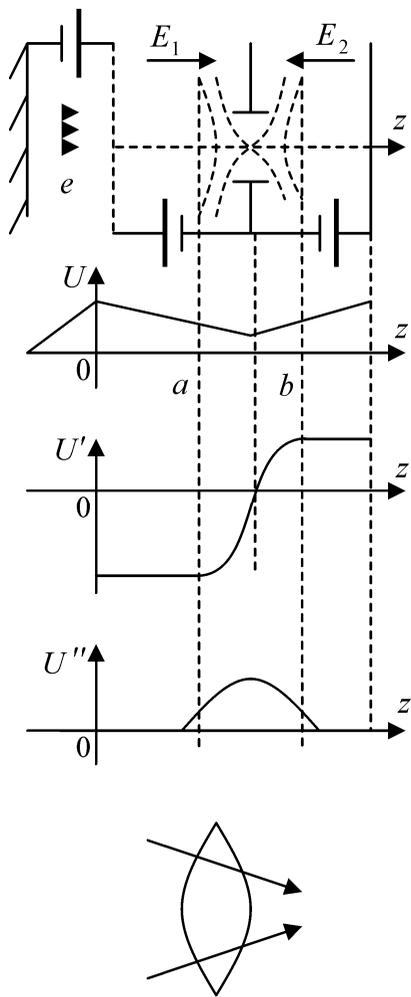


Рис. 3.28. Фокусирующая электростатическая линза с тормозящим и ускоряющим электрическим полем

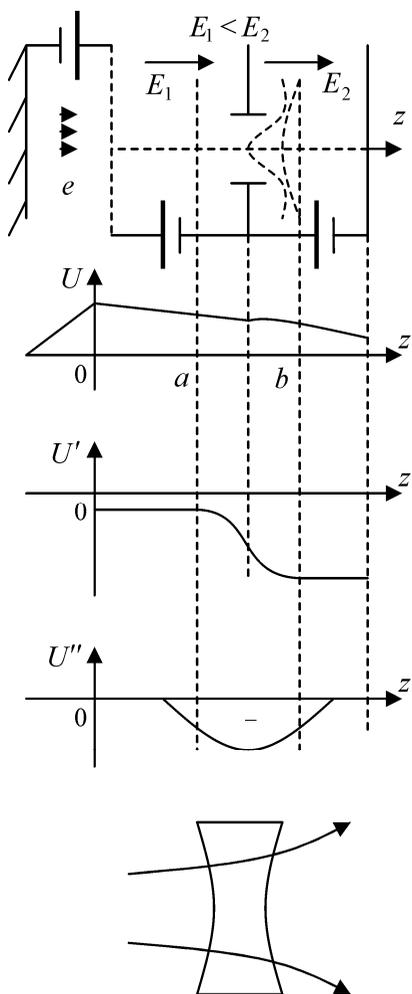


Рис. 3.29. Расфокусирующая электростатическая линза с тормозящим электрическим полем

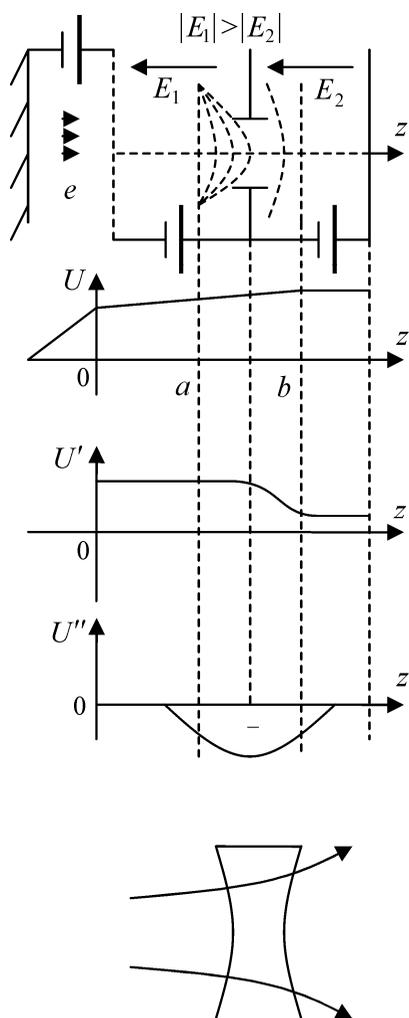


Рис. 3.30. Расфокусирующая электростатическая линза с ускоряющим электрическим полем

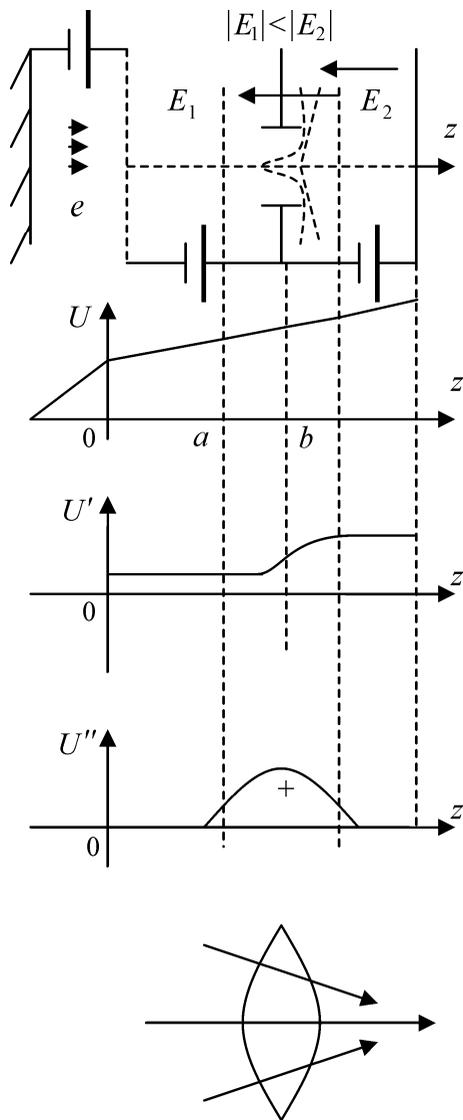


Рис. 3.31. Фокусирующая электростатическая линза с ускоряющим электрическим полем

### 3.4. Магнитные линзы

#### 3.4.1. Движение заряженных частиц в аксиально-симметричном магнитном поле

Фокусировку пучков в аксиально-симметричном магнитном поле проще всего продемонстрировать на примере параксиального пучка электронов, скорость которых вдоль оси системы много больше скорости в радиальном направлении  $V_z \gg V_r$ . На электрон

в магнитном поле действует сила Лоренца  $\vec{F} = -\frac{e}{c}\vec{V} \times \vec{B}$ . Радиальная составляющая этой силы является фокусирующей:  $F_r = -(e/c)V_\phi B_z$  (рис. 3.32). Азимутальная составляющая скорости электрона появляется за счет азимутальной составляющей силы Лоренца:  $F_\phi = -(e/c)(V_z B_r + V_r B_z) \approx -(e/c)V_z B_r$ , так как  $V_z \gg V_r$ .

Составляющая скорости  $V_z$  не меняет знака, радиальная составляющая магнитного поля  $B_r$  может менять знак, при этом азимутальная составляющая скорости электрона  $V_\phi$  будет уменьшаться (вращение замедляться), но направление вращения никогда не меняется, поэтому фокусирующая составляющая силы Лоренца  $F_r$

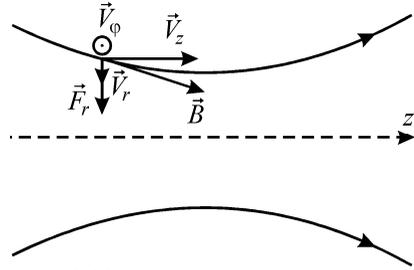


Рис. 3.32. Фокусировка в аксиально-симметричном магнитном поле

всегда сохраняет знак. Таким образом, магнитная линза – всегда собирающая. Скорость частицы в цилиндрической системе координат разложим по компонентам:  $\vec{V} = V_r \vec{e}_1 + V_\phi \vec{e}_2 + V_z \vec{e}_3 = \dot{r} \vec{e}_1 +$

$+r\dot{\phi} \vec{e}_2 + \dot{z} \vec{e}_3$ , тогда ускорение:  $\dot{\vec{V}} = \ddot{r} \vec{e}_1 + \dot{r} \dot{\phi} \vec{e}_1 + \dot{r} \ddot{\phi} \vec{e}_2 + r \ddot{\phi} \vec{e}_2 + r \dot{\phi} \dot{\phi} \vec{e}_2 +$   
 $+ \ddot{z} \vec{e}_3 + \dot{z} \dot{\phi} \vec{e}_3$  или  $\dot{\vec{V}} = (\ddot{r} - r\dot{\phi}^2) \vec{e}_1 + (2\dot{r}\dot{\phi} + r\ddot{\phi}) \vec{e}_2 + \ddot{z} \vec{e}_3$ , где  $\dot{\vec{e}}_1 =$   
 $= \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{\Delta \vec{e}_1}{\Delta t} = \dot{\phi} \vec{e}_2$ ;  $\dot{\vec{e}}_2 = \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{\Delta \vec{e}_2}{\Delta t} = -\dot{\phi} \vec{e}_1$ . Уравнения движения элек-

тронов в магнитном аксиально-симметричном поле  $\vec{B} = (B_r, B_z)$ ,  $B_\phi = 0$  можно записать в виде системы:

$$\begin{cases} \ddot{r} - r\dot{\phi}^2 = -\frac{e}{mc} r\dot{\phi} B_z - \text{радиальное движение;} \\ \frac{1}{r} \frac{d}{dt} (r^2 \dot{\phi}) = -\frac{e}{mc} (\dot{z} B_r - \dot{z} B_z) - \text{азимутальное движение;} \\ \ddot{z} = \frac{e}{mc} r\dot{\phi} B_r - \text{продольное движение.} \end{cases} \quad (3.6)$$

По теореме Гаусса:  $2\pi r B_r dz + \pi r^2 (B_{z+dz} - B_z) = 0$ , где первое слагаемое – поток через боковую поверхность условного цилиндра, а второе – разность потоков через торцы, тогда  $B_r = -\frac{r}{2} \frac{dB_z}{dz}$ . Учтем это соотношение при записи уравнений движения.

Рассмотрим второе уравнение для азимутального движения:  $\frac{1}{r} \frac{d}{dt} \left( r^2 \frac{d\phi}{dt} \right) = -\frac{e}{mc} \left( \frac{dz}{dt} \left( -\frac{r}{2} \frac{dB_z}{dz} \right) - \frac{dr}{dt} B_z \right)$ , т.е.  $\frac{d}{dt} \left( r^2 \frac{d\phi}{dt} \right) = +\frac{e}{mc} \left( \frac{r^2}{2} \frac{dB_z}{dz} + z B_z \frac{dr}{dt} \right)$ ; следовательно,  $d \left( r^2 \frac{d\phi}{dt} \right) = +\frac{e}{mc} d \left( \frac{r^2}{2} B_z \right) \Rightarrow d \left( r^2 \frac{d\phi}{dt} \right) = +\frac{e}{mc} d \left( \frac{r^2}{2} B_z \right) \Rightarrow r^2 \frac{d\phi}{dt} = \frac{er^2}{2mc} B_z + \text{const}$ . Тогда можно записать:

$$\frac{d\phi}{dt} = \frac{eB_z}{2mc} - \quad (3.7)$$

частота так называемой ларморовской прецессии. Линейная скорость  $V_\phi = r\dot{\phi}$  пропорциональна  $r$ , угловая скорость от расстояния не зависит, т.е. картинка вращается как целое.

Рассмотрим движение вдоль оси  $z$ :  $\frac{d^2 z}{dt^2} = \frac{e}{mc} r\dot{\phi} B_r = \left( \dot{\phi} = \frac{eB_z}{2mc} \right)$   
 $B_r = -\frac{r}{2} \frac{dB_z}{dz} = -\frac{e^2}{4m^2 c^2} B_z \frac{dB}{dz} r^2$ , т.е.

$$\frac{d^2 z}{dt^2} = -\frac{e^2}{4m^2 c^2} B_z \frac{dB_z}{dz} r^2 - \quad (3.8)$$

ускорение, пропорциональное  $r^2$ .

Теперь рассмотрим движение по радиусу:  $\frac{d^2 r}{dt^2} - \frac{e^2 r B_z^2}{4m^2 c^2} = -\frac{e^2 B_z^2}{2m^2 c^2} r$ , т.е.  $\frac{d^2 r}{dt^2} = -\frac{e^2 B_z^2}{4m^2 c^2} r$ . Перейдем от производной по  $t$  к производной по  $z$ :

$\frac{d}{dt} \frac{dr}{dt} = \frac{dz}{dt} \frac{d}{dz} \left( \frac{dz}{dt} \frac{dr}{dz} \right) = -\frac{e^2 B_z}{4m^2 c^2} r$ , с

учетом  $\frac{dz}{dt} = V_z = \sqrt{\frac{2eU}{m}}$  получим:

$$\frac{d^2 r}{dz^2} = -\frac{e^2 B_z^2}{8mc^2 U} r. \quad (3.9)$$

Следует помнить, что траектория частицы закручивается, и данное уравнение описывает траекторию в плоскости, которая вращается с ларморовской частотой.

Проинтегрируем дифференциальное уравнение (3.7), представив его в виде:  $\frac{d\varphi}{dz} \frac{dz}{dt} = \frac{eB_z}{2mc}$ , с учетом  $\frac{dz}{dt} = V_z = \sqrt{\frac{2eU}{m}}$ , получим

$\frac{d\varphi}{dt} = \sqrt{\frac{e}{8mc^2 U}} B_z$ , следовательно:

$$\varphi(z) = \sqrt{\frac{e}{8mc^2 U}} \int_a^b B_z dz. \quad (3.10)$$

Таким образом, угол поворота в магнитной линзе:

$$\varphi [\text{рад}] = \frac{0,15}{\sqrt{U_0 [\text{эВ}]}} \int_a^b B_z [\text{Гс}] dz. \quad (3.11)$$

Общие следствия из уравнений (3.9), (3.10):

- 1) траектории рассчитываются только по значениям  $B_z$ ;
- 2) в уравнения входят заряд и масса, следовательно, разные частицы двигаются по разным траекториям;
- 3) уравнения однородны относительно  $r$ , следовательно, аксиально-симметричное поле есть линза;
- 4) ускорение по радиусу всегда направлено к центру, т.е. магнитная линза всегда – собирающая.

### 3.4.2. Параметры тонкой магнитной линзы

Тонкая магнитная линза соответствует случаю, когда толщины линзы много меньше фокусных расстояний ( $\Delta \ll l_1, l_2$ ), а магнитное поле на оси быстро падает по мере удаления от линзы (рис. 3.33).

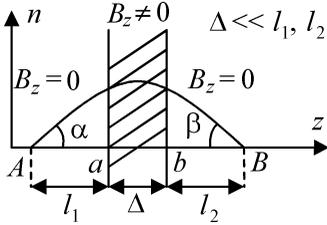


Рис. 3.33. Траектория частицы в магнитной линзе в плоскости, вращающейся с частотой ларморовской прецессии

ное поле на оси быстро падает по мере удаления от линзы (рис. 3.33). Проинтегрируем уравнение (3.9):

$$\int_a^b \frac{d^2 r}{dz^2} dz = - \int_a^b \frac{er}{8mc^2 U} B_z^2 dz.$$

Учитывая, что для тонкой магнитной линзы  $r(a) \approx r(z) \approx r(b)$  ( $z \in [a, b]$ ), получим:

$$\left( \frac{dr}{dz} \right)_b - \left( \frac{dr}{dz} \right)_a = - \frac{er}{8mc^2 U} \int_a^b B_z^2 dz.$$

При отсутствии магнитного поля слева и справа от линзы ( $B_z = 0$ )

можно принять  $\left( \frac{dr}{dz} \right)_a = \operatorname{tg} \alpha = \frac{r(a)}{l_1}$ ;  $\left( \frac{dr}{dz} \right)_b = -\operatorname{tg} \beta = -\frac{r(a)}{l_2}$ , тогда

$\frac{r(a)}{l_2} + \frac{r(a)}{l_1} = \frac{er(a)}{8mc^2 U} \int_a^b B_z^2 dz$ . Если сопоставить это уравнение с

уравнением для тонкой оптической линзы:  $\frac{1}{l_1} + \frac{1}{l_2} = \frac{1}{f}$ , то получим

величину оптической силы:

$$D = \frac{1}{f} = \frac{e}{8mc^2 U} \int_a^b B_z^2 dz. \quad (3.12)$$

Для фокусного расстояния:

$$\frac{1}{f} \left[ \frac{1}{\text{см}} \right] = \frac{0,022}{U_0 [\text{эВ}]} \int_a^b B_z^2 [\text{Гс}] dz. \quad (3.13)$$

Найдем оптическую силу для магнитной линзы витка с током (рис. 3.34), магнитное поле которого рассчитывается по известному закону Био – Савара:

$$H_0(z) = \frac{H_m}{\left(1 + \frac{z^2}{R^2}\right)^{3/2}}, \quad H_m = \frac{2\pi I}{cR}.$$

Подставив это выражение в (3.12), получим, что оптическая сила определяется из соотношения:

$$\frac{1}{f} = \frac{\pi^2 e I^2}{2mc^2 UR^2} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dz}{\left(1 + \frac{z^2}{R^2}\right)} = \frac{3\pi^3 e I^2}{16mc^2 UR},$$

а фокусное расстояние – из соотношения:

$$f [\text{см}] \approx 96,8 \frac{U_0 [\text{эВ}] R [\text{см}]}{I^2 [\text{А}]}. \quad (3.14)$$

Угол поворота  $\varphi = \sqrt{\frac{e}{8mcU}} \int_{-\infty}^{\infty} H(z) dz = \sqrt{\frac{e}{8mcU}} I$ . Для катушки из  $N$  витков вместо  $I$  берем  $NI$ , так что фокусное расстояние:

$$f [\text{см}] \approx 96,8 \frac{U_0 [\text{эВ}] R [\text{см}]}{(NI [\text{А}])^2}. \quad (3.15)$$

Угол поворота для катушки из  $N$  витков:

$$\varphi [\text{рад}] \approx 10,7 \frac{NI [\text{А}]}{\sqrt{U_0 [\text{эВ}]}}. \quad (3.16)$$

### 3.4.3. Аберрация электронных линз

Ранее было показано, что в аксиально-симметричных системах точная фокусировка происходит для парааксиальных пучков. При фокусировке широких или расходящихся пучков качество изображения ухудшается из-за расфокусировки как удаленных от оси электронов, так и расходящихся (рис. 3.35). Такие искажения изображения называются *геометрической аберрацией*.

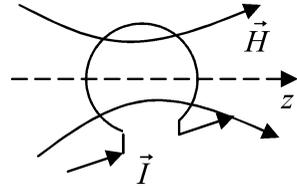


Рис. 3.34. Магнитная линза витка с током

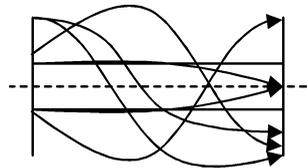


Рис. 3.35. Геометрическая аберрация

К геометрическим же aberrациям относят искажение изображения вследствие нарушения аксиальной симметрии электронно-оптической системы. Другим источником aberrаций является емный заряд электронного пучка, который, как правило, не обладает аксиальной симметрией.

Качество изображения может существенно ухудшаться вследствие неоднородности скоростей электронов, в этом случае aberrацию называют *хроматической* (рис. 3.36).

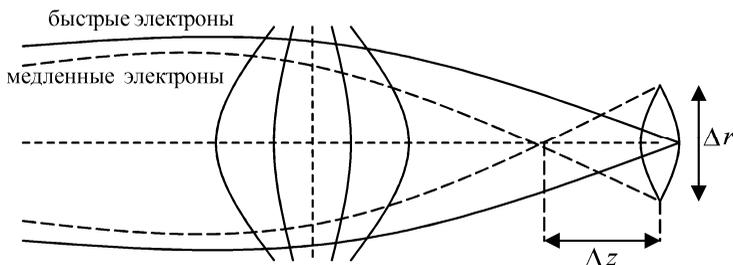


Рис. 3.36. Хроматическая aberrация

Величина отклонения электронов зависит от скорости электронов, чем больше скорость, тем меньше они отклоняются.

#### 3.4.4. Электронные микроскопы

Преимущество электронного микроскопа перед оптическим заключается в его гораздо большей разрешающей способности. Разрешающая способность оптического микроскопа ограничена явлением дифракции (рис. 3.37). Вследствие дифракции света на крае отверстия диафрагмы вместо точечного изображения возникнет пятно (размытое изображение) и дифракционные круги. Невозможность снижения дифракции лучей путем уменьшения длины волны для оптического микроскопа объясняется ограниченным диапазоном длин волн видимого света. Если рядом с источником  $O$  помещен другой источник  $O'$ , то их изображения могут накладываться друг на друга. Расстояние  $d$  – расстояние между источниками, когда круги изображения не перекрываются, и называется *разрешающей способностью*. Разрешающая способность определяется соотношением:  $d = \frac{0,61\lambda}{n \sin u}$ , где  $\lambda$  – длина

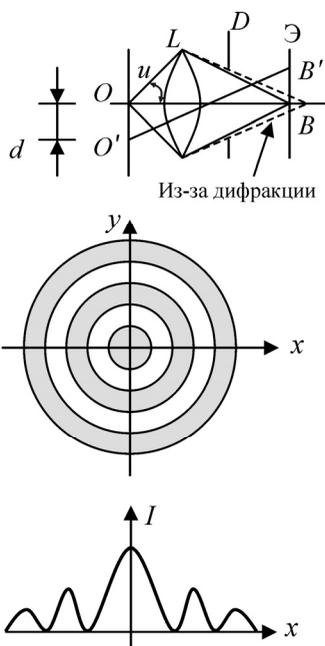


Рис. 3.37. Дифракция в оптической линзе:  $D$  – диафрагма (справа объектива);  $I$  – интенсивность

даже сотен килоэлектрон-вольт). Длина волны электрона

$$\lambda = \frac{h}{mV} = \frac{12,25}{\sqrt{U [\text{эВ}]}} \text{ \AA}, \text{ для } U = 10 \text{ кэВ}, \lambda = 0,1 \text{ \AA}, \text{ т.е. разрешение в } 50000 \text{ раз лучше.}$$

Рассмотрим электронный микроскоп просвечивающего типа (рис. 3.38). Исследуемый объект просвечивается пучком монохроматических электронов. Диафрагма  $D$  задерживает электроны, которые рассеялись на большие углы. Просвечивающий микроскоп формирует светопольные изображения (рис. 3.38,  $a$ ), когда от менее рассеивающих участков изображение более светлое. Если направить электронный пучок на предмет под некоторым углом к главной оптической оси электронно-оптической системы, так, чтобы нерассеянные электроны не попадали в отверстие диафрагмы, то будет формироваться темнопольное изображение (см. рис. 3.38,  $b$ ),

волны света;  $n$  – показатель преломления среды между предметом и линзой;  $u$  – апертура (угол при вершине конуса). Наилучший случай для  $u \sim 70^\circ$ ,  $n = 1,5$  (кедровое масло),  $\lambda = 5 \cdot 10^{-5}$  см – длина волны средней части видимого света,  $d \sim 2 \cdot 10^{-5}$  см = 0,2 мкм (можно увидеть микробы и бактерии, но нельзя увидеть вирус). Если перейти на ультрафиолет, используя кварц (стекло не пропускает),  $\lambda = 0,2$  мкм,  $d \sim 0,1$  мкм (всего в 2 раза). Для меньших длин волн излучение поглощается вплоть до рентгена, но рентгеновские лучи не преломляются. В электронных микроскопах возможно уменьшать длину волны де Бройля  $\lambda = h/(mv)$  до нескольких ангстрем путем использования ускоренных электронов высоких напряжений (до нескольких десятков и

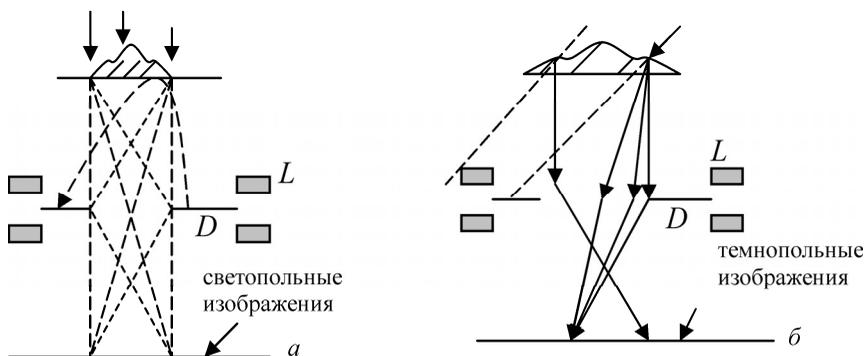


Рис. 3.38. Просвечивающий микроскоп, формирующий изображения:  
*a* – светопольные, *б* – темнопольные

когда от более рассеивающих участков изображение более светлое. Для получения больших увеличений одной линзы не достаточно, поэтому в электронном микроскопе (рис. 3.39) первичное изображение объекта после первой объективной линзы попадает в фокальную плоскость второй проекционной линзы, которая дает увеличенное изображение объекта на экране. Одним из существенных требований к электронному микроскопу является поддержание в области линз высокого вакуума (порядка  $10^{-4} \div 10^{-5}$  мм рт. ст.), так как при таких высоких напряжениях возможно возникновение электрического разряда, нарушающего необходимое распределение потенциала.

Поэтому электронный микроскоп откачивается высоковакуумным насосом. Разрешающая способность электронного микроскопа ухудшается при нарушении моноэнергетичности пучка электронов.

Монохроматичность электронного пучка нарушается из-за колебаний ускоряющего напряжения и разброса энергий электронов, излучаемых накалившимся катодом. В магнитном электронном микроскопе колебание силы тока в обмотке линз приводит к дополнительному размытию изображения. Если магнитные линзы заменить на одиночные электрические, то микроскоп называется *электростатическим просвечивающим*. Для повышения контрастности при просвечивании органических объектов иногда применяют напыление металла (Cr, Pa).

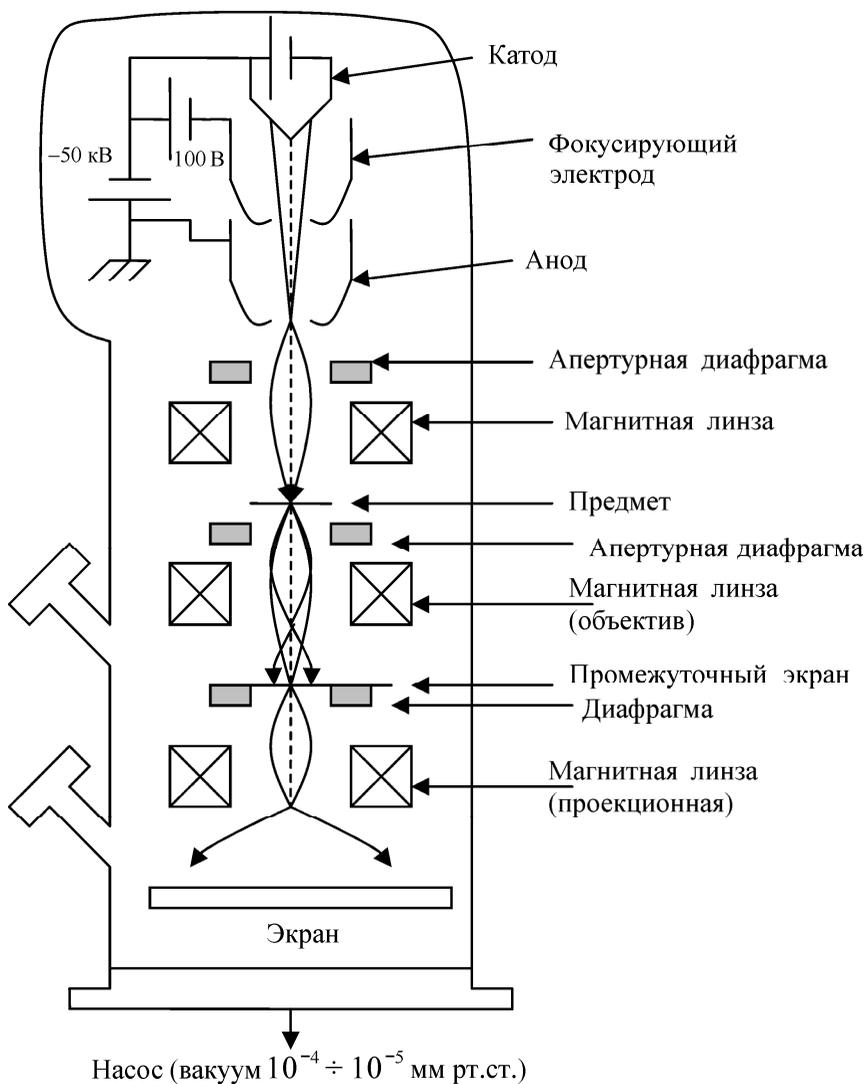


Рис. 3.39. Магнитный электронный микроскоп

Отражательный электронный микроскоп (рис. 3.40) служит для получения изображения поверхности непрозрачных тел.

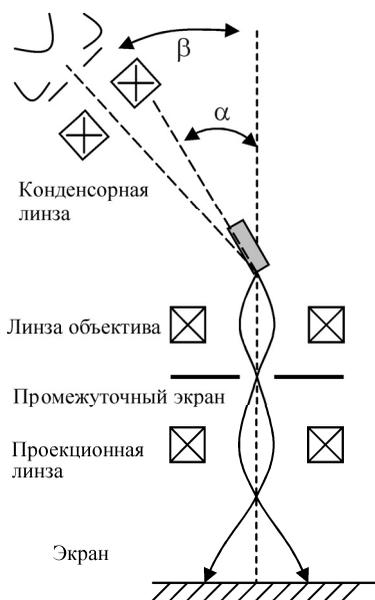


Рис. 3.40. Отражательный электронный микроскоп

В отражательном микроскопе исследуемый объект облучается пучком электронов, падающих под небольших углом к поверхности. Изображение предмета формируется отраженными от поверхности электронами. Разрешающая способность ухудшается при увеличении угла падения, так как возрастает разброс по энергиям отраженных от поверхности электронов. Отражательный электронный микроскоп часто используется для изучения поверхности металлов после их модификации. Для изучения поверхности металлов, помимо отражательных микроскопов, последнее время широкое применение получили эмиссионные (полевые) электронные микроскопы, в которых поверхность

металла выступает в качестве эмитирующей электроны поверхности катода. Эмиссия электронов с острых выступов поверхности гораздо больше, чем с гладкой поверхности, следовательно, эти участки хорошо будут видны на экране. Разрешающая способность эмиссионных микроскопов улучшается с увеличением прикладываемого к катоду напряжения.

### 3.5. Ограничение тока объемным зарядом

#### 3.5.1. Формула Чайльда – Ленгмюра для плоских и цилиндрических электродов

В промежутке длиной  $d$  между плоскими катодом и анодом распределение потенциала в вакууме линейно:  $\varphi(x) = U(a) \frac{x}{d}$  (это распределение является решением уравнения Лапласа  $\Delta\varphi = 0$ ). По мере увеличения плотности тока объемный заряд  $\rho(x)$  в промежут-

ке растет, изменяя распределение потенциала и приводя к возникновению вблизи поверхности катода потенциального барьера – «виртуального катода», от которого электроны отражаются обратно на катод (рис. 3.41). Для определения распределения потенциала в промежутке необходимо решать уравнение Пуассона  $\Delta\varphi = -4\pi\rho(x)$  с учетом того, что плотность тока в промежутке  $j = -\rho V$ , где  $V$  – скорость заряженных частиц. Если считать, что электроны эмитируются с катода с нулевой скоростью (тепловая энергия эмиссионных электронов много меньше энергии, приобретаемой в промежутке), то устойчивым является режим, когда «виртуальный катод» не образуется, а электрическое

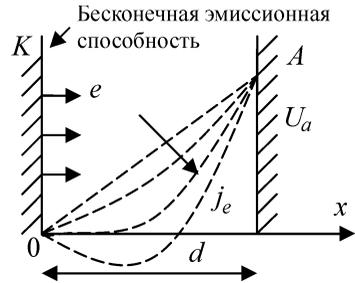


Рис. 3.41. Распределение потенциала в плоском диоде в режиме возникновения виртуального катода

поле на поверхности катода равно нулю:  $\left. \frac{d\varphi}{dx} \right|_{x=0} = 0$ . При таком

граничном условии в режиме ограничения тока объемным зарядом будем искать решение уравнения Пуассона:

$$\frac{d^2\varphi}{dx^2} = -4\pi\rho = \frac{4\pi j}{V} = \frac{4\pi j}{\sqrt{\frac{2e}{m}}\sqrt{\varphi}},$$

где было учтено, что при нулевой начальной скорости:  $\frac{mV^2}{2} = e\varphi$ . Домножим левую и правую часть

$$\text{уравнения и приведем к виду: } \frac{d^2\varphi}{dx^2} = \frac{4\pi j}{\sqrt{\frac{2e}{m}}\sqrt{\varphi}} \mid \times 2 \frac{d\varphi}{dx} dx \Rightarrow$$

$$\Rightarrow d\left(\frac{d\varphi}{dx}\right)^2 = d\left(8\pi j \sqrt{\frac{2m}{e}}\sqrt{\varphi}\right).$$

Проинтегрируем последнее уравнение:  $\left(\frac{d\varphi}{dx}\right)^2 = 8\pi j \sqrt{\frac{2m}{e}}\sqrt{\varphi} + C$ . Константа интегрирования  $C = 0$ ,

так как  $\left. \frac{d\varphi}{dx} \right|_{x=0} = 0$ . Получим дифференциальное уравнение:

$\frac{d\varphi}{dx} = \sqrt{8\pi j} \sqrt[4]{\frac{2m}{e}} \varphi^{1/4}$ . После его интегрирования с тем же граничным условием получим распределение потенциала в промежутке в виде:

$$\varphi(x) = U_a \left( \frac{x}{d} \right)^{4/3}. \quad (3.17)$$

Распределение в промежутке абсолютного значения напряженности электрического поля:

$$E(x) = \frac{4}{3} \frac{U_a}{d} \left( \frac{x}{d} \right)^{1/3}. \quad (3.18)$$

Плотность электронного тока, который можно пропустить через промежуток ограничена величиной, зависящей от напряжения на аноде  $U_a$  и от расстояния между катодом и анодом  $d$ :

$$j_{3/2} [\text{A/cm}^2] = \frac{\sqrt{2}}{9\pi} \sqrt{\frac{e}{m_e}} \frac{U_a^{3/2}}{d^2} = 2,33 \cdot 10^{-6} \frac{U_a^{3/2} [\text{В}]}{d^2 [\text{см}]} \quad (3.19)$$

Это соотношение получило название закона *Чайльда – Ленгмюра*, или закона «3/2». Для ионного тока:

$$j_i [\text{A/cm}^2] = \frac{\sqrt{2}}{9\pi} \sqrt{\frac{e}{M_i}} \frac{U_a^{3/2}}{d^2} = 5,46 \frac{U_a^{3/2} [\text{В}]}{\sqrt{M_i [\text{а.е.м.}]} d^2 [\text{см}]} \quad (3.20)$$

Для цилиндрического диода (рис. 3.42) уравнение Пуассона примет вид:

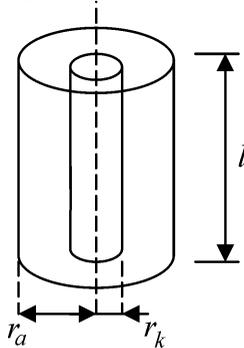


Рис. 3.42. Цилиндрический диод

$$\frac{1}{r} \frac{1}{dr} \left( r \frac{d\varphi}{dr} \right) = -4\pi\rho \quad \text{или} \quad \frac{d^2\varphi}{dr^2} + \frac{1}{r} \frac{d\varphi}{dr} = -4\pi\rho.$$

В приближении  $\frac{d\varphi}{dr} \rightarrow 0$  ( $r \gg r_k$ ) и с уче-

том  $j = -\rho V$ ,  $V_0 = 0$ ,  $V = \sqrt{\frac{2e\varphi}{m}}$ , получим

$$\text{уравнение для потенциала:} \quad \frac{d^2\varphi}{dr^2} \approx \frac{4\pi j}{\sqrt{2e}} \frac{1}{\sqrt{\varphi}},$$

приближенное решение которого аналогич-

но решению для плоского диода:  $j \approx \frac{\sqrt{2}}{9\pi} \sqrt{\frac{e}{m}} \frac{\varphi^{3/2}}{r^2}$ . Линейная плотность тока через диод на расстоянии  $r$ :  $I = 2\pi r j \approx \frac{2\sqrt{2}}{9} \sqrt{\frac{e}{m}} \frac{\varphi^{3/2}}{r}$ , а полный ток, приходящий на анод:  $I_a = J_a l \approx \frac{\sqrt{2}}{9\pi} \sqrt{\frac{e}{m}} \frac{\varphi_a^{3/2}}{r_a^2} S_a$ , где  $S_a = 2\pi r_a l$  – площадь анода. Точное решение было получено Богуславским в 1923 г.:

$$I_{3/2} = \frac{\sqrt{2}}{9\pi} \sqrt{\frac{e}{m}} \frac{U_a^{3/2} S_a}{r_a^2 \beta^2 \left( \frac{r_a}{r_k} \right)}. \quad (3.21)$$

Это формула *Ленгмюра – Богуславского*, где  $\beta \left( \frac{r_a}{r_k} \right)$  – функция Богуславского,  $r_a$  и  $r_k$  – радиусы анода и катода соответственно. Таким образом, для цилиндрического диода предельная величина тока, который можно пропустить через диод, так же как и для плоского диода, зависит от напряжения на аноде, как степень «3/2», но, помимо обратной зависимости от квадрата расстояния между катодом и анодом, есть еще зависимость, описываемая функцией Богуславского. Зависимость квадрата функции Богуславского от отношения радиусов показана на рис. 3.43.

Из графика видно, что при  $\frac{r_a}{r_k} > 8$   
 $\beta \approx \text{const} \approx 1$ .

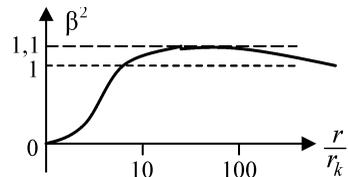


Рис. 3.43. Квадрат функции Богуславского

### 3.5.2. Образование виртуального катода

В случае, когда начальная скорость эмитированных электронов не равна нулю, минимум распределения потенциала будет находиться на некотором расстоянии  $x_m$  от поверхности катода (рис. 3.44), т.е. возникает так называемый «виртуальный катод».

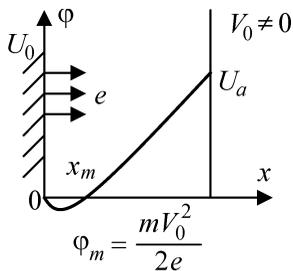


Рис. 3.44. «Виртуальный катод»

Это название возникло с точки зрения места, с которого как бы происходит эмиссия электронов. Электроны, покидающие катод, как было показано ранее, имеют модифицированное распределение Максвелла. Часть электронов, имеющих энергию более высоты потенциального барьера (значения потенциала в минимуме), продолжает движение к аноду, другая часть отражается от барьера обратно к катоду. Глубина потенциальной ямы «виртуального катода» равна средней кинетической энергии электронов. Уравнение Пуассона с учетом  $V_0 \neq 0$  примет вид:

$$\text{вид: } \frac{d^2\phi}{dx^2} = \frac{4\pi j}{V} = \frac{4\pi j}{V_0 \sqrt{1 + \frac{2e\phi}{mV_0^2}}}. \text{ Сделаем замену: } \psi = \frac{2e\phi}{mV_0^2} = \frac{e\phi}{W_0} -$$

безразмерный потенциал,  $W_0$  – начальная энергия электронов.

Чтобы получить безразмерное уравнение, нужно обезразмерить и координату  $x$ , например на расстояние до «виртуального катода»

$x_m$ . Определим  $x_m$  из условия:  $j = \frac{\sqrt{2}}{9\pi} \sqrt{\frac{e}{m}} \frac{\phi_m^{3/2}}{x_m^2}$ , следовательно,

$$x_m = \sqrt{\frac{\sqrt{2}}{9\pi j} \sqrt{\frac{e}{m}} \phi_m^{3/4}} = \sqrt{\frac{1}{9\pi j} \frac{(2e)^{1/4}}{m^{1/4}} \left(\frac{m}{2e}\right)^{3/4}} V_0^{3/2} = \sqrt{\frac{mV_0^3}{18\pi e j}}. \text{ Безразмерное}$$

расстояние  $\xi = \frac{x}{x_m}$ . Перепишем уравнение Пуассона в безраз-

мерных величинах:  $\frac{d^2\psi}{d\xi^2} = \frac{4}{9} \frac{1}{\sqrt{1+\psi}}$ . Домножим его на  $2 \frac{d\psi}{d\xi} d\xi$  и

запишем в виде:  $d\left(\frac{d\psi}{d\xi}\right)^2 = \frac{16}{9} d(\sqrt{1+\psi})$ . После интегрирования

получим  $\frac{d\psi}{d\xi} = \frac{4}{3} \sqrt{1+\psi} + C$ , причем  $C = 0$ , так как  $\left.\frac{d\psi}{d\xi}\right|_{\psi=-1} = 0$ . То-

гда  $\frac{d\psi}{\sqrt{1+\psi}} = \frac{4}{3} d\xi$ , после интегрирования получим  $\psi = (\xi - 1)^{4/3} - 1$ .

Возвращаясь к размерным величинам, получим распределение по-

$$\text{тенциала } \varphi(x) = \begin{cases} \left( U_a + \frac{W_0}{e} \right) \left( \frac{x - x_m}{d - x_m} \right)^{4/3} - \frac{W_0}{e}, & x \geq x_m; \\ \frac{W_0}{e} \left( \frac{x - x_m}{x_m} \right)^{4/3} - \frac{W_0}{e}, & x < x_m. \end{cases}$$

### 3.5.3. Транспорт потока заряженных частиц в пролетном промежутке (неустойчивость Бурсиана)

Плотность тока заряженных частиц в пролетном промежутке между электродами с одинаковым потенциалом также ограничена из-за собственного объемного заряда и, соответственно, потенциала пучка. Рассмотрим эту задачу (задачу Бурсиана) на примере потока в пролетном промежутке длины  $d$  ионов массы  $M$ , ускоренных до этого в плоском диоде потенциалом  $U_0$  (рис. 3.45). Распределение потенциала в промежутке задается уравнением Пуассона:

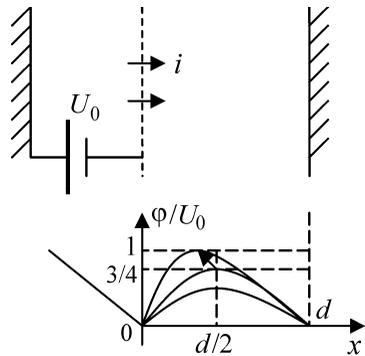


Рис. 3.45. Транспорт потока ионов

$$\varphi'' = -4\pi\rho = -\frac{4\pi j \sqrt{\frac{M_i}{2e}}}{\sqrt{U_0 - \varphi}} = -\frac{4\pi j \left( \frac{M_i}{2e} \right)^{1/2}}{\sqrt{U_0}} \cdot \frac{1}{\sqrt{1 - \frac{\varphi}{U_0}}}.$$

Введем безразмерные величины:  $\psi = \frac{\varphi}{U_0}$  и  $\xi = \frac{x}{r_d}$ . Размерность  $r_d$

определяется из соотношения:  $\frac{4\pi j \left( \frac{M_i}{2e} \right)^{1/2}}{U_0^{3/2}} = \frac{1}{r_d^2}$ . С учетом

$j = neV_0$  получим:

$$r_d = \frac{U_0^{3/4}}{\sqrt{4\pi j} \left(\frac{M_i}{2e}\right)^{1/4}} = \frac{\left(\frac{M_i V_0^2}{2e}\right)^{3/4}}{\sqrt{4\pi j} \left(\frac{M_i}{2e}\right)^{1/4}} = \sqrt{\frac{M_i V_0^2}{4\pi n e^2}}. \quad (3.22)$$

Это так называемый дебаевский радиус пучка.

Перепишем уравнение Пуассона в безразмерных величинах и домножим на  $2\psi' \cdot d\xi$ :  $\psi'' = -\frac{1}{\sqrt{1-\psi}} |\times 2\psi' \cdot d\xi$ . После интегрирования получим  $(\psi')^2 = 4\sqrt{1-\psi} + C$ . Константу интегрирования определяем из граничного условия:  $\psi'|_{\psi=0} = E_0 \Rightarrow C = E_0^2 - 4$ . С учетом этого  $(\psi')^2 = 4(\sqrt{1-\psi} - 1) + E_0^2$ . Советский физик В.Р. Бурсиан показал, что решение устойчиво, если  $E_0 = \frac{d\psi}{d\xi}\Big|_0 < \sqrt{2}$ . При  $E_0 = \sqrt{2}$ ,

т.е.  $\psi_{\max} = \frac{3}{4}$ , развивается *неустойчивость Бурсиана*, и потенциал скачком возрастает до  $\psi = 1$  ( $\varphi = U_0$ ), ток обрывается. Распределение потенциала до развития неустойчивости задается уравнением:

$$\frac{d\psi}{\sqrt{4(\sqrt{1-\psi} - 1) + E_0^2}} = d\xi, \text{ которое можно переписать в виде:}$$

$$\xi = \int_0^{\psi} \frac{d\psi}{\sqrt{4(\sqrt{1-\psi} - 1) + E_0^2}}. \text{ Условие устойчивости } E_0 < \sqrt{2} \text{ соответ-}$$

ствует условию на максимальную длину пролетного промежутка:

$$d < \frac{4\sqrt{2}}{3} r_d = d_m. \text{ Экстремальное значение } d_m \text{ соответствует крити-}$$

ческому значению максимума потенциала:  $U_m = (3/4)U_0$ . При возрастании плотности ионного тока дебаевский радиус пучка согласно (3.22) уменьшается, потенциал в пролетном промежутке будет возрастать до  $U_m$ , затем скачком возникает «виртуальный анод» с  $U_m = U_0$ , от которого произойдет отражение части ионов обратно в

сторону источника, в результате чего ток на коллектор уменьшится в 4,5 раза. Таким образом, ток в пролетном промежутке ограничен током Бурсиана:

$$j_{\max} = j_{\text{Б}} = \frac{8}{9\pi} \sqrt{\frac{2e}{M_i}} \frac{U_0^{3/2}}{d^2} = 8j_{3/2}. \quad (3.23)$$

Механизм неустойчивости Бурсиана связан с положительной обратной связью между частицами пучка и внешней электрической цепью, когда повышение потенциала пучка на малую величину автоматически вызывает дальнейшее его повышение. Эта связь возникает, когда дебаевский радиус пучка становится меньше расстояния между электродами.

### 3.5.4. Предельный ток нейтрализованных пучков (ток Пирса)

Даже в случае скомпенсированного пучка электронов, когда пространственный заряд электронов в пролетном промежутке скомпенсирован ионами (задача Пирса), возникает ограничение на максимально возможную плотность тока из-за неустойчивости, также приводящей к образованию виртуального катода и запиранию пучка. Физическая причина неустойчивости Пирса та же, что и неустойчивости Бурсиана, – положительная обратная связь электронов пучка с электронами внешней электрической цепи, которая возникает, если дебаевский радиус пучка становится меньше расстояния между электродами. Качественно эти неустойчивости сродни пучковой неустойчивости, при которой энергия направленного движения передается в энергию плазменных колебаний.

Пучковая неустойчивость возникает, когда  $kV_e \approx \omega_0$ , где  $k = \frac{2\pi}{L_{\text{хар}}}$ ,  $L_{\text{хар}}$  – характерная длина развития неустойчивости;  $\omega_0$  – плазменная частота (частота ленгмюровских колебаний). Максимальная плотность потока электронов, ограниченная неустойчивостью Пирса:  $j_{\text{П}} = j_{\max} = en_{\text{крит}} \cdot V_e$ , где критическое

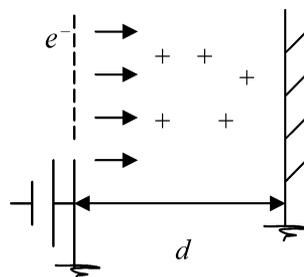


Рис. 3.46. Компенсированный поток электронов

значение  $n_{\text{крит}}$  определяется из соотношения  $\frac{4\pi n_{\text{крит}} e^2}{m}$   
 $= \omega_{0\text{крит}}^2 = \frac{(kV_e)^2}{1 + \left(\frac{m_e}{M_i}\right)^{1/3}}$ , где  $k = \frac{2\pi}{d}$ , в итоге предельная плотность

тока (ток Пирса) равна:

$$j_{\text{П}} = \frac{\pi}{4 \left(1 + \left(\frac{m_e}{M_i}\right)^{1/3}\right)} \sqrt{\frac{2e}{m_e} \frac{U_0^{3/2}}{d^2}} \approx \frac{9\pi^2}{4} j_{3/2}. \quad (3.24)$$

### 3.6. Формирование потоков заряженных частиц большой плотности

#### 3.6.1. Изменение формы пучка под воздействием собственных электрических полей

##### *Ленточный пучок ионов*

Основной проблемой транспортировки интенсивных пучков заряженных частиц является их расхождение под действием собственного объемного заряда. Для отыскания формы пучка необходимо решать уравнение Пуассона (для ленточного пучка двумерное):

$$\frac{d^2 U}{dx^2} + \frac{d^2 U}{dy^2} = -4\pi\rho(x, y),$$

а также уравнение движения для граничной

ноя заряженной частицы. В случае бесконечного ленточного пучка (рис. 3.47), у которого ширина значительно больше толщины  $d$ , для

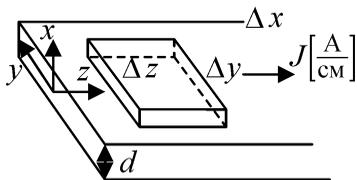


Рис. 3.47. Бесконечный ленточный пучок

определения электрического поля на границе вместо уравнения Пуассона можно использовать теорему Гаусса о равенстве потока электрического поля через поверхность и заряда, заключенного в объеме, ограниченном этой поверхностью:

$$\int \operatorname{div} E = \int_S 4\pi\rho \Rightarrow \int E_n dS = 2E_x \Delta y \Delta z = 4\pi\rho \Delta x \Delta y \Delta z \quad (\text{теорема Гаусса}).$$

Линейная плотность тока пучка (ток на единицу ширины бесконечного ленточного пучка):  $J = jd = \rho V_e d$ . Тогда напряженность электрического поля на границе:  $E_x = 2\pi\rho \Delta x = 2\pi\rho d =$   
 $= \frac{2\pi J}{V_z} = \frac{2\pi J}{\sqrt{2qU_0}}$ , где  $\frac{M_i V_z^2}{2} = qU_0$ . Уравнение движения вдоль оси

$x$ :

$$\ddot{x}(t) = \frac{qE_x}{M_i}; \quad \frac{d^2x}{dt^2} = \frac{d}{dt} \left( \frac{dx}{dt} \right) = \frac{dz}{dt} \frac{d}{dz} \left( \frac{dx}{dz} \right) = V_z^2 \frac{d^2x}{dz^2} \Rightarrow$$

$$\Rightarrow \frac{d^2x}{dz^2} = \frac{q \cdot 2\pi J}{M_i V_z^3} = \frac{2\pi J M_i^{1/2}}{2^{3/2} q^{1/2} U_0^{3/2}} = p.$$

Граничные условия:  $\left. \frac{dx}{dz} \right|_{z=0} = -\operatorname{tg} \gamma$ , где

$\gamma$  – угол сходимости пучка на входе, т.е. угол между направлением скорости граничного электрона и направлением распространения пучка по оси  $z$ :

$$\frac{dx}{dz} = pz - \operatorname{tg} \gamma \rightarrow x(z) = x_0 - \operatorname{tg} \gamma \cdot z + \frac{p}{2} z^2.$$

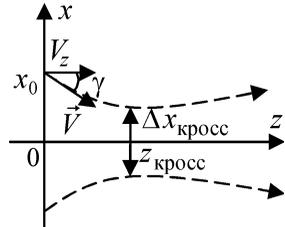


Рис. 3.48. Сечение ленточного пучка

При  $\operatorname{tg} \gamma = 0$  влетает горизонтальный пучок. Местоположение самого узкого в поперечном размере участка пучка, так называемого «кроссовера» (рис. 3.48), определяется из условия:

$$\frac{dx}{dz} = 0, \quad z_{\text{кросс}} = \frac{\operatorname{tg} \gamma}{p};$$

$$\Delta x_{\text{кросс}} = 2x|_{z_{\text{кросс}}} = 2 \left( x_0 - \operatorname{tg} \gamma \cdot z + \frac{p}{2} z^2 \right) = 2x_0 - \frac{\operatorname{tg}^2 \gamma}{p}.$$

При  $x_0 = \frac{\operatorname{tg}^2 \gamma}{2p}$   $\Delta x_{\text{кросс}} = 0$ .

Если до входа в пролетный промежуток пучок прошел через электростатическую линзу при  $z = 0$ , которую можно считать тонкой, то  $\operatorname{tg} \gamma = -\frac{x_0}{f}$ , где  $f$  – фокусное расстояние. Тогда

$$x(z) = x_0 - \frac{x_0}{f} \cdot z + \frac{p}{2} z^2, \quad z_{\text{кросс}} = \frac{x_0}{fp}, \quad \Delta x_{\text{кросс}} = 2x_0 - \frac{x_0^2}{f^2 p}.$$

### Цилиндрический пучок

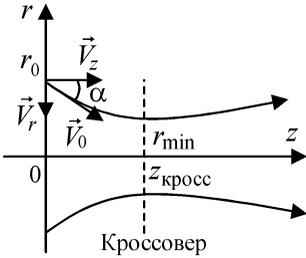


Рис. 3.49. Сечение цилиндрического пучка

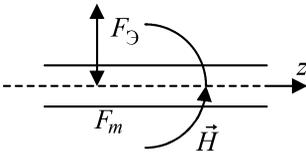


Рис. 3.50. Собственное магнитное поле цилиндрического пучка

Для цилиндрического пучка (рис. 3.49), влетающего в пролетный участок параллельно оси  $z$  с начальным радиусом  $r_0$ , теорема Гаусса примет вид  $2\pi r E(r) = 4\pi r \cdot \pi r^2$ .

Пусть  $I = j \cdot \pi r^2 = \rho V \cdot \pi r^2$  – полный ток пучка, ускоренного потенциалом  $U_0$ . Тогда напряженность электрического поля на границе пучка:

$$E_r = 2\pi r = \frac{2I}{V_z r}.$$

Сила Лоренца, действующая на заряженную частицу на границе пучка, существенно меньше электрической силы. Покажем это.

$$\operatorname{rot} \vec{H} = \frac{4\pi}{c} j \Rightarrow 2\pi r H = \frac{4\pi I}{c} \Rightarrow$$

$$\Rightarrow H = \frac{2I}{rc}$$

собственное магнитное поле цилиндрического пучка (рис. 3.50).

Сила, действующая со стороны этого магнитного поля,

$$F_m = \frac{q}{\epsilon} V_z H = \frac{2q}{c^2} \frac{V_z I}{r}.$$

Электрическая сила:  $F_э = qE = \frac{2qI}{V_z r};$

суммарная сила:  $F = F_{\text{Э}} + F_m = \frac{2qI}{V_z r} \left( 1 + \frac{V_z^2}{c^2} \right)$ .

Так как  $V_z \ll c \Rightarrow F_m \ll F_{\text{Э}}$ .

Умножим уравнение движения в радиальном направлении на  $2\dot{r}dt$ :

$$M\ddot{r} = q \frac{2I}{V_z r} \times 2\dot{r} \cdot dt \Rightarrow d(\dot{r}^2) = d\left( \frac{4Iq}{M_i V_z} \ln r \right) \Rightarrow \dot{r}^2 = \frac{4Iq}{M_i V_z} \ln r + C.$$

1. Рассмотрим случай  $\dot{r}|_0 = 0$  (параллельный пучок):

$$(\dot{r}^2) = \frac{4Iq}{M_i V_z} \ln \frac{r}{r_0}; \quad \underbrace{\frac{dz}{dt}}_{V_z} \frac{dr}{dz} = \sqrt{\frac{4Iq}{M_i V_z}} \sqrt{\ln \frac{r}{r_0}}.$$

Обозначим  $\frac{r}{r_0} = \xi$ , тогда с учетом  $V_z = \left( \frac{2qU_0}{M_i} \right)^{1/2}$  получим уравне-

ние  $\frac{d\xi}{\sqrt{\ln \xi}} = \sqrt{\frac{4Iq}{M_i V_z}} \frac{dz}{r_0} = \frac{2I^{1/2} M_i^{1/4}}{2^{3/4} q^{3/4} U_0^{3/4}} \frac{dz}{r_0}$ . Нашли зависимость, описы-

вающую профиль пучка:  $z(r) = r_0 \left( \frac{q}{2M_i} \right)^{1/4} \frac{U_0^{3/4}}{I^{1/2}} \int_1^{\frac{r}{r_0}} \frac{d\xi}{\sqrt{\ln \xi}}$ .

2. Рассмотрим случай  $\dot{r}|_0 = V_z \text{tg} \alpha$  для сходящегося пучка, входящего в пролетный промежуток под углом  $\alpha$  к оси  $z$ :

$$(\dot{r}^2) = \frac{4Iq}{M_i V_z} \ln \frac{r}{r_0} + V_z^2 \text{tg}^2 \alpha \rightarrow z(r) = r_0 V_z \int_1^{\frac{r}{r_0}} \frac{d\xi}{\sqrt{a \ln \xi + b}},$$

где  $a = \frac{4Iq}{M_i V_z}$ ,  $b = V_z^2 \text{tg}^2 \alpha$ .

Положение кроссовера определяется из условия:  $\dot{r} = 0$ . Коорди-

ната положения кроссовера:  $z_{\text{кросс}} = r_0 V_z \int_1^{\frac{r_{\text{мин}}}{r_0}} \frac{d\xi}{\sqrt{a \ln \xi + b}}$ . Радиус

пучка в наиболее узком месте (в кроссовере) определяется из соотношения:  $r_{\min} = r_0 \exp\left\{-\frac{V_z^2 \operatorname{tg}^2 \alpha \cdot M_i \cdot V_z}{4Iq}\right\}$ , следовательно,  $r_{\min} \neq 0$  никогда.

### 3.6.2. Пирсова оптика

При решении задачи получения интенсивных электронных и ионных пучков возникает проблема расхождения пучков под действием собственного объемного заряда. Задача подбора такой электродной системы, чтобы можно было сформировать параллельный пучок, была впервые сформулирована и решена Пирсом. Впоследствии такие системы получили название *пушек Пирса*. Рассмотрим плоскую систему. Для одномерного случая ускорения бесконечно го потока электронов  $U(x) = Ax^{4/3}$ .

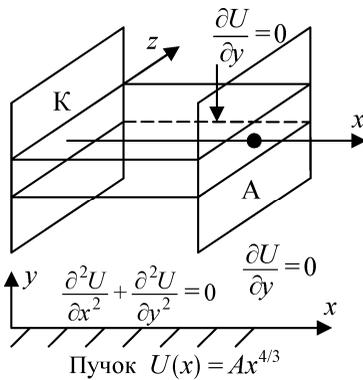


Рис. 3.51. Формирование нерасходящегося ленточного пучка

Для двумерного ленточного пучка на его границе  $U(x, y)$  должно выполняться условие:  $\left. \frac{\partial U}{\partial y} \right|_0 = 0$ , тогда электродная геометрия будет преодолевать расталкивающее действие объемного заряда (рис. 3.51). При  $y > 0$  потенциал  $U(x, y)$  должен удовлетворять уравнению Лапласа:

$\frac{\partial^2 U}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 U}{\partial y^2} = 0$ . Реальная часть любой аналитической функции комплексной переменной  $f(x + iy)$  будет удовлетворять как уравнению Лапласа, так и граничному условию, так как  $\operatorname{Re}(f(x + iy)) = \frac{1}{2}(f(x + iy) + f(x - iy))$ . Учитывая, что при  $y = 0$  функция должна удовлетворять условию  $U(x) = Ax^{4/3}$ , оправдано

взять  $U(x, y) = \operatorname{Re}(A(x + iy)^{4/3})$ . Полагая, что потенциал первого электрода равен нулю  $U(x, y) = 0$ , получим профиль первого электрода с учетом свойств комплексных чисел:

$$z = |z|(\cos \alpha + i \sin \alpha); \quad z^n = |z|^n (\cos n\alpha + i \sin n\alpha);$$

$$\operatorname{Re}(z^{4/3}) = |z|^{4/3} \cos \frac{4}{3}\alpha = 0, \text{ следовательно, } \frac{4}{3}\alpha = \frac{\pi}{2}; \quad \alpha = \frac{3\pi}{8}.$$

Угол наклона плоскости катода ( $U = 0$ ) к направлению распространения пучка:  $\operatorname{arctg}(y/x) = 3\pi/8 = 67,5^\circ$ . Полагая потенциал  $U(x, y) = U_a$ :

$$\sqrt{(x^2 + y^2)}^{4/3} \cos \frac{4}{3}\alpha = U_a \rightarrow (x^2 + y^2)^{2/3} \cos \frac{4}{3}\left(\operatorname{arctg} \frac{x}{y}\right) = U_a -$$

уравнение для определения геометрии электродов.

### 3.6.3. Источники электронных пучков (электронные пушки) с термокатодом

Электронных пушек с термокатодами для создания пучков электронов в бытовой аппаратуре (кинескопы) и для различных аналитических применений разработано огромное количество. Типичная схема электронной пушки такого рода приведена на рис. 3.52.

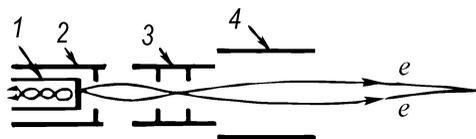


Рис. 3.52. Электронная пушка с фокусировкой пучка: 1 – подогревный катод; 2 – анод; 3 – электронные линзы; 4 – отклоняющие пластины для сканирования электронным пучком

На рис. 3.53 показан внешний вид автономной встраиваемой электронной пушки, смонтированной на фланце Ду 50.

Такая пушка рассчитана на работу в сверхвысоком вакууме и дает электронный пучок с током несколько микроампер, сфокусированный в пятно около десятков микрометров. Отклоняющие пластины допускают сканирование пучка, поэтому такую пушку можно использовать не только для анализа поверхности в еже-

электронах, но и для получения растрового изображения поверхности путем измерения тока в цепи мишени. (Коэффициент вторичной эмиссии меняется в зависимости от угла падения электронов, поэтому при сканировании участки с разным наклоном граней приведут к изменению полного тока через мишень, формируя таким образом растровое изображение на экране монитора.)

Сильноточные источники электронов применяются во многих областях техники. Хорошо известны мощные установки для электронной плавки и сварки металлов. Мощности в пучках электронов составляют десятки и сотни киловатт. В качестве примера рассмотрим электронную пушку с током в единицы ампер, которая может использоваться в подобных технологических задачах.

Эта пушка предназначена для термоциклических испытаний материалов, применяемых в плазменных установках, а также для создания пучково-плазменных разрядов в мощных источниках плазмы и плазмохимических реакторах. Электронно-лучевая пушка может быть также использована для плавки и литья металлов, испарения материалов и нанесения покрытий.

Устройство пушки показано на рис. 3.54.

Основными элементами пушки являются: катодный узел с высоковольтными керамическими изоляторами и анодный узел. Пушка формирует аксиально-симметричный пучок диаметром около 1 см и током порядка 1 А. Нагрев эмиттера производится тепловым излучением в случае использования катодной таблетки из гексаборида лантана  $\text{LaB}_6$  и вспомогательным электронным пучком (для таблеток из тугоплавких металлов пушки подогреваются электронной бомбардировкой с нити подогревателя). Мощность пушки регулируется мощностью подогрева катода, которая составляет до 300 Вт. Кроме того, в пушке предусмотрен модулирующий электрод, позволяющий менять параметры электронного пучка без

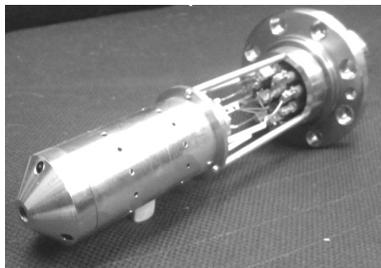


Рис. 3.53. Встраиваемая электронная пушка, используемая для анализа поверхности материалов. Фокусирующая и отклоняющая системы закрыты кожухом

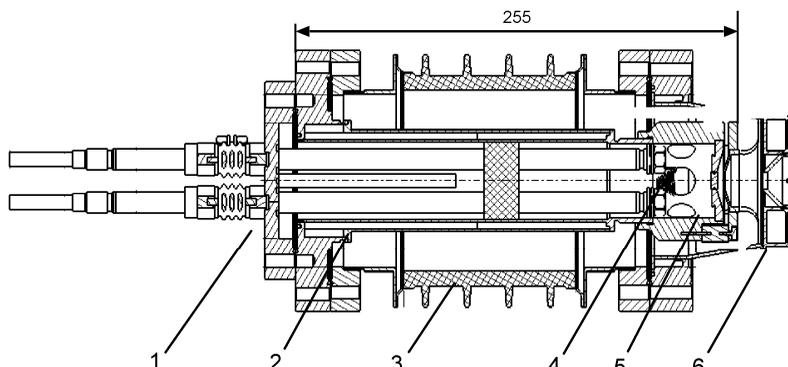


Рис. 3.54. Стационарная электронная пушка мощностью 30 кВт: 1 – узел катодных вводов; 2 – водоохлаждаемый канал; 3 – высоковольтный изолятор; 4 – катод косвенного накала; 5 – анод; 6 – охлаждаемая линза

изменения накала мощного катода. Основное преимущество триодного варианта пушки по сравнению с диодным состоит в том, что коммутация и модуляция мощного электронного пучка может производиться с помощью значительно менее мощного (на один-два порядка) источника. Для формирования электронного пучка нужной конфигурации на выходе пушке устанавливают короткую катушку с магнитным полем  $\sim 2$  кГс на оси.

Для того, чтобы обеспечить стационарную работу пушки многие ее узлы охлаждаются водой с общим расходом 5л/мин. Максимальное давление в камере пушки  $10^{-5}$  мм. рт. ст. Срок службы катода составляет примерно 50 ч.

Все вакуумные разъемные соединения имеют медные уплотнения, что позволяет при необходимости проводить прогрев всех узлов для обезгаживания и обеспечивать сверхвысоковакуумные условия в объеме установки, с которой соединена пушка, ее внешний вид показан на рис. 3.55.

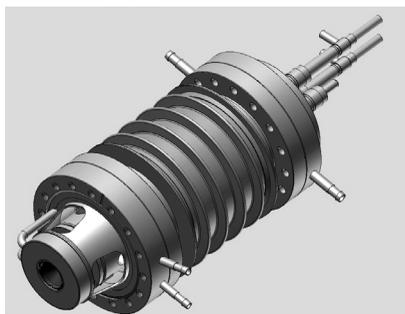


Рис. 3.55. Внешний вид электронной пушки стационарной мощностью 30 кВт

## Электронные пучки в радиотехнических приборах, используемых для генерации и усиления электромагнитных волн

Электронные пушки применяются в самых разнообразных устройствах радиотехнического назначения для генерации и усиления электромагнитных волн (магнетроны, клистроны, лампы бегущей волны, лампы обратной волны и др.). Известны диодные и триодные электронные пушки. В основе их конструкции лежат пушки Пирса, формирующие ленточные, цилиндрические, конические пучки. Пример такой пушки диодного типа, рассчитанной на получение электронного пучка с энергией 50 кэВ и плотностью тока в кроссовере в 100 раз больше, чем плотность тока эмиссии катода, показан на рис. 3.56.

Катод с поверхностью много большей кроссовера пучка имеет повышенный срок службы, так как дольше расплывается ионами остаточного газа, всегда присутствующими в вакуумном объеме пушки.

Для улучшения сходимости электронного пучка применяют магнитное поле. Причем подбирают его конфигурацию так, чтобы локальное направление силовых линий поля совпадало с направлением сил электростатической фокусировки (формирующая система с магнитным сопровождением).

Наличие магнитного поля принципиально необходимо в радиотехнических источниках типа магнетронов, генерирующих электромагнитные волны в диапазоне десятки мегагерц – единицы гигагерц. Длина волны излучения определяется электронной цикло-

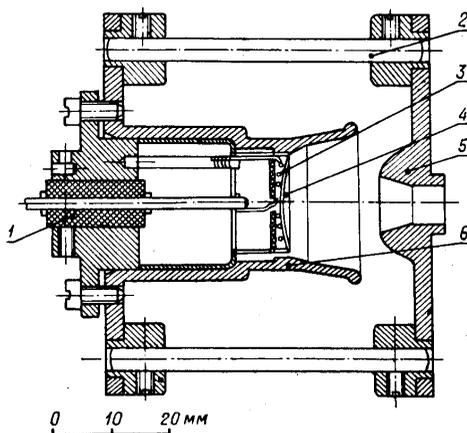


Рис. 3.56. Электронная пушка Пирса: 1 – изоляционная втулка; 2 – керамический стержень; 3 – подогреватель катода; 4 – вогнутый сферический катод; 5 – анод; 6 – фокусирующий электрод

тронной частотой. На рис. 3.57 показан пример электронной магнетронной пушки, генерирующий с поверхности конического катода кольцевую пучок замагниченных электронов в скрещенных электрическом и магнитном полях.

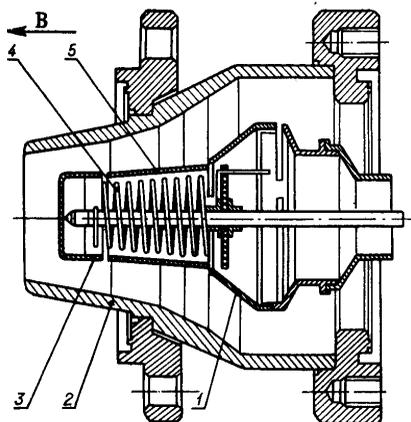


Рис. 3.57. Электронная пушка магнетрона: 1 – задний фокусирующий электрод; 2 – анод; 3 – передний фокусирующий электрод; 4 – подогреватель; 5 – катод

Магнетронная пушка применяется и в других приборах для генерации мощного электромагнитного излучения – клистронах и лампах бегущей волны. Помимо диодных пушек широко распространены пушки с управляющими электродами – триодные пушки (рис. 3.58). Они позволяют формировать электронные пучки с более высоким значением первеанса  $I/U^{3/2}$  – главного показателя, определяющего мощность пучка. С первеансом выше  $7 \text{ мкА/В}^{3/2}$  пучки считаются мощными.

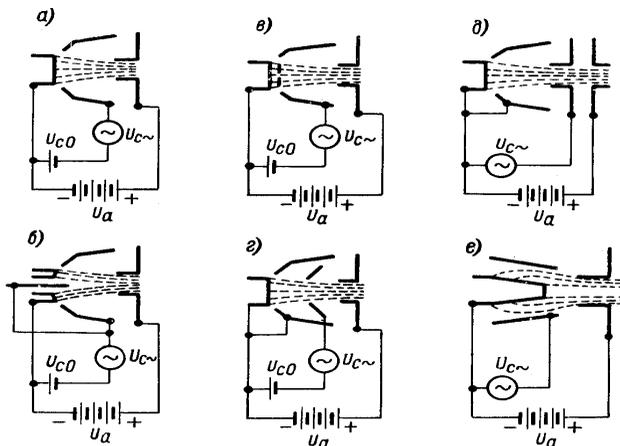


Рис. 3.58. Возможные схемы управления пучком электронов:  $U_{c0}$  и  $U_{c~}$  – постоянная и переменная составляющие напряжения управляющего электрода

При нагреве плазмы в термоядерных установках на частоте ионного циклотронного резонанса необходима частота  $f_{ci}$  [МГц]  $\approx \approx 15BZ/A_i$ , где  $B$  магнитное поле, Тл;  $Z$  – заряд иона в единицах заряда;  $A_i$  – атомная масса иона. При полях 2 – 5 Тл для нагрева плазмы из изотопов водорода ( $A = 1 - 2$ ) необходимы мощные генераторы частоты на 15 – 75 МГц. Для обеспечения большой мощности триодные пушки типов, показанных на рис. 3.56 и 3.58 «набирают» в виде параллельно расположенных ячеек, каждая из которых формирует свой электронный пучок. Триодные лучевые триоды, собранные по такой схеме (24 – 48 ячеек) при напряжении  $\sim 20$  кВ и суммарном токе  $\sim 40$  А обеспечивают  $\sim 500 - 1000$  кВт мощности на таких частотах при КПД  $\sim 75\%$ . Разработанные к настоящему времени тетроды выдают 2 МВт мощности в течении 10 с при КПД 60 % и допускают регулировку в диапазоне от 30 до 110 МГц.

*Клистроны* используются как генераторы и усилители СВЧ-мощности, а так же как умножители частоты. Принцип их действия основан на взаимодействии с вводимой в прибор СВЧ-мощностью (рис. 3.59). Ускоренный анодным напряжением электронный пучок попадает в полость резонатора, к которой подводится СВЧ-мощность. В этой полости возбуждается ВЧ-напряжение, модулирующее электроны пучка по скорости: часть электронов тормозится, попадая в поле, направленное в тормозящую полуволну ВЧ-поля, а другая часть, пришедшая позже, ускоряется уже изменившейся полярностью электрической составляющей ВЧ-поля. В пролетной трубе, где поле экранируется корпусом и сетками на входе и выходе, модуляция по скорости приводит к модуляции по пространственной плотности пучка. Центральный пассивный резонатор (в ко-

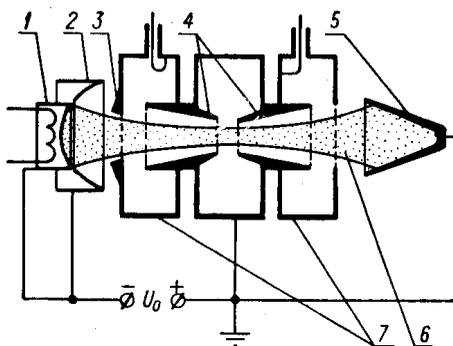


Рис. 3.59. Схема трехрезонаторного клистрона: 1 – катод; 2 – фокусирующий электрод; 3 – анод; 4 – пролетная труба; 5 – коллектор; 6 – поток электронов; 7 – объемные резонаторы

торый ВЧ-мощность извне не вводится) способствует дополнительной группировке пучка. Проходя через выходной резонатор (на рис. 3.59 справа), пучок возбуждает в нем электромагнитное поле в соответствии с частотой следования сгустков электронов пучка. Большая часть электронов вблизи центра группирования тормозится в выходном резонаторе, преобразуя часть своей энергии в энергию электромагнитного излучения в соответствии с законом, согласно которому мощность индуцируемого заряженной частицей электромагнитного излучения пропорциональна квадрату ускорения тормозящейся частицы.

Ограничения на ток в таких приборах связаны с влиянием пространственного заряда. На приведенном рисунке сходящаяся форма пучка способствует достижению им максимальной плотности объемного заряда в нужном для прохождения через систему месте.

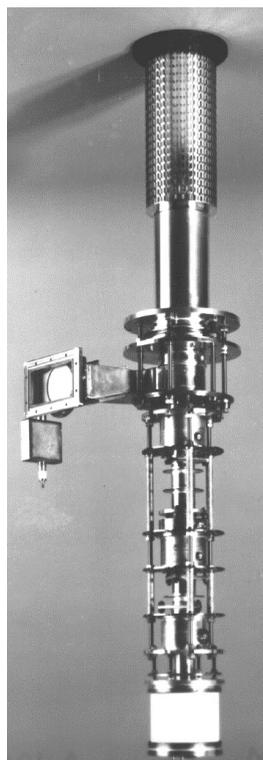


Рис. 3.60. Клистрон, используемый для нагрева плазмы

Увеличению плотности тока может способствовать наложение сильного продольного магнитного поля. Мощность таких приборов определяется ограничениями по снятию тепла и составляет сотни киловатт (300 кВ, 300 А), а в импульсном режиме может достигать десятков мегаватт. Коэффициент усиления, определяемый как отношение входного сигнала СВЧ-мощности к выходному, доходит до  $10^6$ .

Клистрон, применяемый для нагрева плазмы на токамаке ASDEX-U (Германия) на частоте 3,37 ГГц с поддерживаемой в течение 3 с мощностью 500 кВт, показан на рис. 3.60.

Широкополосными усилителями СВЧ в диапазоне 1 – 300 ГГц на основе электронных пучков являются лампы бегущей волны (ЛБВ) (рис. 3.61). Усиление волны происходит в результате длительного взаимодействия с движущимися электронами. При близости скоростей электронов и специаль-

но замедляемой электромагнитной волны. В ЛБВ возникает индуцированное черенковское излучение электронных сгустков, образованных в результате группирования в электромагнитной волне. В ЛБВ с замедляющими системами в виде металлической спирали возможно усиление в диапазоне частот, отличающихся на 2,5 порядка, однако из-за плохого теплоотвода от замедляющей системы мощность таких ЛБВ составляет сотни ватт в непрерывном режиме работы. При использовании замедляющих систем в виде цепочек связанных резонаторов (рис. 3.61) мощности достигают десятков киловатт в непрерывном режиме и мегаватт – в импульсом.

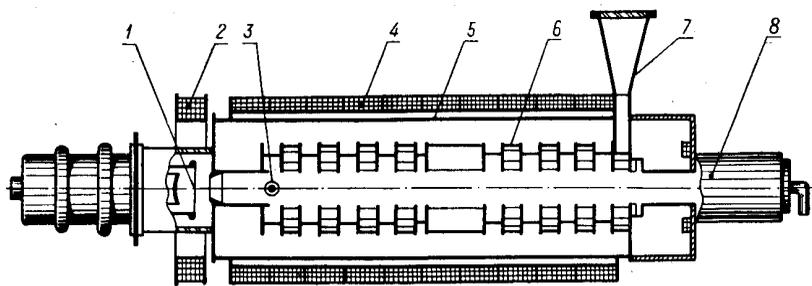


Рис. 3.61. Лампа бегущей волны (ЛБВ): 1 – электронная пушка; 2 – прикатодная магнитная катушка; 3 – СВЧ-вход; 4 – соленоид продольного магнитного поля; 5 – вакуумная камера; 6 – система замедления; 7 – СВЧ-выход; 8 – коллектор электронного пучка

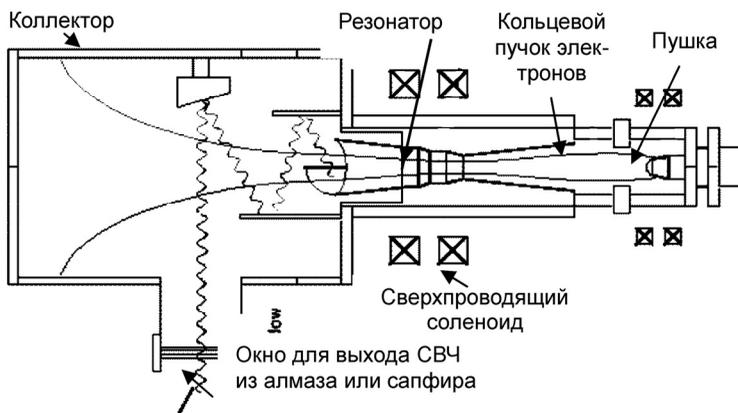


Рис. 3.62. Принципиальная схема гиротрона



Рис. 3.63. Внешний вид гиротрона, выдающего 600 кВт мощности электромагнитного излучения на частоте 140 ГГц

Однако диапазон частот можно менять лишь на 10 %, а КПД составляет 20 – 30 %. Для его повышения эффективным оказывается использование прямого преобразования энергии пучка при торможении (рекуперация).

Для нагрева электронной компоненты плазмы в термоядерных установках с магнитным удержанием плазмы при полях 3 – 5 Тл используется излучение на длине волны, соответствующей электронной ларморовской частоте. Эта частота составляет  $f_{ce}$  [ГГц]  $\approx 28B$  [Тл], что для таких полей дает 85 – 140 ГГц. Источником СВЧ-мощности на таких частотах являются *гиротроны* (рис. 3.62). Принцип их действия аналогичен вышеописанному мощному источнику электромагнитного излучения. Излучение генерируется вращающимися в магнитном поле (т.е. испытывающими ускорение) электронами.

Магнитное поле в резонаторе гиротрона должно быть равным тому полю, при котором предполагается греть электроны в плазменной установке. Поэтому основные соленоиды гиротронов часто делают сверхпроводящими.

Современные гиротроны выдают мощность порядка 1 МВт в течение нескольких секунд. На рис. 3.63 показан внешний вид такого гиротрона, рассчитанного на частоту 140 ГГц, и выдающего 600 кВт мощности в течение 3 с.

Очень важным элементом гиротрона является диэлектрическое окно для вывода СВЧ-мощности. Высокий тангенс диэлектрических потерь в материале окна приводит к серьезным проблемам с его охлаждением. Поэтому специально для целей вывода высоких плотностей СВЧ-мощности разработана плазменная технология выращивания алмазных окон, обладающих помимо высоких оптических и диэлектрических свойств исключительно высокой теплопроводностью.

### 3.7. Плазменные источники пучков частиц

#### 3.7.1. Электрический ток в газах и газовый разряд

*Газовый разряд* – процесс протекания электрического тока через газ. Различают несамостоятельные и самостоятельные разряды. Несамостоятельный разряд возможен при инжекции электронов в разрядный промежуток (например, термоэмиссия с катода) или при ионизации газа каким-либо внешним источником. Физические процессы, протекающие в разных несамостоятельных разрядах, естественно различаются, но не все они характерны для собственно газовых разрядов, как обычно понимают этот термин. Однако наиболее широко применяются самостоятельные разряды, о них и будет прежде всего идти речь. Самостоятельный тлеющий разряд зажигается тогда, когда напряжение на его активных участках достигает "*напряжения пробоя*", для дугового разряда необходимо создать условия возникновения термоэмиссии с катода. Коронные разряды возникают только при наличии участков с очень большой неоднородностью напряженности электрического поля, а искровые разряды принципиально импульсные. Все это справедливо для постоянных электрических полей, у полей ВЧ и СВЧ, которые широко используются в технологиях, есть своя специфика, особенно у полей лазерной искры.

Зависимость вероятности ионизации атомов любого газа от энергии частиц  $U$  задается функцией ионизации:

$$f_i = a(U - U_i) \exp(-(U - U_i) / b), \quad (3.25)$$

где  $a$  и  $b$  – эмпирические константы для конкретного газа. Время между столкновениями, приводящими к ионизации, обратно пропорционально частоте ионизации  $\tau_i = 1/\nu_i$ . Число ионизаций в еди-

ницу времени пропорционально плотности частиц газа  $n$ , скорости налетающей частицы  $v$  и сечению ионизации  $\sigma_i$ :

$$v_i = nv\sigma_i. \quad (3.26)$$

Ионизационный пробег  $\lambda_i$  (длина, на которой частица может ионизовать) равен

$$\lambda_i = v\tau_i = 1/(n\sigma_i) = 1/S_i, \quad (3.27)$$

где  $S_i = n\sigma_i$  называется *суммарным сечением ионизации*. Суммарное сечение ионизации также хорошо аппроксимируется подобной (3.25) зависимостью от энергии частицы  $U$ :

$$S_i = a (U - U_i) \exp(-b(U - U_i)) \quad (\text{формула Моргулиса}), \quad (3.28)$$

где  $a$  и  $b$  – эмпирические константы для конкретного газа. Зависимость суммарного сечения возбуждения имеет похожий вид:

$$S_r = S_{\max} \frac{U - U_r}{U_{\max} - U_r} \exp\left(1 - \frac{U - U_r}{U_{\max} - U_r}\right) \quad (\text{формула Фабриканта}), \quad (3.29)$$

где  $U_r$  – потенциал возбужденного уровня;  $U_{\max}$  и  $S_{\max}$  – энергия и сечение возбуждения в максимуме функции возбуждения, значения которых можно найти в справочных таблицах для конкретного газа. Время пребывания атома в возбужденном состоянии можно связать с числом переходов в единице объема в единицу времени  $N$ , тогда за промежуток времени  $dt$  число переходов:  $Ndt = wn_a dt$ , где  $w$  – вероятность данного перехода;  $n_a$  – концентрация возбужденных атомов. Число актов излучения равно убыли числа возбужденных атомов:  $Ndt = -dn_a$ , тогда  $dn_a = -wn_a dt$ . Таким образом, число возбужденных атомов изменяется во времени по закону:

$$n_a(t) = n_{a0} \exp(-wt), \quad (3.30)$$

где  $n_{a0}$  – концентрация возбужденных атомов в начальный момент времени. За время  $t_0 = 1/w$  концентрация уменьшается в « $e$ » раз. Это время и полагают временем пребывания атома в возбужденном состоянии. Несмотря на малость этой величины  $t_0 \sim 10^{-8} \div 10^{-7}$  с, даже за столь короткое время существования возбужденного атома возможно получение новой порции энергии, достаточной для перехода атома на следующий уровень возбуждения или для ионизации атома, в этом случае говорят о *ступенчатой ионизации*. Именно

такой процесс ступенчатой ионизации атомов ртути наблюдался в опытах Франка и Герца. Среди возбужденных состояний атомов и молекул существуют *метастабильные* состояния, времена жизни которых от  $10^{-4}$  до нескольких секунд. Самый нижний метастабильный уровень называется *резонансным*. Для ртути резонансный уровень возбуждения равен 4,7 эВ, при превышении энергии электронов этого значения наблюдался первый провал в зависимости тока от ускоряющего электроны потенциала. Метастабильная частица при столкновении с электроном может и *дезактивироваться*, т.е. перейти в основное состояние, этот процесс называется *неупругим соударением второго рода*.

Кроме образования положительных ионов при протекании тока в газе возможно возникновение отрицательных ионов. Для того, чтобы отрицательный ион существовал и был устойчив, его внутренняя энергия  $E_i$  должна быть меньше, чем энергия нормального состояния пары атом – свободный электрон  $E_0$ . Разность  $A = E_0 - E_i$  называется *сродством* атома к электрону. В атомах с заполненной внешней электронной оболочкой (инертные газы He, Ne, Ar, Xe, Kr, ...) электронная оболочка экранирует ядро и вероятность образования отрицательных ионов мала. Атомы с неполными внешними оболочками (F, Cl, K, Na, ...), у которых оболочки ближе всего к заполнению, образуют наиболее устойчивые отрицательные ионы. Сродство этих атомов достаточно велико:  $A_{F^-} = 3,4 \div 3,6$  эВ,  $A_{Cl^-} = 3,82$  эВ. Если электрон до столкновения имел кинетическую энергию  $E_k$ , то при его захвате должна освободиться энергия  $A + E_k$ . Эта энергия может освободиться через излучение:  $e + a \rightarrow a^- + h\nu$ , но более вероятен процесс образования отрицательного иона в результате столкновения трех тел  $X + Y + e \rightarrow X^- + Y + e$  или  $X + Y \rightarrow X^- + Y^+$ .

Для описания электрического тока в газах недостаточно рассмотрения процессов ионизации и рекомбинации. Необходимо описание движения заряженных частиц под действием электрических и магнитных полей, причем статистическое, т. е. усредненное по многочисленным столкновениям. При наличии электрического поля на хаотическое движение частиц накладывается направленное движение вдоль поля. Для стационарного процесса распростране-

ния тока средняя энергия и средняя скорость электронов должны оставаться постоянными, несмотря на присутствие ускоряющего электрического поля. Это возможно, если электрическая сила компенсируется силой трения (электроны при столкновениях отдают часть своей энергии). Таким образом, средняя скорость движения от одного электрода к другому, которую называют *скоростью дрейфа*  $u_d$ , остается постоянной. Подвижность заряженных частиц согласно общему определению:

$$b [\text{см}^2/(\text{В} \cdot \text{см})] = u_d/E. \quad (3.31)$$

Скорость дрейфа можно оценить из предположения, что она много меньше тепловой скорости и в результате столкновения частица теряет всю кинетическую энергию. За время между столкновения-

ми  $\tau_{cm}$  заряженная частица пройдет путь  $S = \frac{eE}{2m} \tau_{ct}^2$ ,  $u_d = S/\tau_{ct}$ ,

тогда:

$$b_e = \frac{eE\bar{\lambda}_{ct}}{2mv_T}, \quad (3.32)$$

где  $\bar{\lambda}_{ct}$  – средняя длина свободного пробега;  $v_T$  – тепловая скорость. Для распределения Максвелла усредненная по скоростям скорость дрейфа электронов (формула Ланжевена):

$$\begin{aligned} \bar{u}_d [\text{см/с}] &= \sqrt{\frac{2m_e}{\pi kT}} \frac{eE}{2m_e} \bar{\lambda}_{ct} = 0,64 \frac{e\bar{\lambda}_{ct}}{m_e \bar{v}_T} E = \\ &= 0,64 \frac{e\bar{\lambda}_1}{m_e \bar{v}_T} \cdot \frac{E [\text{В/см}]}{p [\text{мм рт.ст.}]}, \end{aligned} \quad (3.33)$$

где  $\bar{\lambda}_1 = p\bar{\lambda}_{ct}$  – средний пробег электрона при давлении 1 мм рт.ст. Для средней скорости дрейфа ионов, взаимодействующих с молекулами газа, формула Ланжевена имеет вид

$$\bar{u}_d = a_i \frac{e\bar{\lambda}_{i1}}{m_i v_{iT}} \sqrt{1 + \frac{m_i}{m_\mu} \cdot \frac{E}{p}}, \quad (3.34)$$

$a_i$  – коэффициент, равный  $0,5 \div 1$ ;  $m_\mu$  – масса молекулы иона.

Ионизирующая способность электронов ионизовать атомы называется *первым коэффициентом Таунсенда*, равным числу электронов, создаваемых электроном на единице длины пробега. Прирост

количества электронов пропорционален  $\alpha$  и количеству атомов  $n$ :  $dn(x) = \alpha n dx$ . Тогда число электронов, создаваемых на пути  $x$ :

$$n_e(x) = n_0 \exp(\alpha x), \quad (3.35)$$

а первый коэффициент Таунсенда:

$$\alpha = (1/n)(dn/dx). \quad (3.36)$$

Процесс возникновения электронов характеризуется *частотой ионизации*  $Y_i$  – число электронов, создаваемых одним электроном в единицу времени:

$$Y_i = (1/n)(dn/dt). \quad (3.37)$$

Частота ионизации связана с первым коэффициентом Таунсенда через скорость дрейфа:

$$Y_i / \alpha = u_d.$$

Все три величины  $\alpha$ ,  $Y_i$ ,  $u_d$  зависят от напряженности электрического поля  $E$ .  $\alpha(E)$ ,  $Y_i(E)$ ,  $u_d(E)$  – сложные зависимости, изменяющиеся с изменением условий разряда, но для  $Y_i(E)$  и  $\alpha(E)$  – всегда весьма сильные (экспоненциальные, степенные).

### 3.7.2. Теория электронных лавин

Экспериментально установлено, что напряжение зажигания разряда  $U_3$  зависит от произведения  $pd$  (где  $p$  – давление газа,  $d$  – расстояние между электродами) и имеет некое минимальное значение для данного газа (кривые Пашена на рис. 3.64). *Теория электронных лавин* – первая количественная теория газового разряда.

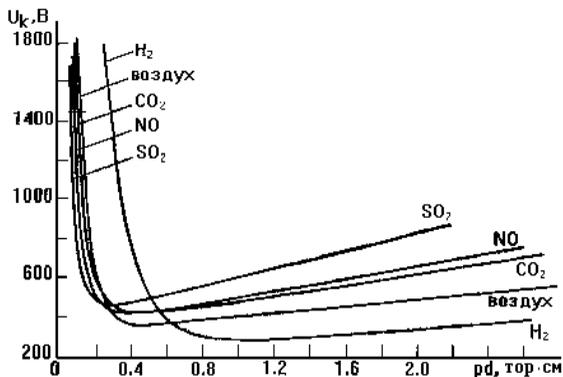


Рис. 3.64. Кривые Пашена

1. Развитие разряда во времени. Очевидно, что реально, помимо рождения в единицу времени на один первичный электрон  $Y_i$  электронов, некое количество электронов одновременно гибнет: а) прилипает к атомам и молекулам с частотой  $Y_a$ ; б) диффундирует к стенкам установки с частотой  $Y_d$ ; в) рекомбинирует с ионами с коэффициентом рекомбинации  $\beta$ . Обычно рекомбинацию не учитывают, так что условие возникновения и развития разряда:

$$Y_i(E) > Y_d + Y_a, \quad (3.38)$$

а горения стационарного разряда:

$$Y_i(E) = Y_d + Y_a. \quad (3.39)$$

Это так называемый "стационарный критерий пробоя". По определению,  $Y_d = 1/\tau_d$ , где время диффузии  $\tau_d$  зависит от коэффициента диффузии  $D$  и характерная диффузионная длина пробега электронов к стенкам  $\lambda_d$ :  $\tau_d = \lambda_d^2/D$ . Для цилиндра  $1/\lambda_d^2 = (2,4/R)^2 + (\pi/L)^2$  ( $R$  и  $L$  – радиус и длина цилиндра); для параллелепипеда:  $1/\lambda_d^2 = (\pi/L_1)^2 + (\pi/L_2)^2 + (\pi/L_3)^2$  ( $L_1, L_2, L_3$  – линейные размеры параллелепипеда). Из выражений для частоты ионизации (3.37) и условия (3.36) можно составить феноменологическое соотношение баланса для плотности электронов:

$$dn_e/dt = n_e(Y_i(E) - Y_d - Y_a), \quad (3.40)$$

откуда

$$n_e = n_{e0} \exp((Y_i(E) - Y_d - Y_a)t) = n_{e0} \exp(t/\theta), \quad (3.41)$$

где  $\theta$  – постоянная времени лавины. Очевидно, что развиваться лавина может только, если выполняется условие (3.38), и при неограниченном  $t$  лавина может развиваться произвольно долго. Но есть ситуации, когда  $t$  очень мало (особенно в лазерной искре), тогда необходимо большое превышение рождения электронов над гибелью, т. е. большое электрическое поле  $E$  (а в лазерной искре просто гигантское!). Из обобщенного критерия пробоя (3.41)

$$\theta^{-1}(E(t)) = Y_i(E) - Y_d - Y_a = \ln(n(t)/n_0)/t \quad (3.42)$$

видно, что разряд приходит к стационарному при  $t \rightarrow \infty$ . На самом деле этот переход происходит раньше. Нарастание тока не безгранично, как это должно было быть по теории электронных лавин, а

ограничивается объемным зарядом. Так как с ростом последнего при возникновении виртуального катода эффективное расстояние до анода сокращается, то на более короткой длине пролетного промежутка уменьшается вероятность ионизации атомов и молекул газа электронным ударом. В результате разряд переходит к стационарному.

2. *Развитие разряда в пространстве.* Предположим, что из катода вылетел один электрон. В сильном поле прикатодного слоя он быстро наберет энергию, достаточную для ионизации атома (молекулы) газа, после ионизации будет два медленных электрона (и один ион). Электроны также ускорятся, каждый произведет ионизацию – станет их четыре, тоже ускорятся, ионизуют, станет восемь и т.д. – возникает лавина, идет цепной процесс.

На расстоянии  $x$  первый электрон создаст  $(e^{\alpha x} - 1)$  электронных пар. Возникающие в промежутке электроны дрейфуют к аноду, ионы – к катоду. Приходящие на катод ионы способны выбивать из катода вторичные электроны. Для описания процесса ионно-электронной эмиссии Таунсендом был предложен второй коэффициент  $\gamma$ , равный числу вторичных электронов на один приходящий на катод ион (*второй коэффициент Таунсенда*) и зависящий от материала катода, чистоты его поверхности и др., обычно  $\gamma = 10^{-4} \div 10^{-2}$ . Таким образом, ионы пойдут к катоду, ускорятся и выбьют из катода  $\gamma(e^{\alpha x} - 1)$  электронов. Даже если это будет всего один вторичный электрон, то процесс повторится, так что условием горения разряда будет:

$$\gamma(e^{\alpha x} - 1) \geq 1. \quad (3.43)$$

Каждый вторичный электрон также ионизует атомы и рождает электроны  $(e^{\alpha x} - 1)$ . Нетрудно показать, если число первичных электронов  $n_0$ , длина промежутка между катодом и анодом  $d$ , то после суммирования всех вторичных электронов в предположении  $\gamma(e^{\alpha x} - 1) < 1$  число электронов, приходящих на анод, будет равно:

$$n = n_0 \cdot \frac{\exp(\alpha d)}{1 - \gamma[\exp(\alpha d) - 1]}. \quad (3.44)$$

Величина  $\mu = \gamma[\exp(\alpha d) - 1] \quad (3.45)$

называется *коэффициентом ионизационного нарастания*. При  $\mu < 1$  ток будет затухать, условие  $\mu = 1$  является условием перехода к самостоятельному разряду (*условие зажигания разряда*) и условием *стационарности разряда*. Картина упрощена и идеализирована, реально электроны гибнут (прилипают, рекомбинируют, диффундируют к стенкам), но и создаются на катоде не только ионной бомбардировкой, да и  $\alpha = \text{const}$  только при  $E = \text{const}$  на всей протяженности  $d$ , но в действительности  $E$  в катодном слое существенно меняется. В конце прошлого столетия Таунсенд, установил экспериментальную зависимость:

$$\alpha/p = A \exp(-Bp/E), \quad (3.46a)$$

где  $A$  и  $B$  – постоянные для данного газа и катода;  $p$  – давление;  $E$  – напряженность электрического поля. Такая зависимость может быть качественно объяснена тем, что вероятность пройти электрону без столкновений путь  $\lambda_i$ , на котором электрон набирает необходимую для ионизации энергию, пропорционален  $\exp(-\lambda_i/\bar{\lambda}_{\text{ст}})$ . Коэффициент Таунсенда  $\alpha = N \exp(-\lambda_i/\bar{\lambda}_{\text{ст}})$ , где  $N = 1/\bar{\lambda}_{\text{ст}}$  – число соударений на 1 см, пропорциональное давлению:  $N = N_0 p$ ,  $N_0$  – число столкновений электрона на 1 см пути при давлении, равном единице. С учетом того, что  $\lambda_i = U_i/E$  получим соотношение, подобное (3.46a):

$$\alpha/p = N_0 \exp(-N_0 U_i p/E). \quad (3.46b)$$

Подстановка численных значений дает правильный порядок величин  $A$  и  $B$ .

Коэффициенты Таунсенда  $\alpha$  и  $\gamma$  обладают тем свойством, что отношение  $\alpha/p$  и  $\gamma$  не являются функцией по отдельности от напряженности электрического поля  $E$  и давления газа  $p$ , а зависят от их отношения:  $\alpha/p = f_1(E/p)$  и  $\gamma = f_2(E/p)$ . Условие зажигания разряда, или условие, позволяющее определить *напряжение зажигания*  $U_3$ , имеет вид:

$$f_1\left(\frac{U_3}{pd}\right) \left( \exp\left[ f_2\left(\frac{U_3}{pd}\right) \right] - 1 \right) = 1. \quad (3.47)$$

Из (3.47) видно, что напряжение зажигания  $U_3$  является функцией произведения  $pd$ , и при  $pd = \text{const}$  напряжение зажигания не меняется. Эта закономерность носит название *закона Пашена*. Кривую Пашена (см. рис. 3.64), отражающую зависимость  $U_3$  от  $pd$ , называют *характеристикой зажигания разряда*. Выражая  $\alpha$  из условия зажигания разряда ( $\mu = 1$ ) с учетом (3.45) и подставляя в выражение (3.46а), можно получить:

$$E/p = B/(C + \ln(pd)),$$

где  $C = \ln(A/(\ln(1/\gamma + 1)))$ . Приняв  $U_3 = Ed$ , найдем зависимость напряжения зажигания от  $pd$ :

$$U_3 = Bpd/(C + \ln(pd)),$$

которая и описывается кривыми Пашена. Важно, что существенны не  $p$ ,  $d$ ,  $E$  "отдельно", а "комбинации"  $pd$  (так как  $p = n_g T_g$ , где  $n_g$  и  $T_g$  – плотность и температура газа, если  $T_g = \text{const}$ , то  $pd$  определяет число ионизирующих столкновений на пробеге  $d$ ), и особенно  $E/p$ , т.е. как бы "напряженность поля на одну частицу газа". Минимум  $U_3$  соответствует  $(pd)_{\min}$ :

$$(pd)_{\min} = (\bar{e}/A) \ln(1/\gamma + 1), \quad (3.48)$$

где  $\bar{e} \approx 2,72$  – не заряд электрона, а основание натурального логарифма. Соответствующее минимальное напряжение зажигания  $U_{3 \min} = B(1 - C)$  зависит только от сорта газа и материала катода, минимум отношения  $(E/p)_{\min} = B$  зависит только от сорта газа.

Расчеты удовлетворительно совпадают с экспериментальными кривыми Пашена (см. рис. 3.64). Описательно кривые Пашена можно понять так: с уменьшением  $pd$  медленно растет  $E/p$  (правая ветвь на рис. 3.64), значит, растет  $Y_i$ , и для пробоя достаточно меньших  $U_3$ , и так до  $U_{3 \min}$ . Дальнейшее уменьшение  $pd$  (левая ветвь) приводит к быстрому уходу электронов (мало столкновений) и для компенсации этого необходим быстрый рост  $E/p$ , т.е. потенциала пробоя  $U_3$ . Можно дать описание этой зависимости при фиксированном значении одной из величин  $p$  или  $d$ . Пусть давление уменьшается при постоянном  $d$ . Тогда с уменьшением давления увеличивается длина свободного пробега, т.е. увеличивается

набираемая электроном энергия, а значит, растет  $\alpha$ . При дальнейшем уменьшении  $p$  начинает уже падать число столкновений, что приводит к снижению  $\alpha$ . При постоянном давлении с уменьшением расстояния  $d$  увеличивается  $\alpha$ , так как растет электрическое поле. Затем с уменьшением  $d$  коэффициент Таунсенда снижается из-за уменьшения длины развития лавины. Так же описательно можно понять эмпирическую зависимость Таунсенда (3.46) и кривые Пашена (см. рис. 3.64).

*Темным (таунсендовским)* называется электрический разряд в газах при низком давлении (порядка нескольких Торр) и очень малых токах (менее  $10^{-5}$  А). Электрическое поле в разрядном промежутке однородно или слабо неоднородно, и не искажается пространственным зарядом, который пренебрежимо мал. По теории электронных лавин в соответствии с (3.43) ток разряда должен неограниченно возрастать со временем. Реально же ток ограничен параметрами цепи. Очень малый ток таунсендовского разряда обусловлен большим сопротивлением внешней цепи. Если сопротивление внешней цепи снижать, увеличивая ток, то таунсендовский разряд переходит в тлеющий.

### 3.7.3. Тлеющий разряд

*Тлеющим* называется электрический разряд в газе, характеризующийся термодинамической неравновесностью и квазинейтральностью плазмы, возникающей в разряде. Эффективная температура электронов существенно выше температуры газа и электродов. Термоэмиссия практически отсутствует (электроды холодные). Свое название разряд получил из-за наличия около катода так называемого тлеющего свечения. Обычно в разряде наблюдаются три визуально различимые области: а) прикатодная область, на ней падает напряжение  $U_k$ , обычно  $200 \div 700$  В; б) положительный столб – в физике тлеющего разряда пассивный элемент (сближая анод и катод, можно ликвидировать положительный столб, разряд будет гореть); в) прианодный слой, обычно очень тонкий, состоит из светящейся "пленки" и тонкого темного участка. Долго считали, что он тоже "пассивный", однако теперь доказано, что некоторые неустойчивости прямо связаны с ним. Падение напряжения на анодном слое  $U_a$  невелико ( $10 \div 20$  В) и обычно близко к потенциа-

лу ионизации газа (очень чувствительно к состоянию поверхности анода).

### *Прикатодная область*

Прикатодная область физически наиболее важный элемент тлеющего разряда: именно в нем образуется электронная лавина. В данном газе при данном давлении формируется длина прикатодной области  $d_k$ , равная нескольким длинам ионизации. Установившаяся длина  $d_k$ , обратно пропорциональная давлению  $p$ , такова, чтобы величина  $pd_k$  соответствовала минимальному значению  $U_k$  (природа экономна!). Основной характерной особенностью тлеющего разряда является большое падение потенциала в прикатодной области  $U_k$  – сотни вольт. Из катодного слоя в положительный столб уходит некоторое количество электронов с такой энергией, чтобы ионизовать в столбе достаточно атомов (молекул) для компенсации теряемых электронов, т.е.  $U_k$  должно быть много больше потенциала ионизации атомов газа. Катодная область как бы "приклеена" к поверхности катода: если проводящей является только одна его поверхность, то при любом повороте катода разряд приходит только на нее – даже если ее повернуть на  $180^\circ$ , как бы спиной к аноду. Свечение катодной области – "слоистое" (рис. 3.65). У самого катода находится темное "астроново пространство", связанное с тем, что электроны, вышедшие с катода, еще не набрали достаточной энергии для возбуждения атомов и молекул газа. Затем располагается область катодного свечения, в которой происходит интенсивное возбуждение различных уровней. Катодное темное пространство, возникает там, где энергия ускоренных электронов «переваливает» через значение в максимуме функции возбуждения, сечения возбуждения уменьшаются, количество возбужденных атомов падает. Далее электроны преимущественно ионизируют атомы, происходит лавинообразное размножение электронов, которые ускоряясь вновь вызывают возбуждение атомов. Появляется «тлеющее отрицательное свечение», благодаря которому тлеющий разряд и получил свое название. В плазме разряда электрическое поле резко падает, электроны, растрчивая свою энергию, не приобретают в слабом поле энергии, достаточной для возбуждения атомов,

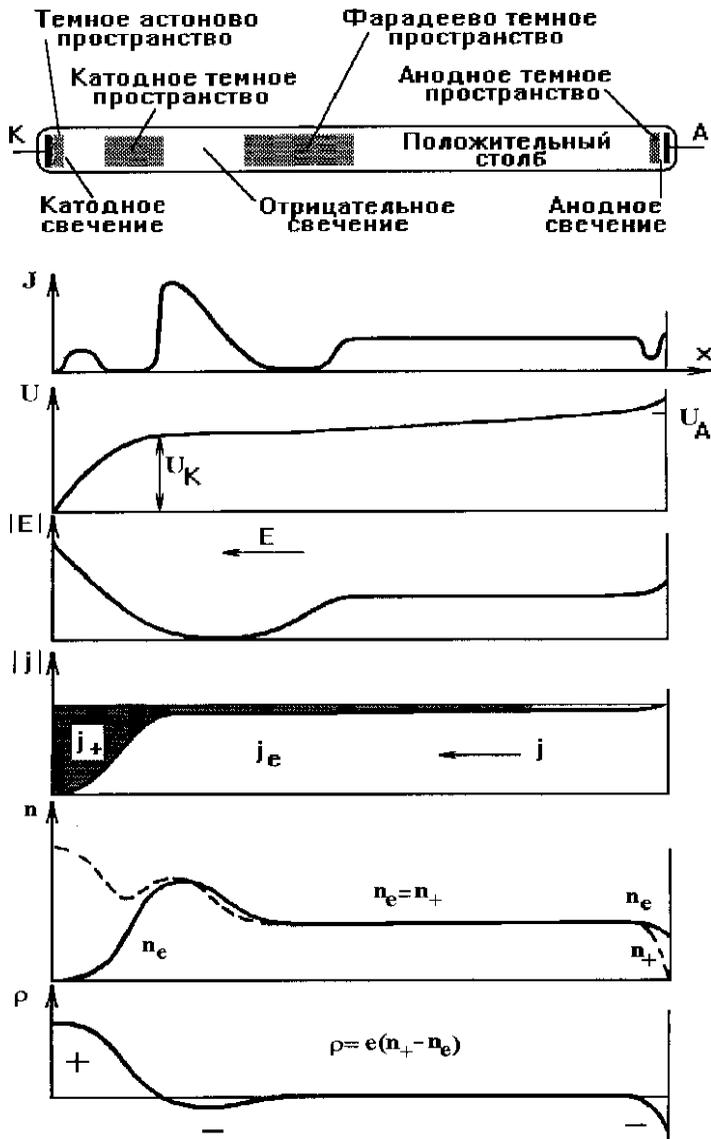


Рис. 3.65. Картина тлеющего разряда в трубке и распределения интенсивности свечения  $J$ , потенциала  $U$ , продольного поля  $E$ , плотностей электронного и ионного токов  $j_e, j_+$ , концентраций  $n_e, n_+$  и объемного заряда  $\rho = e(n_+ - n_e)$

возникает темное "фарадеево пространство". В области тлеющего свечения ( $\rho \approx 0$ ) наиболее идеальная плазма. Так как электрическое поле  $E \approx 0$  электроны переходят из области тлеющего свечения в фарадеево пространство главным образом за счет диффузии. Ионы попадают в прикатодную область также за счет диффузии. Ускоренные к катоду ионы выбивают вторичные электроны. Темное фарадеево пространство – переходная область, в которой нет ионизации и возбуждения. По мере приближения к положительному столбу беспорядочное тепловое движение электронов все более преобладает над направленным движением. Описание всех процессов, объясняющих эту "слоистость" (и некоторые более тонкие эффекты), и сейчас является далеко не полным. Непонятно и еще одно явление: площадь токового пятна  $S_{\Pi}$  на катоде в нормальном режиме всегда определяется из соотношения  $S_{\Pi} = I/j_{\Pi}$ , где  $I$  – полный ток;  $j_{\Pi}$  – некоторая «нормальная плотность тока», постоянная для данного разряда. Это важное свойство тлеющего разряда называется *законом нормальной плотности тока*. При увеличении  $I$  (например, при снижении внешнего сопротивления  $R$  или повышении ЭДС источника  $\epsilon$ )  $S_{\Pi}$  растет пропорционально току до тех пор, пока токовое пятно не займет всю проводящую поверхность катода (и подводящих голых проводов). При этом катодное падение напряжения  $U_k$  остается постоянным. Дальнейшее повышение  $I$  приводит к росту  $U_k$  – это "аномальный режим" с *аномальным катодным падением потенциала*, а сам разряд переходит к *аномальному тлеющему разряду*. Почему  $j_{\Pi} = \text{const}$  – остается неизвестным.

### Положительный столб

Если в показанной на рис. 3.65 установке повышать ток, то в какой-то момент загорится разряд, причем между катодной областью и анодом появится свечение с характерным для данного газа спектром излучения и занимающее все сечение трубки. Это и есть положительный столб, причем на нем будет падение напряжения  $U_{\text{пс}} = \epsilon - IR - U_k - U_a$ . Это единственная область разряда, которая может быть произвольной длины. Положительный столб

представляет собой плазму с концентрацией частиц, убывающей от оси к стенкам, в нем идет интенсивный процесс ионизации и потери частиц на стенки, при этом положительный столб практически не дает ионов в катодную область. Уходящие на стенки электроны заряжают их отрицательно относительно центральной области вблизи оси, и ионы ускоряются на стенку, т.е. происходит амбиполярная диффузия. В итоге электроны и ионы на стенках рекомбинируют. Наличие радиального градиента приводит к тому, что эквипотенциали имеют выпуклую форму. Особенно отчетливо это видно при возникновении в положительном столбе за счет колебательных процессов стоячих или бегущих страт. Процесс образования положительного столба довольно сложный, хотя его "назначение" – соединить катодный и анодный слои. Столб электрически нейтрален, так что плотности электронов и ионов (однозарядных) равны, а токи, соответственно, сильно различаются. Температура основной массы электронов  $T_e = 1 \div 2$  эВ, а ионов практически равна температуре стенок (ионы быстро обмениваются поступательной энергией с газом), так что положительный столб термодинамически сильно неравновесен. Сближая катод и анод, можно ликвидировать положительный столб, но разряд будет гореть. Более того, анодным слоем можно пройти темное фарадеево пространство, но как только он соприкоснется с тлеющим слоем – отрицательное тлеющее свечение разряда погаснет. Сравнительно недавно было доказано, что свечение столба поддерживают относительно быстрые электроны ( $20 \div 30$  эВ), ускоренные в катодной области и поступающие из катодного столба в количестве как раз достаточном для компенсации потерь электронов в нем и обеспечения возбуждения газа. В рекламных трубках положительный столб следует за всеми их изгибами, что объясняется образованием поверхностных зарядов на внутренних стенках трубок и появлением соответствующих поперечных электрических полей. Если увеличивать давление, то происходит сжатие положительного шнура, температура и проводимость возрастают, ток растет, вызывая дополнительный разогрев. В результате роста температуры может начаться термическая ионизация и тлеющий разряд может перейти в дуговой. Так как это очень важная неустойчивость, рассмотрим ее механизм, правда, упрощенно.

## Неустойчивости положительного столба

Часто положительный столб "стратифицирован" – состоит из светлых и темных полос, обычно бегущих с такой скоростью, что визуально столб воспринимается сплошным. Это одна из неустойчивостей положительного столба, но не самая неприятная. Наиболее важная – так называемая "контракция" или "шнурование". При некотором предельном значении тока (предел зависит от многих конкретных условий) разряд в трубке собирается в тонкий ярко светящийся шнур, очень похожий на шнур дугового разряда (в англоязычной литературе называют arcing), но это еще не дуга, хотя температура ионов  $T_i$  поднимается до десятых долей электрон-вольт, так что отрыв  $T_e$  от  $T_i$  существенно уменьшается. Предположим, что флуктуативно произошло местное повышение плотности электронов  $\delta n_e \uparrow$ , как следствие вырастает плотность тока  $\delta j \uparrow$  ( $j = n_e e v$ ), проводимость  $\delta \sigma \uparrow$  ( $\sigma = n_e e^2 / \tau$ ) и энерговыделение  $\delta w \uparrow$  ( $w = j^2 / \sigma$ ). В результате возрастет температура газа  $\delta T_g \uparrow$ , уменьшится его плотность  $\delta n_g \downarrow$  (так как давление  $p_g = n_g T_g$  выравнивается быстро и его можно считать постоянным), возрастает отношение  $\delta E / n_g \uparrow$ , вырастает частота ионизации  $\delta Y_i \uparrow$ , возрастает  $\delta n_e \uparrow$  – цепочка замкнулась:

$$\delta n_e \uparrow \rightarrow \delta j \uparrow \rightarrow \delta w \uparrow \rightarrow \delta T_g \uparrow \rightarrow \delta n_g \downarrow \rightarrow \delta E / n_g \uparrow \rightarrow \delta Y_i \uparrow \rightarrow \delta n_e \uparrow \rightarrow \dots (3.49)$$

идет рост  $j$  и  $T_g$ , образуется шнур. Неустойчивость называют "ионизационно-перегревной" (цепочка может начаться и со случайного локального возрастания температуры газа  $\delta T_g \uparrow$ ).

## Анодный слой

Анодный слой всегда очень тонкий. Электроны ускоряются к аноду и ионизуют газ. Если ток на анод  $I_a = \frac{1}{4} n_e e \bar{v}_e S$  больше разрядного тока в цепи ( $I_a > I$ ), то анод заряжается отрицательно относительно положительного столба, в противном случае ( $I_a < I$ ) положительно. Следует отметить, что в лазерных средах (при больших  $p$  и  $j$ ) при повышении давления растет анодное падение

потенциала, но сохраняется нормальная плотность тока, сравнимая с нормальной плотностью тока катода.

Так как для горения тлеющего разряда необходимо поддерживать достаточно высокое напряжение 400 – 20000 В, то разброс энергий ионов в нем достаточно большой. В качестве источника ионов такой разряд используют, вытягивая ионы из области катода через длинный узкий канал, что позволяет сформировать пучок с небольшой угловой расходимостью (канально-лучевой источник).

### Разряд с полым катодом

Такой тип разряда реализуется в полости, когда ее диаметр примерно соответствует длине отрицательного свечения.

Электроны производят эффективную ионизацию за счет осцилляций между катодными падениями потенциала противоположных стенок полости (электростатическое удержание), при этом характерный размер катодной полости должен быть меньше длины свободного пробега электронов. В разряде с полым катодом происходит резкое падение напряжения горения разряда и увеличение его тока (рис. 3.66).

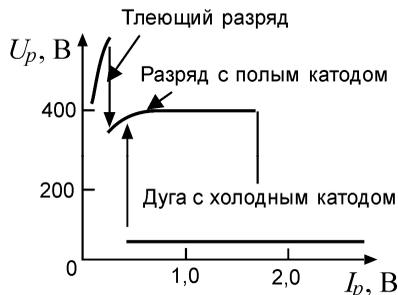


Рис. 3.66. Вольт-амперная характеристика разряда с полым катодом в различных областях его существования

Концентрация плазмы в таком разряде может составлять  $10^{10} - 10^{13} \text{ см}^{-3}$ , а температура – несколько электрон-вольт. Для разряда с полым катодом оптимальной считается полость, длина которой превышает ее диаметр в 7 – 10 раз. Эффект полого катода наблюдается и в микрополостях на поверхности вплоть до атмосферного давления.

Разряды с электростатическим удержанием электронов позволяют создать эффективные источники потоков частиц, в том числе и потоков достаточно быстрых перезарядившихся нейтральных атомов. Полые катоды широко используются в традиционных плазменных источниках ионов (например, в дуоплазматронах), так

как по сравнению с накаливаемыми катодами резко увеличивают ресурс работы источника до замены катода.

### 3.7.4. Дуговые разряды

*Электрической дугой* называют установившийся (или почти установившийся) разряд, который характеризуется низким катодным падением потенциала и высокой плотностью тока на катоде ( $j_k \geq 10 \div 10^2 \text{ А/см}^2$ ). Такие формы разряда известны с 1802 г. (Петров В.В.), но ряд особенностей непонятен и до сих пор. Не установилась еще даже общепринятая классификация дуговых разрядов, которые делятся по типу катодов и по давлению рабочего вещества. Так, по типу катода различают: а) подогривные; б) горячие; в) холодные; г) угольные; по давлению: а) низкого давления ( $p \leq 10^{-3} \div 1 \text{ атм}$ ); б) высокого ( $p \sim 1 \div 5 \text{ атм}$ ); г) сверхвысокого ( $p > 10 \text{ атм}$ ). В дуговом разряде можно различить: 1) прикатодный слой – тонкий, падение напряжения порядка потенциала ионизации (бывает даже меньше) атомов газа; 2) положительный столб, состояние и поведение плазмы в котором определяется балансом энергии (температуры ионов  $T_i$  и электронов  $T_e$  в центральной части столба равны); в) анодный – тоже тонкий слой и тоже с малым падением напряжения на нем.

#### *Дуги с подогривным катодом*

*Дуги с подогривным катодом* – несамостоятельные разряды, используются в основном как выпрямители, управляемые включением-выключением разрядного напряжения (газотроны) или изменением фазового сдвига напряжений анода (или катода) и сетки (тиратроны). В дуге катодный слой только ускоряет электроны термоэмиссии настолько, чтобы они поддерживали нужную ионизацию газа. Образующаяся плазма как бы "приближает" анод к катоду, так что ограничения тока объемным зарядом ("закон  $3/2$ " для вакуумного промежутка) в дуге нет. В результате при напряжении между анодом и катодом 10 – 20 В ток на порядки больше, чем был бы в вакууме.

## *Дуги с горячими катодами*

Физика прикатодной области горячего дугового разряда не проще прикатодной области тлеющего разряда, да и изучена хуже. Ускоренные непосредственно вблизи катода термоэмиссионные электроны в прикатодной области создают ион-электронные пары. Ионы ускоряются к катоду, поддерживая его высокую температуру, и «производят»  $2 \div 9$  термоэмиссионных электронов на один ион. Производство электронов ионами на катоде через поддержание термоэмиссии энергетически значительно выгоднее, чем прямая ион-электронная эмиссия (как в тлеющем разряде), но возможно только при большой плотности тока. Катодом обычно служит или высокотемпературный металл (часто вольфрам) или расплав металла (ванны при производстве Al, Mg). Несмотря на низкое падение потенциала, электрическое поле около катода в дуге большое, так как плазма поджимает прикатодный слой к поверхности катода. Так, для плотностей тока  $j \sim 10^3 \text{ A/cm}^2$  ток термоэмиссии возрастает за счет эффекта Шоттки приблизительно в 3 раза ( $E_k \sim 10^6 \text{ V/cm}$ ). Однако токи в  $10^8 \text{ A/cm}^2$  объяснить термоэлектронной и автоэлектронной эмиссией катода невозможно, приходится делать предположения о взрывной эмиссии микроострий и о расплавлении поверхности катода и выбросе расплавленного металла в разрядный промежуток с последующей его ионизацией.

## *Дуги с холодными катодами*

*Дуги с холодными катодами* – это по существу дуги с локальными термоэмиттерами: на катоде образуются токовые пятна, причем плотность тока должна быть больше критической (для данного металла), иначе дуга гаснет. Это объясняется необходимостью концентрации энергии для получения электронов с катода. Плотности тока очень большие (у меди до  $10^8 \text{ A/cm}^2$ !), данные опытов сильно различаются, а теоретического описания нет. Пятна хаотически бегают по катоду, попытки упорядочить их движения пока не дали результата. Известно, что если пятно поместить в магнитное поле  $H$ , перпендикулярное току  $j$ , то пятно побежит навстречу (!) вектору  $\vec{j} \times \vec{H}$  ... Объяснения до сих пор нет. Нет полного понимания и механизмов электронной эмиссии: если для средних значе-

ний плотности тока ( $j \sim 10^6$  А/см<sup>2</sup>) расчетное поле  $E \sim 10^7$  В/см (у самого катода) – теория и эксперимент примерно совпадают, то ни для малых, ни для самых больших значений  $j$  необходимые для обеспечения соответствующей автоэлектронной эмиссии значения  $E$  оказываются неправдоподобно большими. Иногда пятна останавливаются (бывает надолго), в таком месте идет сильная эрозия (до дыр и прекращения разряда).

### Положительный столб дугового разряда

Положительный столб дугового разряда сильно зависит от рода газа, давления, силы тока. При малых давлениях ( $p \leq 0,1$  атм) и силе тока ( $I \sim 1$  А) столб неравновесен ( $T_e > T_i$ ) и сильно напоминает контрагированный шнур тлеющего разряда.

Плазма паров металла, молекулярных газов при давлении  $p \geq 1$  атм всегда равновесна, характерное распределение (по радиусу столба) температуры и проводимости представлено на рис. 3.67.

При обычном распределении тока температура будет иметь колокообразную форму, равномерно уменьшаясь от  $T \sim (10 \div 12) \cdot 10^3$  К в центре до температуры стенки. Плотность электронов по радиусу спадает очень быстро – в равновесной плазме  $n_e \sim \exp(-r/r_0)$  (а с ней и проводимость ( $\sigma \sim n_e$ )), так что токопроводящий канал сосредоточен у оси. На радиусе, большем  $r_0$  (см. рис. 3.67), проводимостью плазмы можно пренебречь. Однако связать количественно ток  $I$ , радиусы  $r_0$  и  $R$ , мощность  $w$  удалось только введя принцип минимума мощности "min w". При заданном токе  $I$  и радиусе

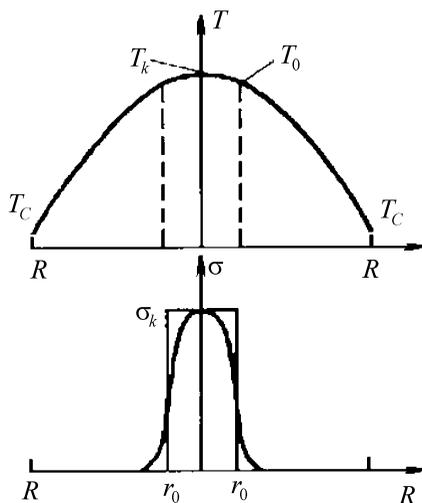


Рис. 3.67. Схематические распределения  $T$  и проводимости  $\sigma$  по радиусу столба дуги. Штриховая линия – замена  $\sigma(r)$  ступенькой в «канальной» модели

се  $R$  устанавливается такое значение  $r_0$ , при котором выделяющаяся в разряде мощность была бы минимальной (позже доказали, что принцип "min w" справедлив не всегда, но в дуге справедлив). Существенно, что максимальная температура  $T_k$  (см. рис. 3.67) весьма слабо зависит от охлаждения дуги (важен только теплоотвод от катода) и растет с вкладываемой мощностью несколько медленнее, чем корень квадратный из мощности. При высоком давлении ( $p \geq 10$  атм) и высокой температуре ( $T \geq 12000$  К) очень существенным оказывается охлаждение излучением, оно уносит до 90 % мощности.

### *Область анода*

Область анода так же, как и прикатодная, весьма тонкая, падение напряжения на ней зависит от режима работы анода, а их два. Первый режим – диффузный имеет место при большой площади анода и плотности тока  $j \leq 10^2$  А/см<sup>2</sup>, ток распределен по всему аноду и падение напряжения очень мало ( $1 \div 3$  В) (и даже бывает отрицательным). Второй режим: если площадь анода мала (ток выходит на края и т.д.), то при некотором токе (зависит от многих причин) ток собирается в пятно (или пятна) с плотностью  $j = 10^2$  А/см<sup>2</sup>. Анодные пятна образуют правильные геометрические фигуры (!), иногда бегают, но тоже по упорядоченным траекториям (круги, овалы, ...). Механизмы не известны.

### *Зажигание дуги*

Помимо зажигания дуги путем разъединения электродов есть другой способ образования дуги – ионизация в межэлектродном промежутке при подаче повышенного напряжения и выбор формы электродов, способствующей разряду (обычно острие). Если в тлеющем разряде увеличивать силу тока (путем снижения внешнего сопротивления или повышая ЭДС источника  $\epsilon$ ), то при большой силе тока напряжение на электродах трубки начинает падать, разряд быстро развивается, превращаясь в дуговой. В большинстве случаев переход осуществляется скачком и нередко ведет к короткому замыканию.

В плазменных источниках ионов широкое распространение получил так называемый капиллярно-дуговой разряд. Внутри узкого капилляра плазма поддерживается не потоком ускоренных в прианодном падении потенциала электронов, а большим количеством электронов, поступающих со стенок капилляра с энергией, достаточной для ионизации. Их присутствие связано с большой долей атомов, находящихся на стенках капилляра в возбужденном состоянии. При большой плотности потока возбужденных атомов происходит ступенчатая ионизация. Энергетический спектр вылетающих из капилляра частиц довольно широкий из-за высокой степени перезарядки ионов в плотной струе сопутствующего газа. Применение накаливаемого катода позволяет резко снизить напряжение горения разряда и реализовать низковольтный капиллярно-дуговой источник.

### 3.7.5. Искровой и коронный, ВЧ- и СВЧ-разряды

#### *Искровой разряд*

Искра может загораться в плотном (давление порядка атмосферы и больше) газе при большой напряженности электрического поля. Первичная лавина быстро поляризуется – электроны отходят в сторону анода, а ионы практически стоят. При образовании лавины происходит много возбуждений с быстрым высвечиванием, фотоэффект создает новые электроны, новые лавины вблизи основной, они втягиваются в основную лавину, растет ее объединенный заряд, растет создаваемое им электрическое поле  $E$ . Когда поле  $E$  примерно станет равным внешнему  $E_0$ , возникает тонкий проводящий канал – стример, соединяющий электроды (стример может быть направлен к любому электроду или сразу к обоим). Скорость распространения стримеров (более  $10^8$  см/с) гораздо больше скорости распространения электронных лавин, определяемой подвижностью электронов. Таким образом, для развития стримера необходимо выполнение двух условий: 1) поле лавины сравнивается с внешним полем ( $E \sim E_0$ ); 2) излучение переднего фронта лавины достаточно для фотоионизации нужного количества атомов газа. Собственно стример – слабопроводящий, но перед самым замыканием межэлектродного промежутка вдоль него проходит волна

скачка потенциала, образуется хорошо проводящий канал, и уже по нему проходит большой ток – собственно искра. Газ в канале сильно нагревается, возникает скачок давления – звуковая волна (в молнии – гром). (Изложение весьма упрощенное, но более аккуратное – намного длиннее, а полной ясности все равно нет...) Если межэлектродное расстояние – большое, поле  $E$  – неоднородное, на конце стимера может образоваться хорошо проводящий участок – лидер, что характерно для молний, где последовательно образуется несколько лидеров, по существу несколько разрядов с временными сдвигами в десятки миллисекунд. Вакуумная искра может использоваться для генерации импульсных потоков частиц, содержащих в плазме материалы электродов.

### *Коронный разряд*

*Коронный разряд* – самостоятельный разряд, который возникает только при условии очень большой неоднородности электрического поля хотя бы у одного из электродов (острие – плоскость, нить – плоскость, две нити, нить в цилиндре большого радиуса и т.д.). Условия возникновения и развития короны – различные при разной полярности "острия" (назовем так электрод, вблизи которого  $E$  сильно неоднородно). Если острие – катод (корона "отрицательная"), то зажигание короны по существу происходит так же, как в тлеющем разряде, только для определения первого коэффициента Таунсенда  $\alpha$  (так как поле  $E$  сильно неоднородное) в воздухе (практически важный случай) надо учитывать прилипание (наличие кислорода), так что

$$\int_0^{x_1} (\alpha(x) - a_n(x)) dx = \ln(1 + \gamma^{-1}), \quad (3.50)$$

где  $\alpha_n$  – коэффициент прилипания,  $x_1$  – расстояние до точки, в которой  $E$  уже так мало, что ионизация не происходит:  $E \approx 0$ . В такой короне есть свечение только до расстояния, тоже примерно равного  $x_1$ . Если "острие" – анод (корона "положительная"), то картина существенно меняется: около острия наблюдаются светящиеся нити, как бы разбегающиеся от острия. Вероятно, это стримеры от лавин, зарожденных в объеме фотоэлектронами. Очевидно, что и крите-

рий зажигания другой – такой, как для образования стримера. В любом коронном разряде существенна неоднородность  $E$ , т.е. конкретная геометрия электродов.

Сводная вольт-амперная характеристика разрядов в постоянном электрическом поле показана на рис. 3.68.

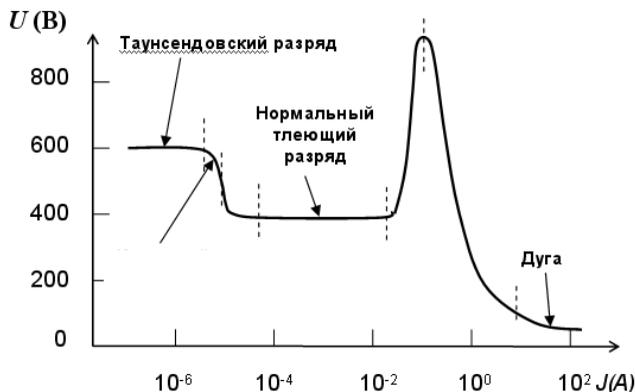


Рис. 3.68. Вольт-амперная характеристика самостоятельного разряда в постоянном электрическом поле

### Высокочастотные (ВЧ) разряды

В ВЧ-диапазоне ( $10^{-1} \div 10^2$  МГц) принято различать  $\tilde{E}$  (емкостные) и  $\tilde{H}$  типы разрядов – по определяющему вектору электромагнитного поля. Мощности  $\tilde{E}$  разрядов небольшие (их задача поддержать ионизацию), но напряженности  $\tilde{E}$  велики – до десятков килоэлектрон-вольт.

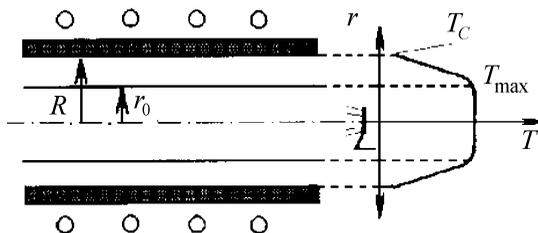


Рис. 3.69. Индукционный разряд в трубке радиусом  $R$ , вставленной в длинный соленоид;  $r_0$  – радиус плазмы, справа – распределение температуры по радиусу

Обычно индуктор – катушка (бывает и один виток!), внутри которой и происходит разряд (рис. 3.69). Такие разряды часто называют *разрядами с индуктивно связанной плазмой*.

Переменное  $\vec{H}$  поле направлено вдоль оси катушки, поле  $\vec{E}$  – аксиально к ней. Для поддержания разряда нужно  $\vec{E}$  существенно меньше, чем для его зажигания. Поэтому обычно вводят в объем тонкий металлический электрод, он разогревается, дает термоэлектроны (иногда частично испаряется), инициирует разряд, после чего его удаляют. Во время работы мощность вводится потоком электромагнитной энергии:

$$\langle S \rangle = (c/4\pi) \langle EH \rangle, \quad (3.51)$$

а отводится чаще всего потоком газа (он ионизуется и уносит энергию). Но электромагнитная энергия проникает в плазму (проводник) на глубину  $x$ , спадая по экспоненте  $\exp(-x/\delta)$ , где  $\delta$  – скин-слой, и его условились считать глубиной проникновения потока:

$$\delta^2 = c^2 / (2\pi\hat{\sigma}\omega), \quad (3.52)$$

где  $c$  – скорость света;  $\hat{\sigma}$  – проводимость проводника;  $\omega$  – частота ВЧ-поля.

Очевидно, режим работы генератора плазмы зависит от соотношения  $R$  и величины  $\delta$ . Если  $\delta < R$ , то энергия поглощается, в слое толщиной  $\delta$ , образуя проводящий цилиндр. Распределения по радиусу температуры  $T$  и проводимости  $\hat{\sigma}$  представлены на рис. 3.70, по существу, это полный аналог канальной модели дуги, ее называют "моделью металлического цилиндра". Следует отметить, что реально можно управлять давлением  $p$  (желательно делать его побольше!) и потоком  $\langle EH \rangle$ , определяемым ампер-витками:  $\langle EH \rangle \sim IN$  (где  $I$  – ток,  $N$  – число витков на единицу длины индуктора).

Примерно на порядок более высокую концентрацию плазмы позволяет получить геликонный разряд (рис. 3.71). В этой разновидности индукционного разряда, происходящего в продольном магнитном поле с индукцией 0,005 – 0,05 Тл, применяется специальная антенна, на которую подается частота 1 – 50 МГц. Сама антенна может быть различной конструкции. Поглощение этой волны в плазме путем бесстолкновительного затухания Ландау или за счет столкновений и приводят к увеличению концентрации плазмы до  $10^{13} \text{ см}^{-3}$  при давлении  $\sim 0,1$  Па.

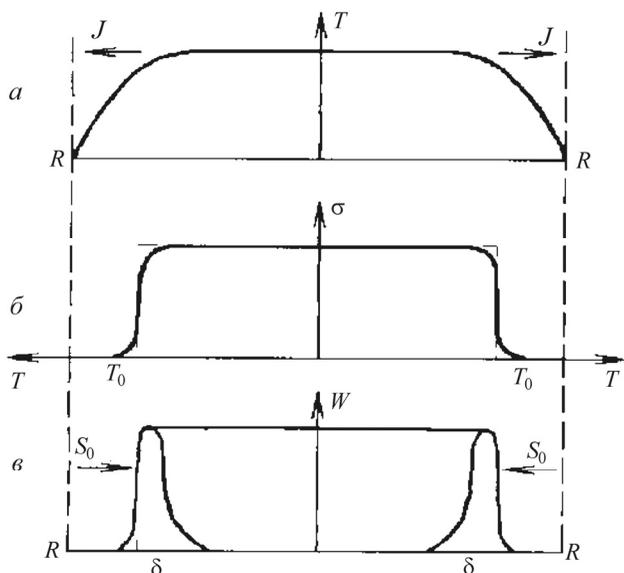


Рис. 3.70. Схематические распределения по радиусу температуры (*a*), проводимости (*б*) и джоулева тепла (*в*) в индукционном разряде; штриховая линия – замена  $\sigma(r)$  ступенькой в модели металлического цилиндра,  $J$  – тепловой поток,  $S_0$  – поток электромагнитной энергии,  $\delta$  – толщина скин-слоя

### СВЧ-разряды (микроволновые)

При высоких частотах (гигагерцы) существенны геометрические соотношения, важны преломления и отражения электромагнитной

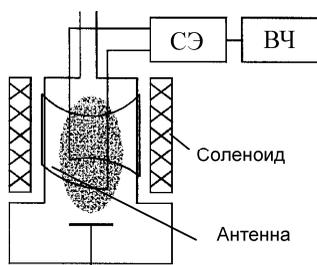


Рис. 3.71. Геликонный разряд: СЭ – согласующий элемент; ВЧ – источник ВЧ-мощности

волны. Источником СВЧ-энергии служат магнетроны. Наиболее распространенная частота СВЧ-генерации 2,45 ГГц. На этой частоте работают бытовые микроволновые (СВЧ) печи, поэтому сами используемые для них магнетроны мощностью  $\sim 1$  кВт очень дешевы. В СВЧ-плазмотронах можно ввести в плазму до 90 % СВЧ-энергии. Одна из схем СВЧ-разряда приведена на рис. 3.72. Следует отметить, что в схеме

(см. рис. 3.72) почти вся мощность поглощается в струе газа (превращающейся в плазму): внешняя поверхность столба плазмы и внутренняя поверхность волновода образуют коаксиальную линию для электромагнитной волны – энергия в столб втекает по радиусу (как в ВЧ-разряде). Интересно отметить, что механизм пробоя в СВЧ (но не ВЧ!) диапазоне похож на механизм пробоя в тлеющем разряде (образование лавин, стационарный критерий пробоя по формуле (3.43), кривые зависимости  $E = f(p)$  – аналоги кривых Пашена, сравнимость пороговых значений  $E/p$ ).

Широкое распространение получил СВЧ-разряд в магнитном поле. Поглощение энергии электромагнитной волны на частоте электронного циклотронного резонанса (ЭЦР) позволяет сравнительно легко создавать плазму в *безэлектродном ЭЦР разряде*. Так, для частоты 2,45 ГГц резонанс происходит в поле  $B = 836$  Гс. Генерация плазмы возможна при очень низком давлении газа, что позволяет применять такой разряд для прецизионного травления в микроэлектронике. Так как температура ионов очень мала, а при низких давлениях ионы имеют очень большую длину пробега, то они попадают на находящийся под отрицательным потенциалом электрод без столкновений с энергией, точно соответствующей этому потенциалу. Концентрация плазмы в ЭЦР разряде не очень велика  $\sim 10^{11} - 10^{12} \text{ см}^{-3}$ .

Отсутствие электродов в ВЧ- и СВЧ-разрядах предопределили их широкое использование в плазменных источниках заряженных частиц, например в ВЧ-плазмотронах.

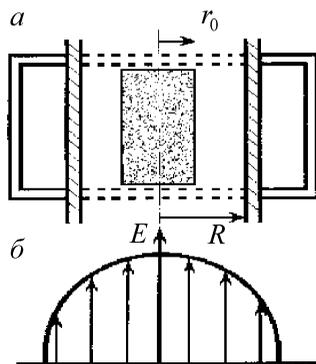


Рис. 3.72. Схема разряда в волноводе, поддерживаемого  $H_{01}$  волной: *a* – сечение волновода диаметральной плоскостью трубки, плазма затенена; *б* – распределение  $E$  вдоль широкой стенки волновода

### 3.7.6. Магнетронный разряд

Принципиальным в магнетронных системах является наличие скрещенных электрического и магнитного полей. Основными элементами устройства являются катод-мишень, анод и магнитная система.

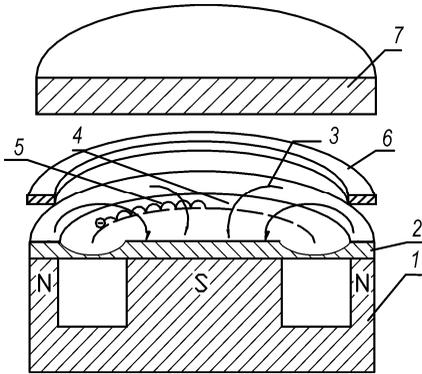


Рис. 3.73. Пример схемы магнетронной распылительной системы с постоянным магнитом: 1 – магнитная система; 2 – катод-мишень; 3 – силовая линия магнитного поля; 4 – зона наибольшей эрозии поверхности катода; 5 – траектория движения электрона; 6 – анод; 7 – подложка

В случае использования постоянного магнита силовые линии магнитного поля замыкаются между полюсами магнитной системы. Наличие замкнутого магнитного поля у расплываемой поверхности мишени позволяет локализовать плазму разряда непосредственно у мишени. Эмитированные с катода под действием ионной бомбардировки электроны (ион-электронная эмиссия) совершают движение по характерным в скрещенных  $\vec{E}$  и  $\vec{H}$  полях траекториям (циклоидам и трохоидам) у поверхности мишени. Электроны оказываются в ловушке, создаваемой, с одной стороны,

магнитным полем, возвращающим электроны на катод, а с другой стороны – поверхностью мишени, отталкивающей электроны. Электроны циркулируют в этой ловушке, совершая множество ионизирующих столкновений с атомами рабочего газа, в результате каждого из них электрон тратит полученную от электрического поля энергию на ионизацию. В силу не строгой перпендикулярности электрического и магнитного полей электроны будут постепенно дрейфовать к аноду, но большая их часть, прежде чем попасть на анод, многократно ионизируют атомы рабочего газа. Таким образом, наличие магнитного поля увеличивает эффективность процесса ионизации и приводит к росту концентрации положительных ионов у поверхности катода.

Напряжение зажигания в магнетронной системе значительно ниже, чем в обычных диодных системах. Это объясняется тем, что еще до наложения электрического поля электроны, всегда присутствующие в рабочей камере и обеспечивающие первые акты ионизации в развитии лавинного пробоя газового промежутка, захватываются магнитной ловушкой. Концентрация электронов около поверхности катода оказывается выше, чем в объеме камеры, что и способствует возникновению разряда при более низких напряжениях. Напряжение зажигания падает с ростом магнитного поля и может быть снижено до 200 В при повышении магнитного поля до 0,1 Тл. Увеличение магнитного поля позволяет также зажигать магнетронный разряд при более низких давлениях. Система может работать в диапазоне давлений от  $10^{-2}$  до 1 Па и выше. Ток разряда зависит от рабочего напряжения, давления рабочего газа, индукции магнитного поля, конфигурации магнетронной системы, распыляемого материала и определяется мощностью источника питания. При давлении  $p = 10^{-5} \div 1$  Торр и магнитном поле  $B = 300 \div 1000$  Гс вольт-амперная характеристика хорошо аппроксимируется соотношением  $I = kU^n$ , где  $I$  – ток,  $U$  – напряжение разряда, а  $k$  и  $n$  – постоянные, зависящие от конструкции разрядного устройства, рода газа, давления и величины магнитного поля. Показатель  $n > 1$  сохраняется до величин плотностей тока  $j \leq 0,3$  А/см<sup>2</sup>; напряжение при этом достигает 400 ÷ 600 В. Плотность плазмы в этих условиях составляет  $n_i \cong 10^8 \div 10^{10}$  см<sup>-3</sup> при температуре электронов до  $T_e \cong 20$  эВ. Разряд занимает на катоде узкую область, соответствующую области перпендикулярности электрического и магнитного полей. Преобладающим механизмом эмиссии электронов с катода в стационарном магнетронном разряде является, как и для тлеющего разряда, вторичная ион-электронная эмиссия. Основная ионизация происходит за счет развития электронных лавин, а условием поддержания разряда является условие Таунсенда.

*Сильноточный магнетронный разряд* (2 на рис. 3.74) реализуется с наибольшей вероятностью в диапазоне давлений  $10^{-3} \div 10^{-1}$  Торр и магнитных полей с индукцией 0,4 ÷ 1,0 кГс. Напряжение на разряде монотонно увеличивается с ростом тока до некоторого максимального значения  $U_d^{\max} \cong 500 \div 1200$  В до перехода разряда в сильноточный диффузный или дуговой режим. При

длительности импульса  $\tau$  до 20 мс токи перехода достигают 250 А, что соответствует плотности катодного тока  $j \cong 25 \text{ А/см}^2$ . Уменьшение индукции магнитного поля приводит к увеличению разрядного напряжения  $U_d^{\max}(B_{\perp})$  до некоторого критического значения  $U_d^{\text{кр}}$ , зависящего только от материала катода и рода газа. Дальнейшее уменьшение индукции магнитного поля приводит к переходу разряда в высоковольтный режим, характеризующийся крутым ростом ВАХ и малым (до 1 А) значением разрядного тока.

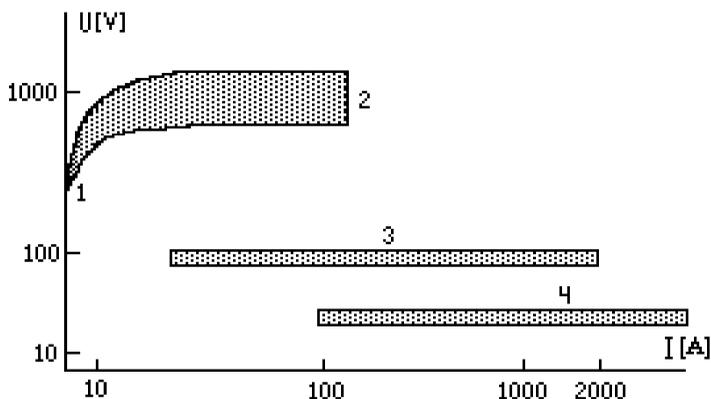


Рис. 3.74. Устойчивые формы разряда низкого давления в скрещенных  $E \times H$  полях: 1 – стационарный магнетронный разряд; 2 – сильноточный магнетронный разряд; 3 – сильноточный диффузный разряд; 4 – дуговой разряд

*Сильноточный диффузный разряд* (область 3 на рис. 3.74) формируется при токах  $10 \div 2000 \text{ А}$  и характеризуется постоянным напряжением горения  $65 \div 140 \text{ В}$ , временем существования свыше 1 мс, а также отсутствием контракции в плазме и катодном слое. Средняя плотность тока сильноточного диффузного разряда может достигать  $90 \text{ А/см}^2$ . Сильноточный диффузный разряд реализуется преимущественно в диапазоне давлений  $10^{-2} \div 5 \text{ Торр}$ , независимо от вида разрядного устройства, рода газа, материала катода. Плотность ионов может достигать  $(1,0 \div 1,5) \cdot 10^{15} \text{ см}^{-3}$ . Температура электронов составляет  $4 \div 8 \text{ эВ}$  при высокой однородности разряда и отсутствии токовых каналов.

### 3.7.7. Плазменно-пучковый и пучково-плазменный разряды

Самостоятельный плазменно-пучковый разряд (СППР) – самостоятельный разряд в сильноточном (0,1 – 10 кА) диоде низкого давления ( $p \sim 10^{-5} - 10^{-3}$  мм рт.ст.), который возникает из дугового, например при повышении давления ( $p > 10^{-3}$  мм рт.ст). Возникновение СППР проявляется в возникновении в разряде большого активного сопротивления, а именно, в отклонении от синусоидальной формы тока индуктивного разряда сильноточной вакуумной дуги  $I \sim I_0 \sin \omega t$ , где  $I_0 = V_0 / (\omega L)$ ,  $L = L_p + L_0$  – сумма индуктивности разрядного промежутка и электрической цепи. При развитии СППР рост тока замедляется, начальный участок синусоиды тока понижается, образуя плато до основного максимума, на этом плато возможно возникновение дополнительного максимума тока. Напряжение на разряде  $V_p$  в этот момент времени имеет максимум, а затем плавно уменьшается. Переход от дугового разряда к СППР происходит, когда плазма дугового разряда не в состоянии перенести весь ток, который обеспечивает источник питания. При превышении тока разряда критического значения  $I_p > I_{\text{крит}} \sim$

$$\sim en_{\min} \sqrt{\frac{2kT_e}{m_e}} \cdot S, \text{ где } n_{\min} - \text{плотность концентрации электронов в}$$

области минимума плотности плазмы;  $T_e$  – температура электронов плазмы;  $S$  – сечение токового канала, в плазме образуется динамический двойной слой объемного заряда, на котором сосредотачивается практически все приложенное к диоду напряжение

$$V_{\text{сл}} \sim V_p. \text{ Ток разряда становится равным } I_p = \frac{1,86}{9\pi} \sqrt{\frac{2e}{m_e}} \frac{V_p^{3/2}}{l_{\text{сл}}^2}, \text{ где}$$

$l_{\text{сл}}$  – толщина двойного слоя. В электрическом поле двойного слоя  $E_{\text{сл}} \sim V_{\text{сл}} / l_{\text{сл}}$ , толщина которого, как правило, много меньше длины диодного промежутка, происходит встречное ускорение пучков электронов и ионов. Подобно дуговому разряду СППР формируется в условиях возникновения эмиссии с холодного катода катод-

ными пятнами, но отличается от дуговых процессами переноса тока и способом нагрева плазмы, обеспечивающим баланс нужного числа носителей. Перенос разрядного тока пучками заряженных частиц и нагрев электронов плазмы до энергий, достаточных для ионизации газа, происходит за счет коллективного пучково-плазменного взаимодействия. СППР – самостоятельный разряд, так как необходимое для разряда число носителей поддерживается исключительно за счет поданного на электроды напряжения. Различают два характерных типа СППР: К-разряд и М-разряд, которые отличаются как пространственной локализацией двойного слоя, так и условиями возникновения и динамикой поддержания. При К-разряде минимум концентрации плазмы и, соответственно, двойной слой локализован в прикатодной области диода между плотной плазмой катодных пятен ( $10^{15} - 10^{17} \text{ см}^{-3}$ ) и плазмой диода ( $10^{12} - 10^{13} \text{ см}^{-3}$ ). Формируемый в двойном слое мощный электронный пучок пронизывает весь разрядный промежуток. В случае М-разряда двойной слой расположен между электродами и его локализация определяется областью с минимумом концентрации плазмы. При этом основной ток разряда переносится пучком электронов только на участке двойной слой – анод. Меняя область минимума концентрации плазмы, можно управлять местоположением слоя, а следовательно, и местоположением зоны генерации интенсивных пучков заряженных частиц.

СППР применяется для генерации интенсивных пучков электронов и ионов. Для этого диодный промежуток, как правило, помещают в продольное однородное магнитное поле катушек. Генерируемый в двойном слое пучок электронов за счет ионизации создает плазму, которая удерживается в магнитном поле. Номинальный ток в магнитных катушках таких устройств порядка 200 А, что соответствует величине магнитного поля порядка 600 Гс. При токе пучка порядка 1 А энергия электронов пучка – 3–4 кэВ. В СППР есть условия, когда существует группа горячих электронов с энергиями порядка десятков и даже сотен килоэлектрон-вольт, что значительно больше энергии пучка. Высокоэнергетичные электроны, нагретые пучково-плазменными колебаниями, при кулоновском рассеивании и в столкновении со стенками производят рентгеновские кванты. Поэтому СППР может быть использован как генератор интенсивного рентгеновского излучения. В этом случае более

предпочтительной является локализация двойного слоя непосредственно у поверхности анода-мишени, что исключает потери энергии электронного пучка на взаимодействие с плазмой. При этом создание градиента концентрации плазмы с минимумом у анода в сильноточных импульсных плазменных диодах возможно как за счет градиента концентрации первичной плазмы, которой предварительно заполняется диодный промежуток, так и за счет градиента давления нейтрального газа вдоль разрядной трубки. Следует отметить, что формирование постоянного градиента давления предполагает, как правило, наличие мощных средств откачки, что в различных практических приложениях зачастую затруднено. Для автономных систем необходимы очень быстрый импульсный напуск рабочего газа с катодной стороны плазменного диода (чтобы кратковременно создать необходимый градиент давления) и интенсивная откачка отработанного газа после гашения разряда.

### *Пучково-плазменный разряд*

*Пучково-плазменный разряд* (ППР) в магнитном поле обладает следующими особенностями:

- сильно неравновесная (энергия электронов плазмы значительно превышает энергию тяжелых частиц ионов, атомов, молекул) низкотемпературная ( $< 10$  эВ) плазма высокой плотности ( $10^{10} - 10^{13}$  см<sup>-3</sup>);
- широкий диапазон степени ионизации рабочего вещества – от полной ионизации ( $\alpha = 1$ ) до слабо ионизованной плазмы ( $\alpha = 10^{-5}$ );
- высокие значения потоков тяжелых частиц (ионов и атомов)  $10^{16} - 10^{19}$  см<sup>-2</sup>с<sup>-1</sup>;
- возможность получения стационарной плазмы с высокой энергонапряженностью (до  $0,5$  Вт/см<sup>-3</sup>) в большом объеме (несколько десятков литров).

Для технологических применений важное значение имеют связанные с этими свойствами новые возможности, а именно:

- имеется возможность получать плазму для разных рабочих веществ (в газах и парах металлов), например, в воздухе, азоте, кислороде, водороде, метане, углекислом газе, фреоне, аргоне, литии, кальции и др.;

- плазменной обработке могут подвергаться весьма большие поверхности (диаметром до 0,5 м и длиной до 2 м);
- при проведении процесса получается плазма высокой чистоты с крайне малым содержанием примесей.

Указанные особенности позволяют предлагать пучково-плазменный разряд для разработки новых ионных источников с высокими значениями ионного тока для различных применений.

Кроме технологического использования ППР применяется для исследования ионо- и магнитосферной плазмы (электронные пучки инжектируются на высотах  $90 \div 150$  км), так же как эффективный генератор СВЧ и рентгеновского излучения.

В лабораторных условиях пучково-плазменный разряд возникает при прохождении пучка электронов диаметром 1 – 5 см с энергией 0,1 – 10 кэВ, током  $10^{-1} - 10$  А через плазмообразующий газ (например, Н, He, N<sub>2</sub>, Ar) в вакуумной камере (при давлении в пределах  $10^{-5} - 10^{-1}$  мм рт.ст.), помещенной в однородном магнитном поле (напряженностью  $10 - 10^4$  Э). Пример разработанного на кафедре физики плазмы МИФИ встраиваемого плазменно-пучкового генератора для создания потоков плазмы показан на рис. 3.75.

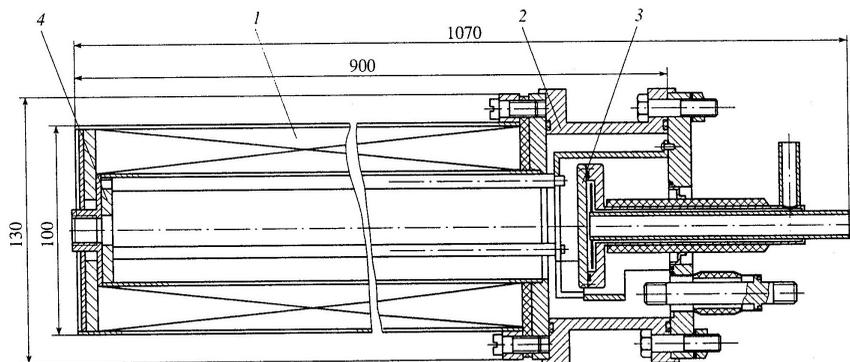


Рис. 3.75. Малогабаритный плазма-пучковый генератор: 1 – охлаждаемый соленоид; 2 – катодный узел; 3 – алюминиевый катод; 4 – антикатод

Возникновение ППР прежде всего происходит вследствие развития пучковой неустойчивости, в результате чего происходит возбуждение электронным пучком колебаний и волн в плазме. Поддержание ППР в магнитном поле обусловлено ионизацией газа

плазменными электронами, ускоренными в поле высокочастотных колебаний (СВЧ) колебаний, возбуждаемых электронным пучком в плазме. То, что электронный пучок в ППР имеет сильно "размытую" функцию распределения электронов по продольным скоростям с наличием электронов, имеющих энергию большую энергии инжекции, отмечалось уже в первых экспериментах. В настоящее время известно, что часть электронов плазмы (до 10 %) ускоряется в ППР до энергий на порядок превышающих энергию электронного пучка. Экспериментально было обнаружено, что большая часть ускоренных электронов движется навстречу пучку. Область локализации высокоэнергетичных электронов привязана к максимальной амплитуде возбуждаемых колебаний. Таким образом, плазма ППР в области взаимодействия является генератором потоков заряженных частиц. Максимум СВЧ-колебаний лежит в области, прилежащей ко входу, через который подается электронный пучок, входит в область взаимодействия. В этой же области регистрируется и рентгеновское излучение из плазмы. Это дает основание предположить, что электроны испытывают сильное рассеяние на возбуждаемых СВЧ-полях в плазме, совершая при этом сложные движения, в результате чего их реальный пробег между соударениями оказывается большим. К тому же, существование стационарно пространственно выделенной области рентгеновского излучения обусловлено торможением на нейтральных атомах плазмообразующего газа, указывает на наличие "длительного" удержания электронов в выделенном пространстве.

Одной из особенностей ППР при выходе в "установившийся" режим "горения" является смена знака тока, принимаемого коллектором электронного пучка, т.е. токоприемный коллектор принимает незакомпенсированный поток ионов. Причем при удалении от коллектора зонд фиксирует положительный ток. На некотором расстоянии от коллектора на зонде появляется отрицательный ток. Существование локальной области, из которой ускоренные электроны и ионы движутся в противоположном направлении, может свидетельствовать и о формировании двойного слоя.

Основной максимум СВЧ-колебаний соответствует резонансной частоте, равной электронно-плазменной частоте ( $\omega_{p1} = \omega_{pe}$ ). Дополнительный максимум соответствует частоте в два раза больше, чем электронно-циклотронная частоте ( $\omega_{p2} = 2\omega_{He}$ ). Электроны плазмы

в поле СВЧ-волн этих резонансных частот приобретают энергию и ионизуют газ. Между параметрами плазмы (температура и плотность электронов) и амплитудой СВЧ-колебаний наблюдается корреляция. При возбуждении колебаний с первой резонансной частотой  $\omega_{p1} = \omega_{pe}$  отмечается максимальное значение температуры электронов. Максимальному значению плотности и минимальному значению температуры электронов плазмы соответствует вторая резонансная частота  $\omega_{p2} = 2\omega_{He}$ . При увеличении плотности плазмы происходит отстройка от резонанса  $\omega_{p2} = 2\omega_{He}$ . Электроны перестают набирать энергию. Плазма из локализованной области существования ускоренных электронов вытекает к коллектору. Понижение плотности плазмы восстанавливает резонанс, а вместе с этим восстанавливаются и условия для ускорения электронов плазмы. После чего становится возможной доионизация газа электронами, сопровождающаяся ростом плотности плазмы в ППР. В условиях неоднородной плазмы возбуждаемые электронно-плазменные моды СВЧ-колебаний вызывают возбуждение низкочастотных (НЧ) ионных колебаний, роль этого процесса для поддержания разряда является определяющей. Резонанс разрушается при возрастании плотности плазмы с возбуждением НЧ-колебаний (ионный звук).

Основной вклад в ионизацию газа дают электроны, ускоренные в области пространства, где сконцентрирована энергия СВЧ-волн. Плазма вытекает из этой области со скоростью ионно-звуковых волн. Неоднородность плазмы и нелинейное взаимодействие СВЧ- и НЧ-волн, возбуждаемых пучком, усиливает НЧ-колебания, включая дрейфовые волны. Они обеспечивают аномальную диффузию плазмы поперек магнитного поля. В результате этого плазма занимает объем радиусом много большим радиуса пучка. Максимальная температура электронов плазмы достигается в условиях возбуждения максимальной амплитуды НЧ-колебаний. При этом СВЧ- и НЧ-колебания становятся нерегулярными. В результате этого электроны в поле ускоряющей волны имеют большую эффективную частоту соударений. СВЧ-колебания отдают большую часть своей энергии низкочастотным. В стохастических НЧ-полях ускоряются и ионы плазмы. Управление спектром НЧ-колебаний позволяет, как это следует из экспериментов, регулировать передачу энергии от пучка к ионам плазмы.

### 3.7.8. Разряды с термокатодом

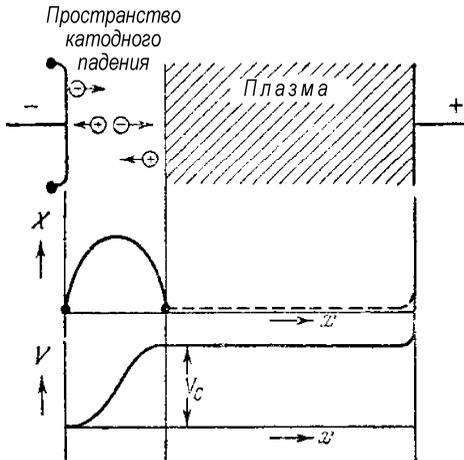


Рис. 3.76. Дуговой разряд с накаливаемым катодом, зависимости напряженности поля  $X$  и потенциала пространственного заряда  $V$  вблизи поверхности термокатада

Использование накаливаемого термокатада позволяет получать ионы как в результате прямой ионизации электронами, ускоренными в промежутке между катодом и анодом, атомов или молекул газа при любой сколь угодно малой их концентрации, когда плазма не образуется, так и при повышенном давлении газа. В первом случае говорят об источниках ионов с электронным ударом, применяемым в основном в масс-спектрометрии, когда вероятность образования

иона прямо пропорциональна концентрации газа. Во втором случае речь может идти об разрядах низкого давления или о дуговых разрядах низкого давления ( $P \sim 0,1 - 1 \text{ Па}$ ) с накаливаемым катодом. Распределение потенциала и напряженности поля для разрядов с накаливаемым катодом показано на рис. 3.76.

Так как для существования разряда вторичная эмиссия электронов из катода под действием ускоряемых к нему ионов не обязательна, то напряженность электрического поля у катода, как и на границе плазмы, может быть равной нулю. Ширина промежутка между катодом и плазмой определяется длиной свободного пробега электрона. Плотность тока электронов и ионов в нем определяется законом Чайлда – Ленгмюра (3.19) (см. разд. 3.5), при соотношении плотности электронного тока  $j_e$  к плотности тока ионов  $j^+$

$$j_e/j^+ = (M_i/m_e)^{1/2}.$$

При недостатке термоэлектронов (недокале катода) вольт-амперная характеристика разряда – растущая: с увеличением раз-

рядного напряжения ток разряда растет. При достаточной температуре катода, когда плотность тока термоэмиссии выше плотности разрядного тока и достаточной концентрации нейтрального газа попытка увеличения напряжения на разряде приводит к росту разрядного тока без изменения напряжения на нем. Напряжение на разряде, как в дуге, может составлять несколько десятков вольт, однако для его зажигания необходимо приложить намного большее (в 2–3 раза) напряжение. Если термокатод представляет собой вольфрамовую или танталовую проволоку, то по мере бомбардировки ионами она утоньшается за счет распыления. При этом сопротивление катода увеличивается, а ток через него уменьшается. Таким образом при постоянном напряжении на катоде обеспечивается примерно постоянная его температура.

Плазменные источники ионов с накаливаемыми катодами могут реализовываться в различных вариантах, в том числе с продольным (по отношению к направлению извлечения ионов) и поперечным магнитным полем (калутрон).

Все описанные разряды могут служить источниками заряженных частиц: как ионов, так и электронов. Вид используемого в источнике разряда зависит от направленности той или иной пучковой технологии. Разработано множество различных типов плазменных источников ионов. Однако для получения интенсивных ионных пучков эффективно можно использовать лишь некоторые из них.

## 3.8. Плазменные ускорители

### 3.8.1. МГД-приближение

Для описания ускорения плазмы магнитным полем воспользуемся МГД-приближением. Теорию МГД-метода разработал Альфвен в 1942 г. для описания динамики космической плазмы. А основной вклад в разработку плазменных ускорителей внес А.И. Морозов. Плазма рассматривается как проводящая жидкость. Основное приближение – это введение  $n_\alpha(t, \vec{r})$ ,  $V_\alpha(t, \vec{r})$ :

$$n_\alpha = \int f_\alpha d^3V; \quad \vec{V}_\alpha = \frac{1}{n_\alpha} \int \vec{V} f_\alpha d^3V.$$

Система МГД-уравнений состоит из уравнения непрерывности, уравнения движения, уравнения состояния для каждой компоненты плазмы и четырех уравнений Максвелла:

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{dn_{\alpha}}{dt} + \operatorname{div} n_{\alpha} \vec{V}_{\alpha} = 0 \text{ – уравнение непрерывности;} \\ m_{\alpha} n_{\alpha} \frac{dn_{\alpha}}{dt} = -\nabla p_{\alpha} + Z_{\alpha} e n_{\alpha} \left( \vec{E} + \frac{1}{c} \vec{V}_{\alpha} \times \vec{B} \right) + \vec{F}_{\text{тр}}; \\ p_{\alpha} = nkT_{\alpha}; \\ \operatorname{div} \vec{E} = 4\pi e \left( \sum_{\alpha \neq l} Z_{\alpha} n_{i\alpha} - n_l \right); \\ \operatorname{rot} \vec{E} = -\frac{1}{c} \frac{\partial \vec{B}}{\partial t}; \\ \operatorname{div} \vec{B} = 0; \\ \operatorname{rot} \vec{B} = \frac{4\pi}{c} \vec{j} = \frac{4\pi}{c} e \left( \sum_{\alpha \neq l} Z_{\alpha} n_{i\alpha} \vec{V}_{i\alpha} - n_l \vec{V}_l \right). \end{array} \right. \quad (3.53)$$

В данной системе температура компоненты плазмы выступает как внешний параметр. Если к этой системе добавить уравнение для расчета температуры, обычно это уравнение теплового баланса, то система становится замкнутой и для ее расчета необходимы только начальные и граничные условия. Уравнение теплового баланса для каждой конкретной задачи имеет свой специальный вид. Например, для плазмы пинча или дугового разряда оно состоит в том, что омические потери идут на излучение плазмы как черного тела:  $R(T) \cdot I^2 = \sigma_{\text{ст}} T^4$ , где  $R(T)$  – сопротивление плазмы, зависящее от температуры (можно взять спитцеровскую температурную зависимость проводимости).

### 3.8.2. Одножидкостная модель

В одножидкостной модели считается, что ионы и электроны движутся с одинаковой скоростью как целое. Для достаточно плотной плазмы это оправдано эффектом амбиполярности, более под-

вижные электроны не могут далеко убежать от ионов из-за возникновения сильных электрических полей. Вводится:

$$\text{массовая плотность } \rho = \sum_{\alpha} n_{\alpha} m_{\alpha};$$

$$\text{массовая скорость } \vec{V} = \frac{1}{\rho} \sum_{\alpha} n_{\alpha} \vec{V}_{\alpha} m_{\alpha};$$

$$\text{давление как сумма парциальных давлений } p = \sum_{\alpha} p_{\alpha}.$$

Суммируя уравнения непрерывности для электронов и ионов, получим массовое уравнение непрерывности или закон сохранения масс:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \operatorname{div} \rho \vec{v} = 0.$$

Суммируя уравнения движения для электронов и ионов в пренебрежении сил трения  $F_{\text{тр}} = 0$ , получим уравнение движения для плазмы:

$$\rho \frac{d\vec{v}}{dt} = -\nabla p + \frac{1}{c} \vec{j} \times \vec{B}.$$

В правой части этого уравнения нет электрической силы, так как  $\sum_{\alpha \neq e} Z_{\alpha} n_{\alpha} = n_e$ .

Первое слагаемое правой части уравнения указывает на градиент газокINETического давления как на одну из причин движения плазмы (гидродинамика). Можно показать, что второе слагаемое соот-

ветствует магнитному давлению  $p_{\text{маг}} = \frac{B^2}{8\pi}$  (магнитная динамика).

Тогда

$$\begin{cases} \frac{\partial \rho}{\partial t} + \operatorname{div} \rho \vec{v} = 0; \\ \rho \frac{d\vec{v}}{dt} = -\nabla p + \frac{1}{c} \vec{j} \times \vec{B}; \\ p = nkT. \end{cases} \quad (3.54)$$

Возьмем последние три уравнения Максвелла:

$$\begin{cases} \operatorname{rot} \vec{E} = -\frac{1}{c} \frac{\partial \vec{B}}{\partial t}; \\ \operatorname{div} \vec{B} = 0; \\ \operatorname{rot} \vec{B} = \frac{4\pi}{c} \vec{j}, \end{cases}$$

и закон Ома:  $\vec{j} = \sigma \vec{E}_{\text{эф}} = \sigma \left( \vec{E} + \frac{1}{c} \vec{V} \times \vec{B} \right)$ .

К последнему уравнению системы применим операцию  $\operatorname{rot}$ :

$$\begin{aligned} \operatorname{rot} \cdot \operatorname{rot} \vec{B} &= \operatorname{rot} \frac{4\pi}{c} \vec{j}; \\ [\vec{a} \times [\vec{b} \times \vec{c}]] &= \vec{b} (\vec{a} \vec{c}) - \vec{c} (\vec{a} \vec{b}); \\ \vec{\nabla} \times [\vec{\nabla} \times \vec{B}] &= \vec{\nabla} (\vec{\nabla} \vec{B}) - \nabla^2 \vec{B} = \underbrace{\operatorname{grad} \cdot \operatorname{div} \vec{B} - \nabla^2 \vec{B}}_{=0} = \\ &= \frac{4\pi}{c} \sigma \left( \underbrace{\operatorname{rot} \vec{E}}_{=-\frac{1}{c} \frac{\partial \vec{B}}{\partial t}} + \operatorname{rot} \left( \frac{1}{c} \vec{V} \times \vec{B} \right) \right); \\ \frac{\partial \vec{B}}{\partial t} &= \operatorname{rot} [\vec{V} \times \vec{B}] + \frac{c^2}{4\pi\sigma} \Delta \vec{B}. \end{aligned}$$

Если плазма покоится, то  $V = 0$ .

$$\frac{\partial \vec{B}}{\partial t} = \frac{c^2}{4\pi\sigma} \Delta \vec{B} - \text{уравнение диффузии магнитного поля.}$$

При  $\sigma = \infty$   $\frac{\partial \vec{B}}{\partial t} = \operatorname{rot} [\vec{V} \times \vec{B}]$  – уравнение «вмороженности» магнитного поля. Уравнение диффузии магнитного поля имеет вид:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \vec{B}}{\partial t} &= D_{\text{мар}} \left( \frac{\partial^2 \vec{B}}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \vec{B}}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \vec{B}}{\partial z^2} \right); \\ \frac{c^2}{4\pi\sigma} &= D_{\text{мар}} = \frac{\delta_S^2}{\tau_S}; \end{aligned} \quad (3.55)$$

$$\delta_S = \sqrt{D_{\text{мар}} \tau_S} = \sqrt{\frac{c^2}{4\pi\sigma}} \tau_S - \text{глубина скин-слоя.}$$

При  $\sigma \rightarrow \infty$   $\delta_s \rightarrow 0$ , т.е. магнитное поле не проникает в идеальный проводник. Движение плазмы в одножидкостном приближении описывается уравнением:

$$\rho \frac{d\vec{V}}{dt} = \frac{1}{c} \vec{j} \times \vec{B} - \nabla p.$$

Выясним природу силы Лоренца  $\frac{1}{c} \vec{j} \times \vec{B}$ . Для этого вспомним тождество анализа:

$$\begin{aligned} \text{grad}(\vec{a} \cdot \vec{b}) &= \nabla(\vec{a} \cdot \vec{b}) = \nabla \left( \overset{\downarrow}{\vec{a}} \cdot \vec{b} \right) + \nabla \left( \vec{a} \cdot \overset{\downarrow}{\vec{b}} \right) = \\ &= (\vec{a} \cdot \nabla) \vec{b} + (\vec{b} \cdot \nabla) \vec{a} + \vec{a} \times (\nabla \times \vec{b}) + \vec{b} \times (\nabla \times \vec{a}) = \\ &= (\vec{a} \cdot \text{grad}) \vec{b} + (\vec{b} \cdot \text{grad}) \vec{a} + \vec{a} \times \text{rot} \vec{b} + \vec{b} \times \text{rot} \vec{a}; \end{aligned}$$

$$\left( \begin{aligned} [\vec{a} \times [\vec{b} \times \vec{c}]] &= \vec{b}(\vec{a} \cdot \vec{c}) - \vec{c}(\vec{a} \cdot \vec{b}) \\ \vec{b}(\vec{a} \cdot \vec{c}) &= \vec{b}(\vec{a} \cdot \vec{c}) + [\vec{a} \times [\vec{b} \times \vec{c}]] \\ \nabla(\vec{a} \cdot \vec{b}) &= (\vec{a} \cdot \nabla) \vec{b} + \vec{a} \times [\nabla \times \vec{b}] \end{aligned} \right);$$

$$\frac{1}{c} \vec{j} \times \vec{B} = \frac{1}{4\pi} \text{rot} \vec{B} \times \vec{B} =$$

$$= \frac{1}{4\pi} \left( -\frac{1}{2} \text{grad}(\vec{B} \cdot \vec{B}) + (\vec{B} \cdot \text{grad}) \vec{B} \right) = -\nabla \frac{B^2}{8\pi} + \frac{1}{4\pi} (\vec{B} \cdot \nabla) \vec{B} = -\nabla p_{\text{маг}},$$

где  $p_{\text{маг}} = \begin{pmatrix} \frac{B^2}{8\pi} & 0 & 0 \\ 0 & \frac{B^2}{8\pi} & 0 \\ 0 & 0 & -\frac{B^2}{8\pi} \end{pmatrix}$  — тензор магнитного давления;

$p_{\text{маг}} = \frac{B^2}{8\pi}$  — магнитное давление, оно является одновременно

плотностью магнитной энергии размерности  $\left[ \frac{\text{эрг}}{\text{см}^3} \right]$ , если  $B = [\text{Гс}]$ .

В поперечном направлении силовые линии расталкиваются, а в продольном силовые линии натянуты, т.е. стремятся сжаться. Покажем, что последнее слагаемое в силе Лоренца соответствует натяжению магнитных силовых линий, т.е. связано с кривизной силовых линий:

$$\begin{aligned} \frac{1}{4\pi} (\vec{B} \cdot \nabla) \vec{B} \Big|_{\vec{B}=B\vec{\tau}} &= \frac{1}{4\pi} (B^2 (\vec{\tau} \nabla) \vec{\tau} + B \vec{\tau} (\vec{\tau} \nabla B)) = \\ &= \frac{1}{4\pi} \frac{B^2}{R_{\text{кр}}} \vec{n} + \frac{B \vec{\tau}}{4\pi} (\vec{\tau} \nabla B); \\ (\vec{\tau} \nabla) \vec{\tau} &= \frac{\vec{n}}{R_{\text{кр}}}; \quad \nabla \vec{\tau} = \lim_{\Delta S \rightarrow 0} \frac{\Delta \vec{\tau}}{\Delta S} = \lim_{\Delta S \rightarrow 0} \frac{\Delta \alpha \cdot \vec{n}}{R_{\text{кр}} \Delta \alpha} = \frac{\vec{n}}{R_{\text{кр}}}. \end{aligned}$$

Если обозначить  $\nabla_{\perp} = \nabla - \vec{\tau} (\vec{\tau} \nabla)$ , то

$$\frac{1}{c} \vec{j} \times \vec{B} = -\nabla_{\perp} \left( \frac{B^2}{8\pi} \right) + \frac{B^2}{4\pi R_{\text{кр}}} \vec{n}.$$

Таким образом, сила Лоренца – сила магнитного давления в поперечном к магнитному полю направлении.

В вакууме, где  $\vec{j} = 0$ ,  $\frac{\nabla_{\perp} B}{B} = \frac{\vec{n}}{R_{\text{кр}}}$ . Это соотношение означает,

что топология магнитного поля в вакууме соответствует уравновешиванию поперечного магнитного давления натяжением силовых линий.

В плазме существует газокINETическое давление частиц плазмы.

Отношение  $B = \frac{p}{p_M} = \frac{8\pi p}{B^2}$  называется параметром  $\beta$ . Если  $\beta > 1$ , то

плазма считается высокого давления, если  $\beta < 1$  – низкого.

### 3.8.3. Равновесие плазменной границы

Вновь вернемся к уравнению движения плазмы как жидко-

сти:  $\rho \frac{d\vec{V}}{dt} = \frac{1}{c} \vec{j} \times \vec{B} - \nabla p$ . Если плазма стационарна, то

$\vec{V} = 0 \Rightarrow \frac{1}{c} \vec{j} \times \vec{B} = \nabla p$  – это условие равновесия плазмы, из которого следует, что вектора  $\vec{j}$  и  $\vec{B}$  лежат на поверхности  $p = \text{const}$ , т.е. магнитные поверхности в плазме являются *изобарическими*. Если магнитное поле однородно, то  $\frac{1}{c} \vec{j} \times \vec{B}_z = -\nabla_{\perp} \frac{B_z^2}{8\pi}$ , т.е. газокINETИЧЕСКОЕ ДАВЛЕНИЕ УРАВНИВАЕТСЯ МАГНИТНЫМ:  $\nabla p = -\nabla_{\perp} \frac{B_z^2}{8\pi}$ . Или можно записать:  $\nabla p + \nabla_{\perp} \frac{B_z^2}{8\pi} = 0 \Rightarrow \nabla \left( p + \frac{B_z^2}{8\pi} \right) = 0 \Rightarrow p + \frac{B_z^2}{8\pi} = \text{const}$ .

Если учесть, что вне плазмы  $B_z = B_0$ , то можно написать соотношение:  $p + \frac{B_z^2}{8\pi} = \frac{B_0^2}{8\pi}$ , т.е. магнитное поле в плазме ослабляется, плазма выталкивает магнитное поле как диэлектрик. Таким образом, магнитное поле в плазме зависит от давления плазмы и меняется так, чтобы оставалась постоянной величина  $p + \frac{B_z^2}{8\pi} = \text{const}$ .

### 3.8.4. Рельсотрон

В одномерном случае плазменный ускоритель имеет вид рельсотрона (рис. 3.77).

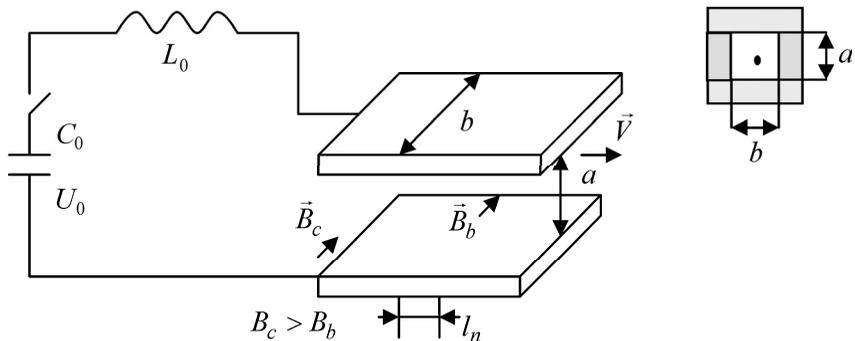


Рис. 3.77. Рельсотрон

Полная индуктивность системы:  $L = L_0 + L_x x$ , где  $L_x$  – погонная индуктивность, Гн/м. Подводимая в канал плотность мощности:

$$p = \frac{d\varepsilon}{dt} = \frac{\partial}{\partial t} \left( \frac{H^2}{8\pi} \right) + v \frac{\partial}{\partial x} \left( \frac{H^2}{8\pi} \right) + \underbrace{E \cdot j}_{\frac{j^2}{\sigma}}$$

чим мощность:

$$P = U_{\Pi} \cdot I = \frac{\partial}{\partial t} \left( \frac{H^2}{8\pi} \right) V + \frac{\partial}{\partial x} \left( \frac{H^2}{8\pi} \right) V \cdot v + R_{\Pi} I^2.$$

Закон сохранения энергии:

$$W = \frac{C_0 U_0^2}{2} = \frac{C_0 U^2}{2} + \frac{L_0 I^2}{2} + \frac{L_x x I^2}{2} + \frac{mv^2}{2} + \int_0^t R_{\Pi} I^2 dt.$$

Подводимая к каналу мощность:

$$P = U_{\Pi} \cdot I = L_x x \dot{I} + \frac{1}{2} L_x v I^2 + \dot{\varepsilon}_k + \dot{\varepsilon}_R.$$

Сопоставив, получаем, что мощность, расходуемая на перемещение плазменного поршня:

$$P_v = \frac{1}{2} L_x v I^2 = Fv \Rightarrow F = \frac{1}{2} L_x I^2 - \text{ускоряющая сила.}$$

Тогда систему уравнений, описывающая данную модель, можно представить в виде:

$$\left\{ \begin{array}{l} \dot{x} = v; \\ \dot{v} = \frac{1}{2m_p} L_x I^2; \\ \dot{U} = -\frac{1}{c_0} I; \\ U = (L_0 + L_x \cdot x) \dot{I} + I(R + L_x \cdot v); \\ P = \frac{1}{2} \frac{L_x \cdot I^2}{a \cdot b}; \\ R_p = \frac{a}{\sigma_p \cdot b \cdot l_p}; \\ n = \frac{P}{kT(1 + \gamma_p)}; \\ R_p I^2 = \sigma_{St} \cdot T^4 \cdot 2(a \cdot b + b \cdot l_p + a \cdot l_p), \end{array} \right.$$

где  $a$ ,  $b$ ,  $l_p$  – высота, длина, ширина поршня (рис. 3.78);  $\sigma_p$  – проводимость плазмы, определяемая, например, по формуле Спитцера;  $\gamma_p$  – степень ионизации плазмы, определяемая уравнением Саха.

Последнее уравнение системы задает тепловой баланс в предположении, что все омически выделяемое в плазме тепло идет на излучение плазмы как излучение черного тела. Система замкнута. Точность расчета определяется сохранением энергии:

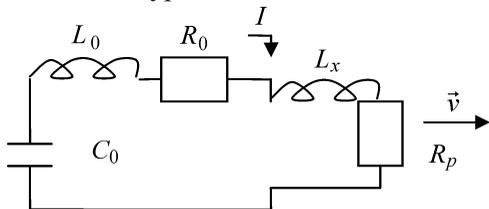


Рис. 3.78. Схема электрической цепи плазменного ускорителя

$$W_0 = \frac{c_0 U_0^2}{2} = \frac{c_0 U^2}{2} + \frac{L_0 I^2}{2} + \frac{L_x x I^2}{2} + \frac{mv^2}{2} + \int_0^t RI^2 dt = \text{const}.$$

Пучки плазмы, формируемые плазменными ускорителями, нашли широкое распространение в качестве движителей космических аппаратов. Как правило, это импульсные устройства, работающие на тяжелых газах (аргон, ксенон). Они подробно описаны в специальных изданиях, в том числе и в учебных пособиях [15].

Рассмотрим теперь плазменный ускоритель, используемый в исследованиях по взаимодействию плазмы с материалами термоядерных установок. С помощью этого ускорителя создаются пучки импульсной плазмы с параметрами, близкими к тем, которые имеют место при срывах плазмы в токамаках или при взаимодействии с обращенными к плазме элементами установок так называемых ЭЛМах первого рода (ELM – edge localized modes). Эти локализованные на периферии плазмы моды наблюдаются в режимах с улучшенным удержанием плазмы и периодически выносят на стенку за короткое время порядка сотни микросекунд несколько мегаджоулей энергии. Плотности мощности  $\sim 1$  МДж/м<sup>2</sup> оказывается достаточной для оплавления материалов. Квазистационарный плазменный ускоритель (КСПУ), в свое время созданный в Троицком институте термоядерных и инновационных исследований (ТРИНИТИ), оказался наилучшей имитационной установкой для такого рода испытаний и сейчас интенсивно используется для прогнозирования поведения материалов термоядерного реактора

ИТЭР. Схема КСПУ приведена на рис. 3.79, а внешний вид на рис. 3.80.

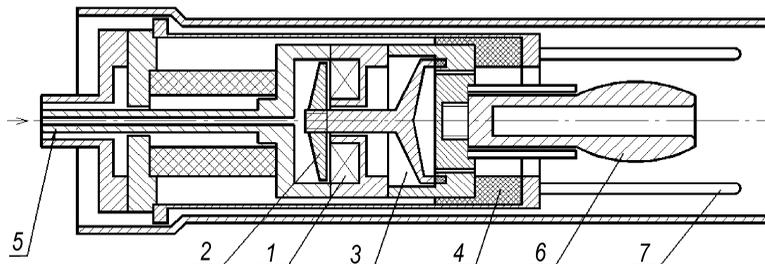


Рис. 3.79. Принципиальная схема плазменного ускорителя КСПУ: 1 – катушка импульсного газового клапана; 2 – тарелка клапана; 3 – объем над клапаном; 4 – изолятор; 5 – подача газа; 6 – катод; 7 – анод

Параметры генерируемых на этом ускорителе потоков плазмы приведены ниже.

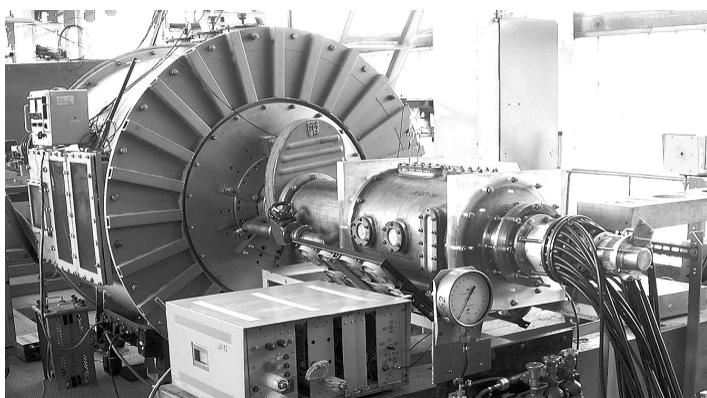


Рис. 3.80. Внешний вид импульсного плазменного ускорителя КСПУ

#### *Параметры пучка плазмы КСПУ*

- Длительность импульса  $\Delta t = 0,1 \div 0,6$  мс
- Скорость потока плазмы  $v = (1 \div 3) 10^5$  м/с
- Плотность плазмы  $n = 10^{22} \div 10^{23}$  м<sup>-3</sup>
- Диаметр потока  $d = 5$  см
- Направленная энергия ионов  $E_i = 0,1 \div 0,5$  кэВ
- Тепловые нагрузки  $Q = 0,2 \div 2,5$  МДж/м<sup>2</sup>

### 3.9. Основные характеристики стационарных плазменных источников ионов

В плазменных источниках ионы эмитируются с поверхности газоразрядной плазмы, а ионный пучок формируется с помощью ионно-оптической системы (ИОС).

Основные параметры ионных источников, позволяющие их сравнивать и отбирать для той или иной задачи, следующие.

1. *Полный ток ионного пучка  $I$* . Для однозарядных ионов 1 А соответствует  $6,25 \cdot 10^{18}$  част./с.

2. *Энергия ионов пучка  $E$*  – средняя энергия направленного движения ускоренных частиц, измеряемая в электрон-вольтах (эВ), она численно равна в случае однозарядных ионов ускоряющему напряжению  $V$  (в вольтах).

3. *Газовая эффективность*, она является одним из важнейших параметров ионных источников, так как от нее сильно зависит необходимая скорость откачки вакуумной системы. Под газовой эффективностью понимают отношение потока частиц газа в виде ускоренных ионов  $\Gamma_i$  к напускаемому в источник потоку газа  $\Gamma_0$ . Если поток газа выразить через принятые в вакуумной технике единицы  $Q = pS = \Gamma kT$ , где  $p$  – давление газа;  $S$  – скорость откачки, а ток в амперах, то при комнатной температуре подачи газа  $T = 300$  К газовая эффективность источника положительных однозарядных ионов может быть выражена следующим образом:

$$\eta = \frac{\Gamma^+}{\Gamma_0} = \frac{0,026 \cdot I(\text{А})}{Q(\text{Па} \cdot \text{м}^3)} \cdot \beta.$$

Здесь  $\beta$  – степень диссоциации молекул, если источник работает на двухатомном газе. Напомним, что постоянная Больцмана  $k = 1,387 \cdot 10^{-23}$  Па  $\cdot$  м<sup>3</sup>  $\cdot$  К<sup>-1</sup>.

4. *Энергетическая эффективность источника*, она определяется отношением мощности пучка  $W_b = I \cdot V$  к полной мощности, затрачиваемой на его создание  $W_{\text{power}}$  (мощность питания катода, мощность разряда, мощность на создание магнитного поля в источнике):

$$\eta_W = \frac{W_b}{W_{\text{power}}}.$$

5. Компонентный состав пучка в источнике при работе с молекулярными газами или на смеси газов, он может изменяться в зависимости от параметров разряда – тока и напряжения, а также давления нейтрального газа. Так, при работе на водороде в плазме газового разряда образуются помимо одноатомных ионов  $H^+$ , также и двухатомные  $H_2^+$  и трехатомные  $H_3^+$ , а также отрицательные ионы водорода  $H^-$ . Компонентный состав плазмы в газоразрядных источниках при  $T_e \gg T_i$  определяется зависимостью от электронной температуры сечений ионизации, диссоциации и рекомбинации различных ионов, атомов и молекул. Компонентный состав пучка ионов водорода можно варьировать в широких пределах. При больших концентрациях плазмы можно получать режимы, при которых основной компонентой будут однозарядные ионы (~ 80 – 85 %). По мере увеличения давления нейтрального газа и уменьшения электронной температуры увеличивается доля молекулярных ионов, поэтому основной компонентой извлекаемого пучка могут стать молекулярные ионы.

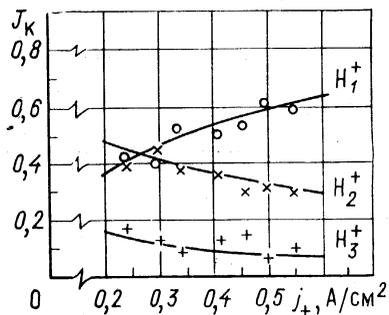


Рис. 3.81 Изменение компонентного состава пучка ионов водорода при увеличении плотности тока на зонд

На рис. 3.81 показано изменение компонентного состава пучка ионов водорода, извлекаемого из источника с накаливаемым катодом, по мере увеличения плотности тока (концентрации плазмы).

6. Энергетический спектр извлекаемых ионов, он зависит от применяемого для их генерации типа разряда. В источниках с накаливаемым катодом с низковольтной дугой пониженного давления разброс по энергиям, как правило, невелик и не превышает 10 эВ. Однако в источниках пеннинговского типа или в источниках с холодным катодом, когда напряжение на разряде высокое, энергетический разброс извлекаемых из плазмы ионов может быть значителен, что ухудшает фокусировку пучков и их сепарацию по массам.

7. Так как в газоразрядной плазме возникают различные колебания и неустойчивости, то ток пучка может быть модулирован во времени. *Степень модуляции  $\Delta I/I$*  влияет на процессы компенсации объемного заряда в пучках частиц и также отражается на качестве их формирования.

### 3.9.1. Извлечение и формирование пучков положительных ионов

Основными параметрами сформированных пучков ионов являются следующие.

1. *Первеанс пучка*, который определяется как отношение полного тока пучка к ускоряющему напряжению в степени три вторых:

$$P[A/V^{3,2}] = \frac{I}{U^{3/2}}. \quad (3.56)$$

При первеансе более  $10^{-7} A/V^{3,2}$  пучки считаются интенсивными. Для сравнения с электронными пучками надо использовать величину *эквивалентного первеанса*:

$$\bar{P} = \frac{I_+}{U_0^{3/2}} \left( \frac{M_i}{m_e} \right)^{1/2}.$$

2. *Эмиттанс*, отражающий наличие у ионов тепловых скоростей, которые вносят вклад в расходимость пучка и влияют на "портрет" пучка в фазовом пространстве. Согласно теореме Лиувилля при отсутствии диссипативных сил фазовый объем пучка сохраняется:

$$\int d\vec{r}d\vec{p} = \text{const}.$$

В случае, когда продольная скорость частиц (вдоль оси  $z$ ) в пучке много больше поперечных, то продольным разбросом частиц по скоростям можно пренебречь и рассматривать усредненную функцию распределения частиц в 4-мерном пространстве для некоторого поперечного сечения пучка:

$$F(x, y, p_x p_y) = \int_{-\Delta p_z}^{\Delta p_z} \Psi(x, y, p_x p_y) dp_z.$$

Полный ток пучка представляет собой функцию распределения, проинтегрированную по всему объему, занятому токами пучка

$$I = e \int F(x, y, p_x p_y) dx dy dp_x dp_y.$$

В случае независимости движений по  $x$  и  $y$  можно говорить об инвариантности сечений 4-мерного фазового объема плоскостью  $x = \text{const}$ ,  $p_x = \text{const}$  (или  $y = \text{const}$ ,  $p_y = \text{const}$ ).

На практике пользуются не импульсами, а углами наклона траектории пучка к продольной оси  $z$ :

$$x' = \frac{dx}{dz} = \frac{p_x}{p_z}; \quad y' = \frac{dy}{dz} = \frac{p_y}{p_z}.$$

Эмиттанс и является мерой двумерного фазового объема  $V_f$

$$\mathfrak{E} = \frac{1}{\pi} \int dx dx' = \frac{V_f}{\pi p_z} \quad (3.57)$$

Чтобы избежать зависимости эмиттанса от энергии частиц используют также нормализованный эмиттанс

$$\mathfrak{E}_N = \frac{V_f}{\pi p_z} \cdot \frac{\beta}{\sqrt{1-\beta^2}} = \frac{V_f}{\pi M c} \cdot \frac{1}{\sqrt{1-\beta^2}}.$$

На рис. 3.82 показан вид огибающей осесимметричного пучка частиц и соответствующие ему фазовые траектории в плоскости  $z = \text{const}$ .

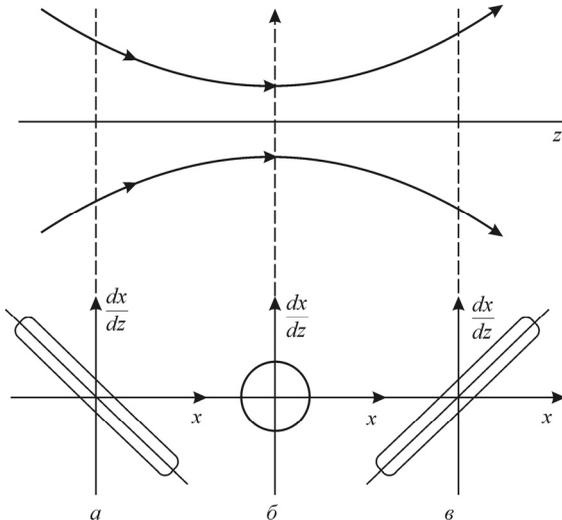


Рис. 3.82. Фазовые траектории в случае сходящегося (а), параллельного (б) и расходящегося пучков (в)

Эмиттанс соответствует деленной на  $\pi$  площади фазовой диаграммы. Так как плотность потока частиц пучка может быть (и, как правило, является) неоднородной, спадающей к периферии, то «фазовый портрет» пучка определяют при определенном значении плотности тока, например 0,1 от максимальной интенсивности.

Измерение фазового портрета (или эмиттанса) пучка можно производить методом двух или четырех щелей. Для того, чтобы определить эмиттанс пучка при некотором значении  $z$  с помощью первого метода используют две подвижные щели. Первая из них находится в плоскости  $z = \text{const}$ , а вторая располагается на некотором расстоянии  $l$  от нее вдоль по пучку, за ней помещается детектор пучка (цилиндр Фарадея или другой). Устанавливая первую щель на некотором расстоянии  $x_1$  от центра пучка, измеряют распределение тока за второй щелью при ее поперечном вдоль  $x$  перемещении. Таким образом, для каждого значения  $x_1$  строится распределение тока за второй щелью  $J(x_1, x_2)$ , однозначно связывающее приходящий ток и угол, под которым эта часть пучка попадает в щель 2. Значение  $(x_2 - x_1)/l = x'$  соответствует углу. Получив семейство распределений  $J(x_1, x_2)$ , фазовую диаграмму для пучка получают, откладывая в координатах  $x, x'$  некоторые постоянные значения измеренного тока.

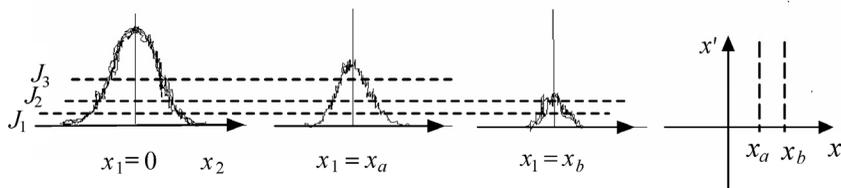


Рис. 3.83. К процедуре нахождения эмиттанса методом двух щелей

При прохождении пучка через установку, для того чтобы обеспечить его минимальные потери, эмиттанс пучка должен быть согласован с *аксептансом*, который накладывает ограничения на прохождение пучка через те или иные элементы структур в тракте пучка установки.

Такое ограничение проще всего рассмотреть на примере щели конечной ширины  $\delta$  и толщины  $l$  (рис. 3.83). При максимальном угле расходимости в пучке, равном  $x'_m$ , на фазовой плоскости  $x, x'$

через щель с полным акцептансом  $\delta^2 \cdot l$  не пройдут частицы, соответствующие заштрихованным участкам на рис. 3.84, суммарной площадью, как легко сосчитать, равной  $(x'_m)^2 \cdot l$ .

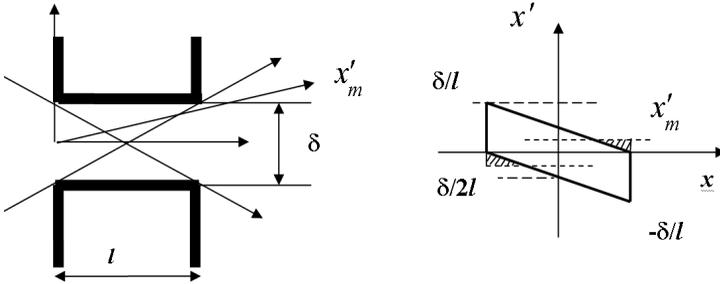


Рис. 3.84. Прохождение пучка с максимальным значением относительной поперечной скорости  $x'_m$  через щель шириной  $\delta$  и толщиной  $l$

3. Угол расходимости извлекаемого из источника пучка. Угол определяется как полуширина полного угла, соответствующего приращению характерного поперечного размера на некоторой длине

$$\vartheta_{\perp} = \arctg \frac{\Delta x}{\Delta z}.$$

Извлечение ионов из плазмы (рис. 3.85) при приложении к ней положительного относительно вытягивающего электрода потенциала  $U$  определяется плотностью тока, поступающего на границу плазмы (ионный ток насыщения) и который для плоского зонда равен:

$$j^+ = 0,4en_i \cdot \sqrt{\frac{2T_e}{M_i}}.$$

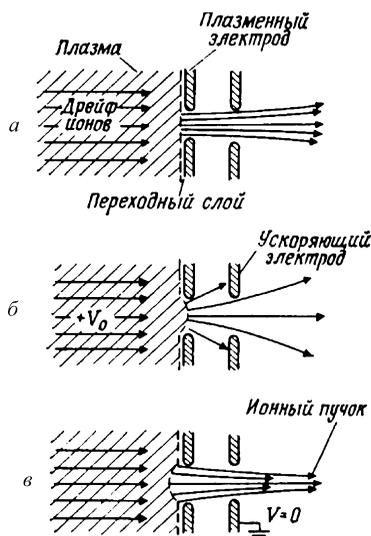
Тогда толщина двойного слоя объемного заряда  $d$  в плоской геометрии может быть найдена из закона Чайлда – Ленгмюра (3.19):

$$0,4en_i \sqrt{\frac{2T_e}{M_i}} = \frac{\sqrt{2}}{9\pi} \sqrt{\frac{e}{M_i}} \frac{U_0^{3/2}}{d^2}. \quad (3.58)$$

В реальной геометрии экстракции эмиссия происходит из щелей или отверстий. В этом случае при постоянной вытягивающей разности потенциалов граница плазмы может принимать выпуклую

или вогнутую форму, в зависимости от плотности плазмы. Таким образом, эффективное значение  $d$  может быть как меньше, так и больше межэлектродного расстояния.

Рис. 3.85. Изменение расходимости извлекаемого из ионного источника плазменного пучка при постоянном вытягивающем потенциале по мере повышения концентрации плазмы: *а* – низкая концентрация плазмы – электрическое поле «провисает» в отверстии эмиттера; *б* – концентрация плазмы, соответствующая выполнению соотношения (3.58), в котором толщина двойного слоя равна межэлектродному промежутку; *в* – повышенная концентрация плазмы, приводящая к уменьшению эффективной толщины двойного слоя, и выпуклая граница плазмы, создающая сильно расходящийся пучок



Таким образом, если при заданном ускоряющем промежутке и приложенном к ограничивающему плазму электроду потенциале изменить концентрацию плазмы, то по мере ее увеличения будем переходить от вогнутой границы плазмы к плоской, а затем – к выпуклой. Ускоряющий электрод представляет собой диафрагму (отверстие), а значит, также является линзой. Для редких пучков можно поставить на отверстие сетку для снижения расфокусирующей роли диафрагмы. Для плотных

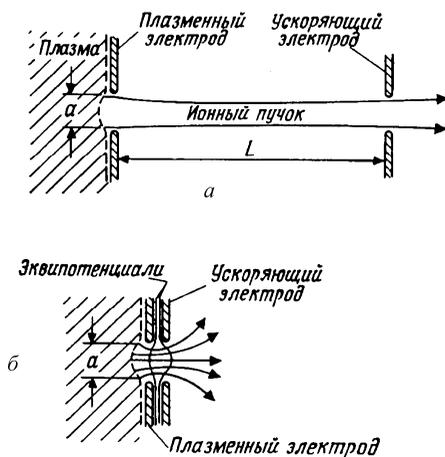


Рис. 3.86. Извлечение пучка при межэлектродном расстоянии много больше размеров эмитирующего отверстия апертурой  $a$  (*а*) и много меньше эмитирующего отверстия (*б*)

пучков приходится использовать фокусирующий электрод после вытягивания.

Если будем удалять или приближать вытягивающий электрод к границе плазмы с постоянной плотностью, то либо получим длину ускоряющего промежутка большую, чем в (3.58) с вогнутой границей плазмы, либо при малой ее концентрации эквипотенциали на ускоряющем электроде образуют расфокусирующую оптическую систему (рис. 3.86, б). При этом надо еще обеспечить необходимую электрическую прочность промежутка.

В приведенных рассуждениях о влиянии границы плазмы на расходимость пучка не рассматривалось существование вторичной плазмы пучка. Как было показано ранее, мощные стационарные пучки могут быть только скомпенсированными. Поэтому для создания интенсивных ионных пучков необходимо «запереть» электроны пучка отрицательным относительно земли потенциалом, не допустив их попадание в источник, или, как говорят, создать «крест потенциала» (рис. 3.87, а). Без этого электроны будут ускоряться к положительному потенциалу ионного эмиттера, существенно нагружая источник питания и приводя к выделению в источнике огромной паразитной мощности. С точки зрения ионно-оптических свойств явным преимуществом обладают трехэлектродные ионно-оптические системы, последний замедляющий электрод в которых находится под потенциалом земли (рис. 3.87, б).

Это связано с тем, что в первом случае нескомпенсированный положительный потенциал в плазме пучка будет иметь большее значение в центре, чем на периферии, выгибая невыгодным для фокусировки пучка образом эквипотенциали и приводя к его дефокусировке. Во втором случае с третьим заземленным электродом фокусировка пучка обеспечивается.

Из сказанного о поведении границы плазмы и ее влияния на расходимость пучка следует, что расходимость пучка при постоянном межэлектродном промежутке и ускоряющем потенциале является  $V$ -образной функцией от концентрации плазмы. Действительно, измерения расходимости пучка от плотности тока в разряде источника с трехэлектродной ионно-оптической системой показали, что при заданных  $d$  и  $U$  значение угла расходимости  $\theta_{\perp}$  имеет резкий минимум при определенной плотности разрядного тока в разрядной камере источника (концентрации плазмы), рис. 3.88.

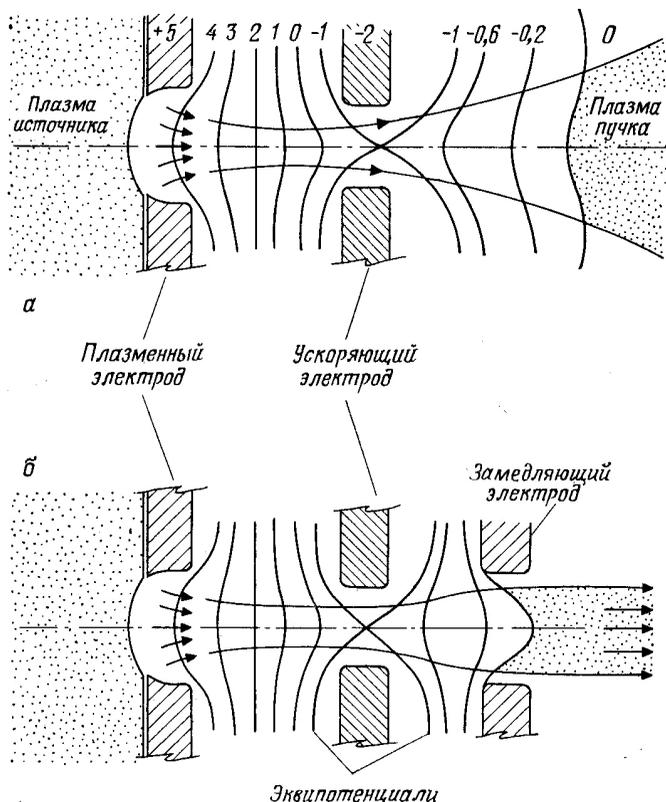


Рис. 3.87. Траектории ионов и эквипотенциали в ускоряющей-замедляющей ионно-оптической системе ионного источника с потенциалом относительно земли 5 кВ без специального замедляющего электрода (а) и с ним (б)

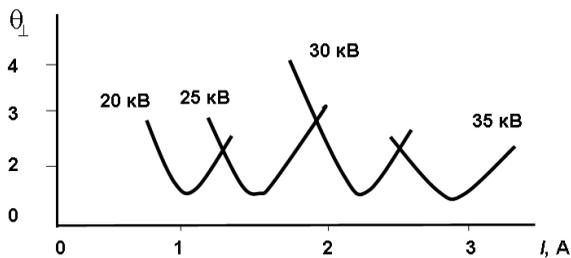


Рис. 3.88. Расходимость пучка ионов водорода, извлекаемого из плазменного источника ионов от тока разряда при разном ускоряющем потенциале при постоянном значении ускоряющего промежутка 4 мм

Уменьшение межэлектродного расстояния приводит к тому, что кривые сдвигаются в область больших токов. Причем, извлекаемый из источника ионный ток демонстрирует ту же зависимость, а значения плотности тока пучка, соответствующие минимуму угловой расходимости, подчиняются зависимости

$$j_0 = K \frac{U^{3/2}}{d^2}. \quad (3.59)$$

Таким образом, данные эксперимента подтверждают приведенную картину, при которой минимальный угол расходимости соответствует плоской границе плазмы, для которой и справедлив закон Чайлда – Ленгмюра (3.19).

Для источников ионов водорода, в которых наряду с одноатомными ионами содержатся ионы  $H_2^+$  и  $H_3^+$  в диапазоне  $U$  от 10 до 50 кВ,  $K \approx 4 \cdot 10^{-8} \text{ А/В}^{3/2}$  (если длина промежутка выражена в см, а плотность тока в  $\text{А/см}^2$ ).

Расходимость пучка с трехэлектродной ионно-оптической системой (ИОС) (рис. 3.89) может быть аппроксимирована следующими выражениями:

$$\theta_{\perp} \approx \frac{2\delta_1}{d} \left| \frac{j^+}{j_0} - 0,7 \right|$$

для щелевого источника и

$$\theta_{\perp} \approx \frac{r_1}{d} \left| \frac{j^+}{j_0} - 0,7 \right|$$

для источника с радиусом эмиссионного отверстия  $r_1$ .

Из (3.59) следует, что для получения максимальной плотности тока необходимо уменьшать ускоряющий промежуток. Однако при его уменьшении возникают пробои. Данные экспериментов показывают, что напряжение пробоя аппроксимируется зависимостью

$$U_{\text{пр}} \approx A d_{\text{пр}}^{\alpha}.$$

Постоянные  $A$  (60 – 80, если  $U$  выражено в кВ, а  $d$  в см) и  $\alpha$  (0,6 – 0,8) зависят от многих параметров, таких, как реальная геометрия электродов, используемый материал, степень шероховатости поверхности. В реальных условиях наличия потоков заряжен-

ных частиц и сопутствующего нейтрального газа пробивное напряжение оказывается значительно меньше, чем в чисто вакуумном случае (где при соответствующей обработке оно доходит до 90 кВ/мм). Эксперименты с трехэлектродной ИОС (см. рис. 3.89), выполненные в Курчатовском институте, показали, что пробивное напряжение хорошо соответствует зависимости:

$$U_{\text{пр}}[\text{кВ}] \approx 80d_1^{0,8}[\text{см}]. \quad (3.60)$$

Таким образом, с уменьшением межэлектродного расстояния, с одной стороны, растет извлекаемый ток, а с другой стороны, падает напряжение, при котором происходит пробой. Можно показать, что комбинация этих двух противоположных тенденций приводит к тому, что максимальная плотность извлекаемого из ионного источника тока является функцией с максимумом.

Для этого надо уточнить, что в экспериментально полученном выражении для плотности тока, соответствующего минимуму угла расходимости пучка (3.60) в качестве величины межэлектродного промежутка брали значение (см. рис. 3.89)

$$d = t_1 + d_1 + \delta_2.$$

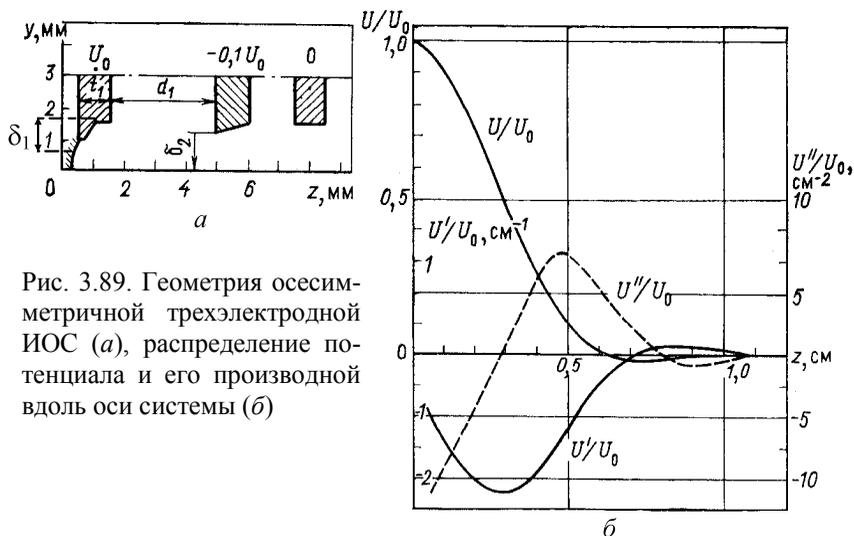


Рис. 3.89. Геометрия осесимметричной трехэлектродной ИОС (а), распределение потенциала и его производной вдоль оси системы (б)

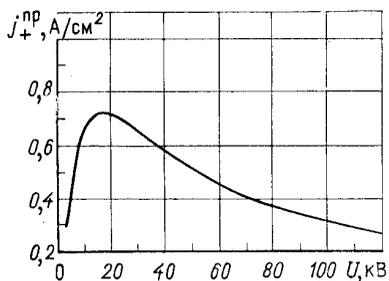


Рис. 3.90 Зависимость предельной плотности фокусируемого тока ионов водорода, соответствующей минимальному углу расходимости пучка, от ускоряющего напряжения

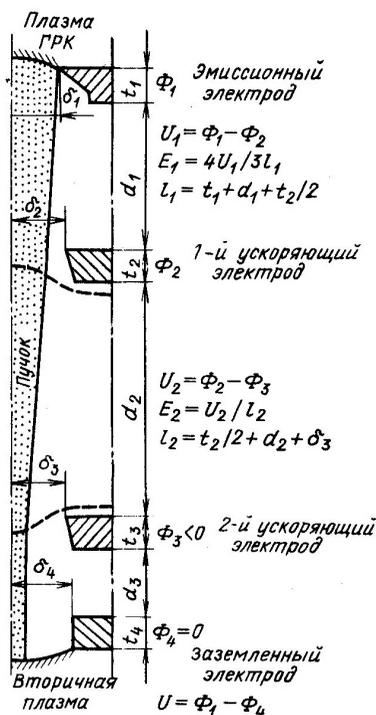


Рис. 3.91. Четырехэлектродная ИОС

Для оптимизированной в результате длительных экспериментов ИОС справедливы следующие соотношения:  $\delta_2 \approx 0,3d_1$ ,  $t_1 \approx 0,1$  см. Откуда получаем  $d \approx \approx 1,43 (0,1 + d_1)$ . Подстановка этого выражения и зависимости  $d_1(U)$  из (3.60) и приводит к кривой с максимумом (рис. 3.90). Из рис. 3.90 следует, что для получения максимальной плотности фокусируемого тока необходимы не максимальные, а умеренные напряжения в 20 – 30 кВ.

Потому для получения интенсивных пучков более высокой энергии применяют четырехэлектродную ИОС, в которой первая ступень служит для извлечения и формирования пучка высокой интенсивности, вторая – для его ускорения, а третья – замедляющая – для фокусировки (рис. 3.91).

Ограничение на плотность извлекаемого тока также предопределяет путь создания сильноточных ионных источников. Большой ток можно получить, лишь увеличивая эмиссионную поверхность плазмы. Пример такого увеличения в одноапертурном источнике показан на рис. 3.92. Однако лучший источник подобного типа позволил сформировать пучок общей интенсивностью не более 1,5 А.

Для создания многоамперных источников с высокой энергией ионов (что, например, необходимо для инжекторов быстрых нейтральных атомов в термоядерных установках) эмиссионную поверхность приходится увеличивать путем создания многоапертурных источников (многочелевых или с множеством эмиссионных отверстий). Ионно-оптические системы таких источников достаточно сложны, так как должны формировать и фокусировать с большой точностью множество пучков.

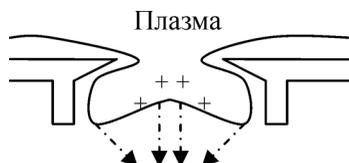


Рис. 3. 92. Применение экспандера плазмы для увеличения полного извлекаемого тока из источника типа дуоплазматрон (см. далее)

### 3.9.2. Конкретные типы плазменных источников ионов для создания интенсивных стационарных пучков

Существует большое множество разнообразных конструкций ионных пушек (ионных источников). В них используются различные способы создания ионов, например, термоионная эмиссия, ионизация газа или паров вещества электронным ударом. Наиболее эффективными источниками ионов являются плазменные, в которых создается газоразрядная плазма, а ионы вытягиваются электрическим полем с ее границы.

#### *Дуоплазматрон*

Этот тип источника весьма распространен, так как по сравнению с другими обладает несомненными преимуществами. Важнейшими из них является самая высокая их всех плазменных источников газовая эффективность, достигающая до 95 %, и плотность извлекаемого пучка (до  $100 \text{ А/см}^2$ ). Дуоплазматрон явился развитием предложенного фон Арденне источника типа уноплазматрон (рис. 3.93, а). Основной конструктивной идеей этого типа источника явился промежуточный анод конической формы. Этот конус обеспечивает контрагирование (сжатие) плазмы по направлению к эмиссионному отверстию за счет образования плазменного «пузыря», на границе которого существует двойной слой, в котором

электроны дополнительно ускоряются (рис. 3.93, б) и повышают плотность плазмы вблизи выходного отверстия из конуса.

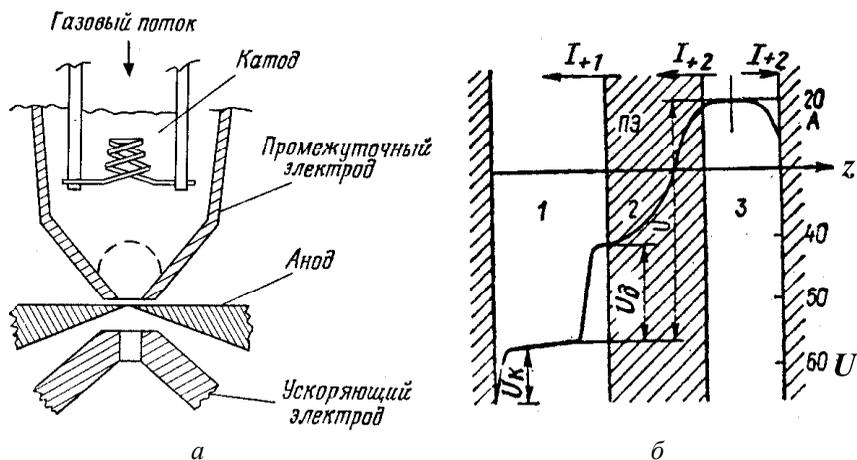


Рис. 3.93. Уноплазматрон Арденне (а) и распределение потенциала в дуоплазматроне (б)

Дуоплазматрон (рис. 3.94) отличается от уноплазматрона двойным контрагированием плазмы. Второе контрагирование осуществляется за счет приложения магнитного поля между промежуточным анодом. Магнитное поле дополнительно сжимает плазменный поток, максимально повышая плотность плазмы.

Для реализации двойного контрагирования магнитное поле специальной катушки или постоянных магнитов концентрируют в зазоре между промежуточным анодом и анодом за счет изготовления их из ферромагнитного материала. При этом промежуточный анод и анод изолируются между собой с помощью диэлектрических вставок небольшой толщины. Эти вставки лишь незначительно ослабляют магнитное поле в основном зазоре, но позволяют регулировать потенциалы промежуточного анода и анода независимо. При запуске источника сначала зажигают разряд между катодом и промежуточным анодом, а затем подают положительное напряжение на основной анод. При этом потенциал промежуточного анода и, соответственно, ток на него можно существенно снизить.

Если в максимуме напряженности магнитного поля вставить ограничительную диафрагму, то можно снизить поток сопутствующей

шего нейтрального газа. Именно с применением такой диафрагмы дуоплазматрон приобретает высокую газовую эффективность.

Так как разряд с накаливаемым катодом горит при пониженном напряжении, то температура плазмы и, соответственно, энергетический разброс ионов по энергиям довольно малы. Это способствует формированию пучков с малым эмиттансом и получению на мишени после масс-сепарации или прохождения элементов фокусирующих систем высокой плотности сфокусированного ионного тока.

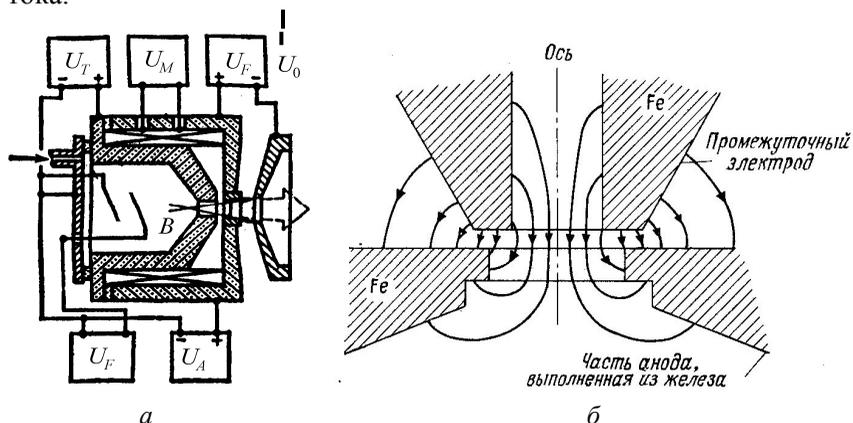


Рис. 3.94. Принципиальная схема дуоплазматрона и его питания (а):  $U_F$  – блок питания накала катода;  $U_T$  – питание разряда промежуточного анода;  $U_A$  – питание разряда анода;  $U_M$  – питание катушки электромагнита;  $U_0$  – высоковольтный выпрямитель питания ускоряющего напряжения, и картина распределения магнитного поля между промежуточным анодом и анодом (б)

На рис. 3.95 показана конструкция разработанного на кафедре физики плазмы МИФИ дуоплазматрона для получения газообразных ионов с энергией до 10 кэВ с ИОС и узлом механической юстировки. В конструкции вакуумной части и ИОС использованы только металлокерамические узлы, а уплотнения фланцев осуществляются с помощью медных прокладок. Так как разрядная камера соединяется с вакуумной системой лишь через небольшое эмиссионное отверстие, то это позволяет прогревать источник с целью обезгаживания для обеспечения низкого уровня примесей в ионном пучке.

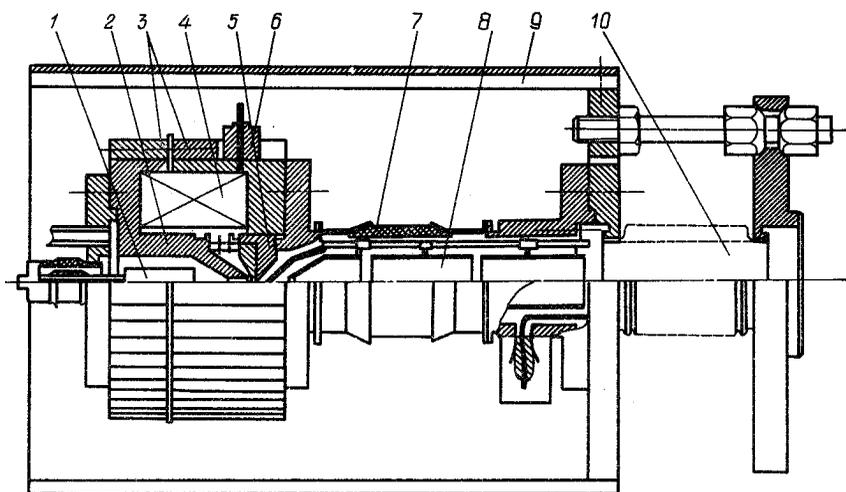


Рис. 3.95. Конструкция малогабаритного прогреваемого ионного источника типа дуоплазмотрон с воздушным охлаждением: 1 – вольфрамовый катод косвенно накала; 2 – промежуточный анод; 3 – радиатор воздушного охлаждения; 4 – соленоид магнитного поля; 5 – анод; 6 – токоподвод соленоида; 7 – разделительный высоковольтный изолятор; 8 – ИОС из двух цилиндрических линз; 9 – защитный изолирующий экран; 10 – сильфонный юстировочный узел

Катод источника – вольфрамовый прямонакальный, мощность его питания – 60 Вт. При использовании молибденовой вставки с отверстием диаметром 0,65 мм расход газа (гелия) составил  $3 \cdot 10^{-3}$  л · Тор/с. Камера промежуточного анода соединена с анодом через специально разработанный металлокерамический изолятор. Соленоид ионного источника намотан медным проводом  $\varnothing 2$  мм с теплостойкой изоляцией. Электрически от анода и камеры промежуточного анода он отделен фторопластовыми вкладышами. При токе в соленоиде 5 А он обеспечивает индукцию поля в зазоре анод-промежуточный анод 0,3 Т.

Система вытягивающих и фокусирующих линз состоит из квазипирсовой линзы и двух цилиндрических линз.

Юстировочный узел состоит из сильфона и трех регуляторов наклона, с помощью которых можно устанавливать ось ионного источника в пределах  $\pm 5^\circ$  в двух взаимно перпендикулярных направлениях.

Вольт-амперная характеристика разряда в источнике соответствует разрядам с накаливаемым катодом и определяется током эмиссии катода и напуском газа. Максимальный ток разряда до 5 А. Наибольшая фокусируемая плотность тока зависит от используемого газа (Ar, He, D<sub>2</sub>) и ускоряющего напряжения  $U_0$ . (Пучок фокусируется в центр камеры при потенциале среднего электрода цилиндрической линзы, равном  $0,7U_0$ .) Например, для получения максимальной плотности тока  $50 \text{ мкА/см}^2$  ионов гелия с энергией 3,0 кэВ в пределах окружности  $\varnothing 5 \text{ мм}$  в центре аналитической камеры. Оптимальные параметры разряда источника и питания соленоида составляют:  $I_p = 0,8 \text{ А}$ ,  $U_p = 200 \text{ В}$ ,  $I_M = 5 \text{ А}$  при расходе газа  $2 \cdot 10^{-3} \text{ л} \cdot \text{Тор/с}$ . Уровень примесей в пучке по данным масс-спектрометрических измерений мал. В контрольном эксперименте источник непрерывно проработал 20 ч без перегрева и изменения параметров пучка.

### Источник Кауфмана

Одним из весьма распространенных многоамперных ионных источников является источник Кауфмана, в котором плазма с большим объемом и эмиссионной поверхностью создается в разряде с накаливаемым катодом и осциллирующими электронами (рис. 3.96). В таком источнике впервые была применена многоапертурная ИОС.

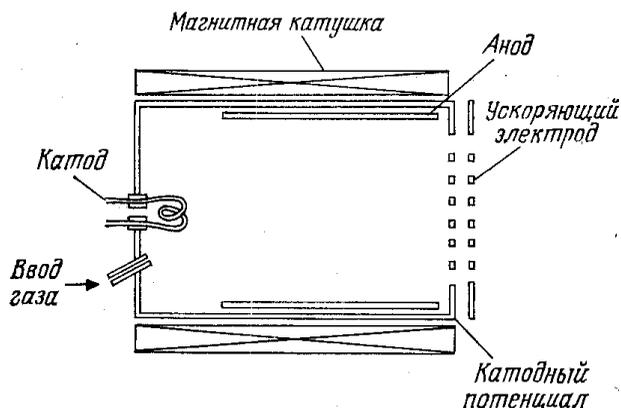


Рис. 3.96. Плазменный источник ионов с осциллирующими электронами кауфмановского типа

Газовая эффективность такого источника невысока, поэтому наиболее часто его используют при работе с тяжелыми газами: аргоном или ксеноном при ионной обработке материалов или с ионами цезия или ртути при использовании в качестве ионного двигателя для космических аппаратов. Замена катушки электромагнита на постоянные магниты в таком источнике изменяет конфигурацию магнитного поля и повышает газовую эффективность.

### *Источники ионов для инжекторов термоядерных установок*

Для нагрева плазмы в магнитных ловушках до термоядерных температур необходимы мегаваттные пучки нейтральных атомов, которые, свободно проникая через магнитное поле и перезаряжаясь в плазме, отдают свою энергию ионам плазмы. Легко подсчитать необходимую мощность инжектируемых пучков атомов при известном объеме плазмы и ее концентрации для того, чтобы увеличить ее энергосодержание. Например, для установки масштаба экспериментального термоядерного реактора ИТЭР с объемом плазмы  $\sim 850 \text{ м}^3$  при концентрации  $10^{20} \text{ м}^{-3}$  увеличение температуры на 10 кэВ за 1 с за счет инжекции быстрых нейтралов потребует введения 80 МВт мощности. Энергия инжектируемых нейтралов должна быть достаточна для того, чтобы пучок выделил свою энергию в центральной части плазменного шнура. Для современных термоядерных установок типа токамак с радиусом плазменного шнура менее метра и концентрацией плазмы в 2 – 3 раза меньшей, чем в ИТЭР, достаточно 80 – 120 кэВ, а для ИТЭР уже необходимо 0,5 – 1,0 МэВ. Таким образом, при энергии инжекции в ИТЭР 1,0 МэВ ток должен составлять 80 экв.А, на современных токамаках мощность инжекции составляет десятки мегаватт, что при энергии порядка сотни килоэлектрон-вольт также требует токов в сотни ампер.

Первые сильноточные источники для инжекторов использовали идею дуоплазматрона с его повышенной газовой эффективностью. *Дуоплазматрон* был похож на дуоплазматрон с тем отличием, что плазма свободно вытекала в расширительную камеру большого диаметра, где осциллирующие в магнитном поле электроны поддерживали высокую ионизацию. В *периплазматроне* (рис. 3.97), в конструкции которого отчетливы видны идеи дуоплазматрона или

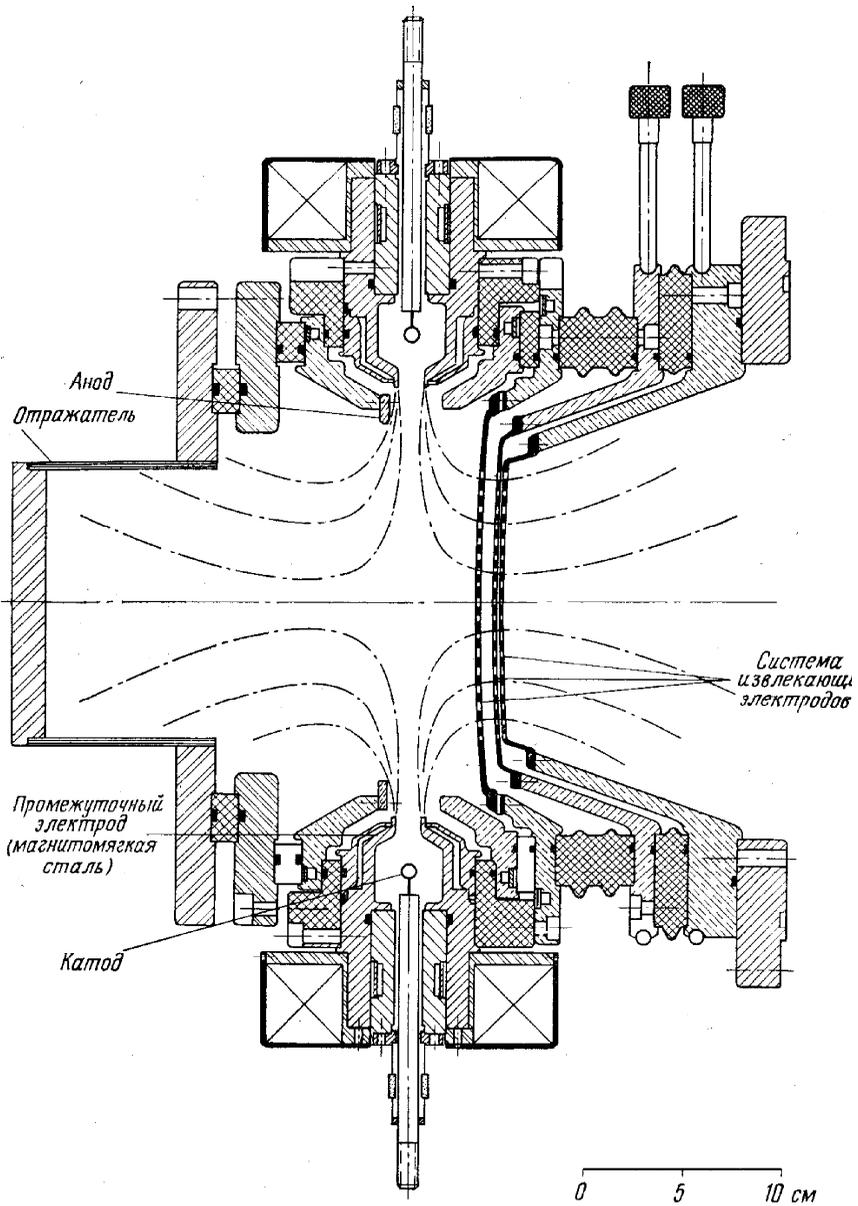


Рис. 3.97. Сильноточный ионный источник – периплазматрон

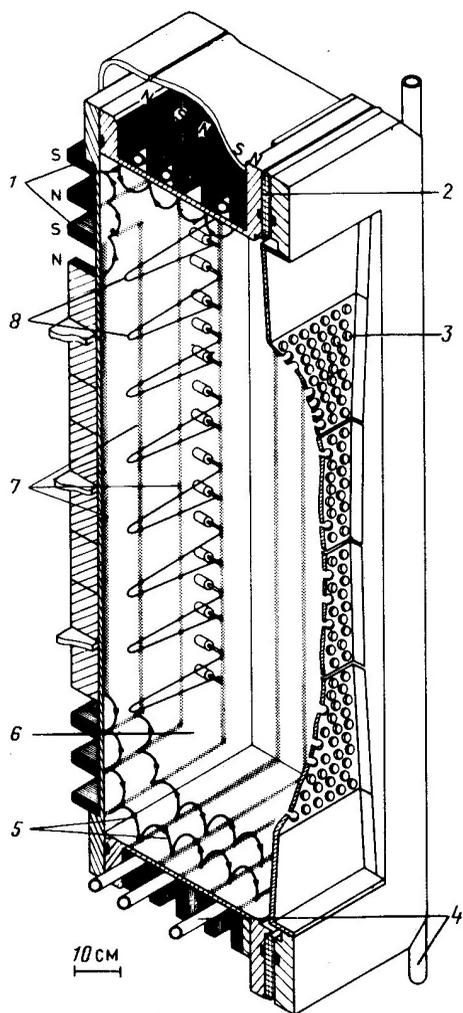


Рис. 3.98. Ионный источник с периферийным магнитным полем: 1 – самарий-кобальтовые магниты; 2 – изолятор; 3 – многоапертурный эмиссионный электрод; 4 – трубки водяного охлаждения; 5 – магнитные силовые линии у поверхности разрядной камеры; 6 – ввод газа; 7 – полюса постоянных магнитов; 8 – катоды

аксиально развернутого дуопигатрона, вместо промежуточного анода конической формы использовалась кольцевая камера с сужением, а извлекаемая из промежуточного анода плазма попадала в общий объем, уже откуда пучок извлекался многоапертурной ИОС. Катод состоял из 12 – 18 вольфрамовых нитей накала толщиной 1 мм, общей эмиссионной площадью  $70 \text{ см}^2$ , одного ампера. В прямоугольном варианте ИОС размером  $40 \times 16 \text{ см}$  полный извлекаемый ток составлял около 100 А (96 А) при газовой эффективности 60 %. Однако энергетическая цена извлечения 1 А оказалась довольно высокой 700 – 1000 Вт.

Одним из наиболее простых и удобных в компоновке оказался источник с периферийным магнитным полем (рис. 3.98).

В современных термоядерных установках для создания таких больших токов используются инжекторы с образованием нейтралов путем перезарядки положительных

ионов на нейтральном газе. Схема такого инжектора приведена на рис. 3.99. Перезарядка сформированных и ускоренных в ИОС ионов происходит на нейтральном газе, вытекающем из источника. В нейтрализаторе обеспечивается необходимая для установления равновесного распределения по зарядам в пучке эффективная «толщина» мишени  $\int n dl > 2 \cdot 10^{20} \text{ м}^{-2}$ . Мощные криопанели обеспечивают необходимую скорость откачки этого газа таким образом, чтобы после нейтрализатора в атомопроводе давление нейтрального газа упало до  $\sim 10^{-4}$  Па.

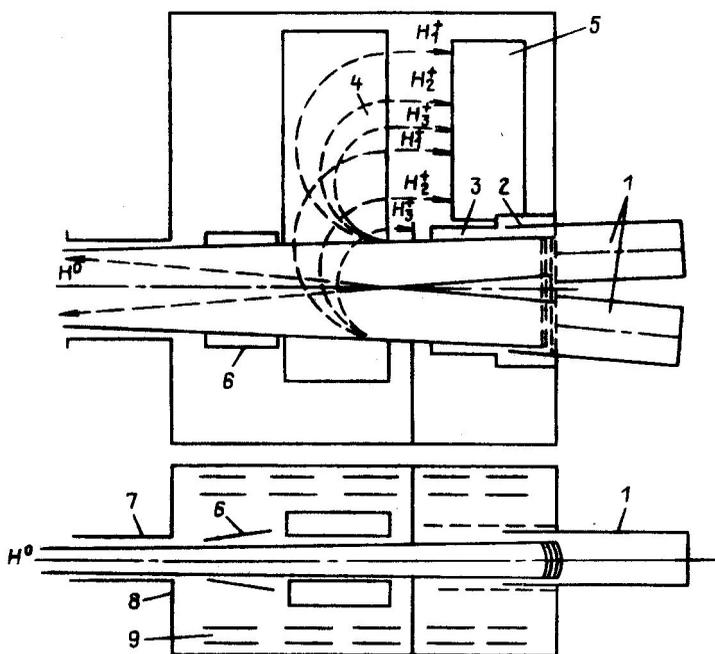


Рис. 3.99. Схема инжектора мегаваттных пучков нейтральных атомов водорода для термоядерных установок: 1 – ионные источники; 2 – камера перезарядки; 3 – магнитный экран; 4 – отклоняющиеся неперезарядившиеся ионы; 4 – электромагнит; 5 – приемник ионов; 6 – монитор пучка; 7 – атомопровод; 8 – вакуумная камера; 9 – криопанели для откачки газа

Длина пробега нейтрального атома изотопа водорода в водородной термоядерной плазме оценивается из соотношения

$$\lambda_{[M]} = \frac{W_0 [кэВ]}{180 n [10^{20} \text{ м}^{-3}] M [a.e.m.]},$$

где  $W_0$  – энергия инжектируемого нейтрала;  $n$  – плотность плазмы. Поэтому для крупных термоядерных установок масштаба ИТЭР и ДЕМО, когда при концентрации плазмы не менее  $10^{20} \text{ м}^{-3}$  нейтралу

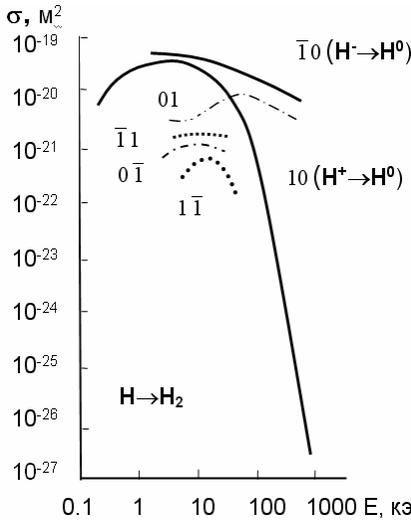


Рис. 3.100. Сечения перезарядки при соударениях атомов и атомарных ионов противя с молекулами водорода

приходится преодолевать несколько метров, энергия инжекции должна составлять порядка 1 МэВ. Однако из-за резкого падения с энергией сечения захвата электрона протонами (рис. 3.100) использование для получения нейтралов пучков положительных ионов оказывается крайне неэффективным.

В то же время сечение потери электрона отрицательным ионом водорода не так быстро уменьшается с энергией. Поэтому для получения пучков быстрых нейтральных атомов с энергиями выше 200 кэВ

значительно выгоднее использовать процесс обдирки отрицательного иона водорода. Для чего были сначала использовали системы двойной перезарядки положительных ионов – сначала получали сильноточный пучок положительных ионов с энергией  $\sim 20$  кэВ, потом перезаряжали ионы на специальных перезарядочных мишенях из паров щелочных или щелочно-земельных металлов, которые легко отдают в столкновениях внешний электрон, а затем образовавшиеся отрицательные ионы ускоряли до нужной высокой энергии и уже далее перезаряжали их в нейтральные атомы. Из-за большой разницы конечной энергии отрицательных ионов по сравнению с начальной энергией пучка положительных ионов такой инжектор обладал разумным КПД. Однако прямое получение из

источника отрицательных ионов с последующим преобразованием в нейтралы оказалось эффективнее.

### Мощные источники отрицательных ионов

В первых источниках отрицательных ионов использовался эффект повышенного образования отрицательной зарядовой фракции при соударении атомов ионов водорода с поверхностью с малой работой выхода (рис. 3.101, из которого видно, что отрицательная зарядовая фракция может превышать 40 %). Поэтому в конструкциях этих источников использовали близко расположенные к эмиссионному отверстию поверхности, а в разряд подпускали цезий. Такие источники назывались *поверхностно-плазменными*. Самые мощные источники такого типа были разработаны в ИЯФ СО РАН в Новосибирске.

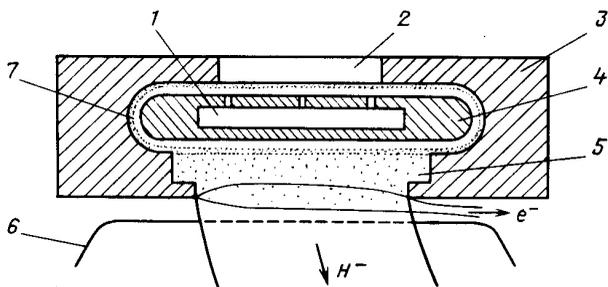
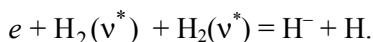


Рис. 3.101. Магнетронный источник отрицательных ионов: 1 – заполненный цезием сердечник катода; 2 – напуск водорода; 3 – анод; 4 – катод; 5 – плазма низкой плотности; 6 – эмиссионный электрод; 7 – плотная плазма. Магнитное поле направлено перпендикулярно плоскости рисунка

Именно благодаря наличию магнитного поля извлекаемые вместе с отрицательными ионами электроны дрейфовали в ускорительном промежутке, не нагружая ИОС источника. В таком источнике была получена плотность тока отрицательных ионов до  $\sim 4 \text{ А/см}^2$ .

Однако и в объемных разрядах в водороде в некоторых реакциях образуются отрицательные ионы. А именно, в образовании отрицательных ионов определяющую роль играют колебательно-возбужденные молекулы водорода



Современные источники отрицательных ионов с объемным дуговым или СВЧ-разрядом похожи на источники положительных ионов, извлекаемые из них стационарные токи уже превышают десяток ампер. Но во всех используется слабое магнитное поле, которое замагничивает и уводит из пучка электроны, лишь слабо влияя на отрицательные ионы водорода.

### **3.10. Получение пучков медленных ионов, рекуператоры энергии заряженных частиц**

Пучки медленных ионов необходимы не только для исследования проблем в пограничной области физики взаимодействия частиц с конденсированной средой, когда энергия атомных частиц сравнима с энергией связи атомов в решетке твердого тела, но и для «мягкого» воздействия на материалы и гетероструктуры, когда энергии падающих частиц недостаточно для создания радиационных дефектов при прямом кинетическом столкновении. При моделировании взаимодействия термоядерной плазмы с обращенными к ней материалами проблема исследования эффектов воздействия на материалы ионов электрон-вольтных энергий связана с концепцией так называемого газового дивертора, в котором вблизи мишени, с которой должна взаимодействовать плазма, напускается газ. При этом энергия частиц потока плазмы за счет соударений ионов с холодными атомами или молекулами существенно уменьшается вплоть до полного прекращения ионного тока на мишень (режим отрыва плазмы от стенки).

Однако проблема создания достаточно интенсивных пучков низких энергий сложна из-за трудностей извлечения ионов при низких энергиях, так как в соответствии с законом Чайлда – Ленгмюра (3.19) плотность извлекаемого тока уменьшается с убыванием ускоряющего напряжения в степени  $3/2$ . С другой стороны, медленные пучки заряженных частиц сильно расталкиваются из-за объемного заряда пучка (см. разд. 3.6.1).

Поэтому основным способом создания достаточно интенсивных пучков медленных ионов является извлечение их при высоком ускоряющем потенциале с последующим торможением перед

мишенью. Для этой цели используются различные способы торможения, частично рассмотренные в разд. 3.1.1. При понижении продольной энергии пучка возрастает вклад перпендикулярной к направлению распространения скорости частицы, в итоге угол наклона траектории к первоначальному направлению распространения пучка возрастает тем больше, чем выше степень торможения пучка. Как правило, для пучков с небольшим значением объемного заряда наилучшие системы торможения могут создать степень торможения до 0,95 без потери значительной доли пучка. Поэтому для получения, например, ионов с энергиями в единицы электрон-вольт можно использовать пучки, сформированные при энергии в сотни электрон-вольт.

Наиболее просто реализуются системы, когда на мишень можно подавать тормозящий потенциал. В этом случае система торможения располагается непосредственно перед мишенью. Это позволяет увеличить полный приходящий на мишень ток за счет более полного сбора ионов. В некоторых задачах желательно иметь мишень под потенциалом, близким к потенциалу земли. В этом случае конструкция ионно-лучевой установки усложняется (рис. 3.102). Так как конечная энергия попадающих на мишень частиц определяется лишь разностью потенциалов между источником ионов и приемником, то на источник ионов необходимо подавать потенциал, соответствующий (деленному на заряд) значению энергии, с которой ион должен попасть на мишень. Достаточное для извлечения необходимых токов ионов напряжение обеспечивается за счет подачи на вытягивающий электрод и, соответственно, элементы ионного тракта высокого отрицательного потенциала (при работе с положительными ионами). В этом случае внутри вакуумной камеры ионно-лучевой установки устанавливают лайнер под высоким отрицательным потенциалом, обеспечивающим движение ионов в эквипотенциальном пространстве установки (см. рис. 3.102).

Более высокая степень торможения при малом расхождении пучка при торможении обеспечивается при малом эмиттансе пучка. Такие пучки реализуются при низкой ионной температуре в плазме источника (дуоплазмотроны, источники с ионизацией электронным ударом), обеспечивающей малое значение поперечных составляющих в пучке вытягиваемых ионов.

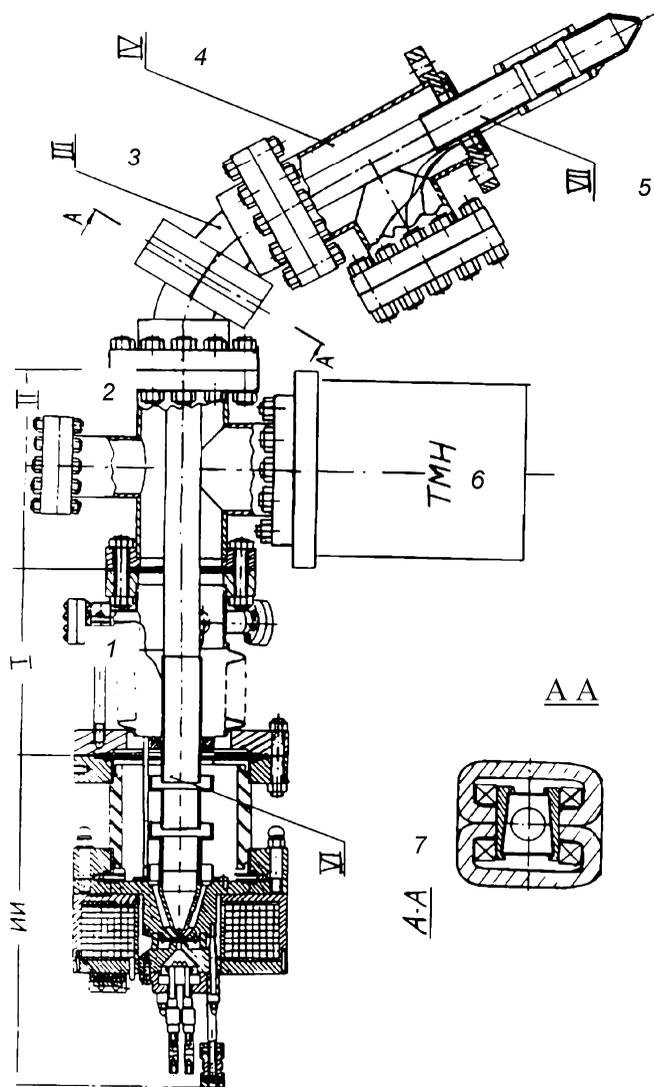


Рис. 3.102. Устройство ионного сепаратора медленных ионов с внутренним лайнером под высоким отрицательным потенциалом: 1 – 3-линзовая ИОС; 2 – промежуточная вакуумная камера; 3 – сепаратор (сечение АА) со скрещенными  $E$  и  $H$  полями; 4 – внутренний лайнер под отрицательным потенциалом; 5 – система торможения, 6 – малогабаритный турбомолекулярный насос; 7 – внутренний лайнер под отрицательным потенциалом; 8 – ионный источник

Для сходящегося пучка перспективной является система торможения с потенциалом, спадающим обратно пропорционально расстоянию от точки фокуса. В этом случае можно создать систему, тормозящая сила в которой действует строго вдоль направления движения. В общем случае нахождение оптимальных конфигураций замедляющих систем производят с помощью современных пакетов прикладных программ типа SIMION.

Для более плотных пучков эффективной оказалась система торможения с обратной пирсовской оптикой, потенциалы на электродах которой были оптимизированы для получения наиболее равномерного распределения плотности тока на мишени (рис. 3.103).

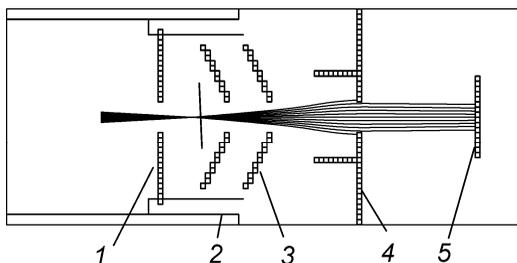


Рис. 3.103. Система с коэффициентом торможения 0,98: 1 – входная диафрагма; 2 – первая тормозящая линза; 3 – вторая тормозящая линза; 4 – диафрагма; 5 – мишень

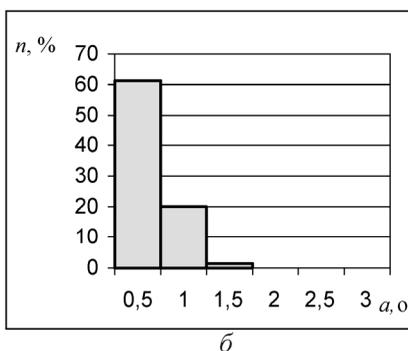
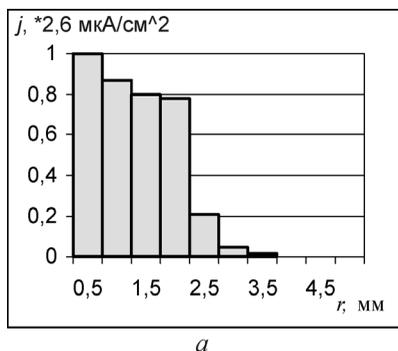


Рис. 3.104. Распределение плотности тока по поверхности мишени (а) и углов падения на нее ионов (б)

На рис. 3.104 показаны рассчитанные с помощью программы SIMION-7 распределения плотности тока на мишени (см. рис. 3.103, а) и углов падения ионов (см. рис. 3.103, б) для сходящегося пучка. При расчете системы моделировалось торможение

пучка ионов  $D_3^+$  (90 нА) с начальной энергией 2,5 кэВ. Пучки тормозились до энергии 50 эВ, что соответствует коэффициенту торможения 0,98. Это практически предельный коэффициент торможения для системы с таким количеством электродов.

Для сходящегося пучка потенциалы на электродах: «0» – на первом электроде (соединен с пролетным каналом); + 1900 В – на электроде 2; + 2100 В – на электроде 3; + 2450 В – на прогреваемом экране и мишени.

Рис. 3.106 показывает, что при плотности тока порядка  $2,5 \text{ мкА/см}^2$  в данной системе обеспечивается достаточно равномерное распределение тока по поверхности и очень небольшой разброс по углам падения на мишень. Проблема создания пучков низкой энергии близка к проблеме рекуперации (прямого преобразования) энергии потоков заряженных частиц. Для повышения эффективности рекуперации также необходимо «посадить» заряженную частицу на находящуюся под тормозящим потенциалом поверхность с возможно меньшей кинетической энергией. Такая рекуперация повышает КПД мощных пучковых систем как в электронных генераторах мощного электромагнитного излучения, так и в инжекторах мощных пучков для термоядерных установок. Проблемы повышения эффективности преобразования кинетической энергии пучка в электрическую связаны не только с тем, что при торможении пучка с высоким эмиттансом он сильно расходится (соответственно, на тормозящий электрод частицы приходят под углом к поверхности, а в материале мишени выделяется не малая оставшаяся часть нормальной к поверхности составляющей энергии частицы, а полная кинетическая энергия), но и с тем, что попавшие на коллектор ионы вызывают вторичную электронную эмиссию. Выбитые из тормозящего электрода электроны могут ускоряться в системе торможения, и уже преобразование их кинетической энергии в тепло на электродах понизит общий КПД рекуператора. На рис. 3.105. показан самый простой сеточный рекуператор. При подаче на сетку отрицательного потенциала будут запираются как вторичные электроны, присутствующие в пучке ионов, так и электроны вторичной ион-электронной эмиссии, выбитые из коллектора жалюзийного типа тормозящимися ионами пучка. Рабочая область рекуператора представляет собой обращенный пло-

ский диод. В таком рекуператоре естественны проблемы с ограничением по плотности тормозящегося тока, так как при выполнении условия (3.19) образуется виртуальный анод. КПД такого рекуператора из-за конечной прозрачности сетки не превышает 0,6 – 0,7. Проблему представляет также теплосъем с сетки.

Бессеточный рекуператор показан на рис. 3.106. Форма электрода, на который подается запирающий электроны потенциал  $\varphi_2$ , повторяет форму огибающей нескомпенсированного расходящегося пучка. КПД такого рекуператора для моноэнергетического пучка может быть близок к предельному, задаваемому выражением

$$\eta_{\text{рек}} = \frac{e\varphi_k}{W_0} < \frac{W_0 - \Delta W}{W_0},$$

где  $\Delta W$  – разброс ионов в пучке по энергиям.

Для прямого преобразования энергии немонотонных пучков (например, как было показано, из источника ионов водорода извлекаются не только атомарные, но и молекулярные ионы, которые при диссоциации на остаточном газе порождают ионы с энергией, равной половине начальной и равной одной трети от начальной) на кафедре физики плазмы МИФИ был разработан рекуператор в виде системы скошенных диафрагм (рис. 3.107).

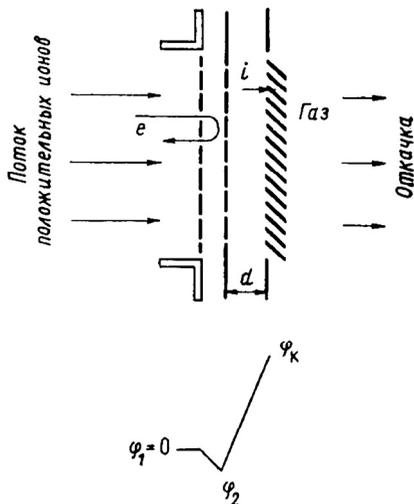


Рис. 3.105. Электростатический рекуператор с сеткой

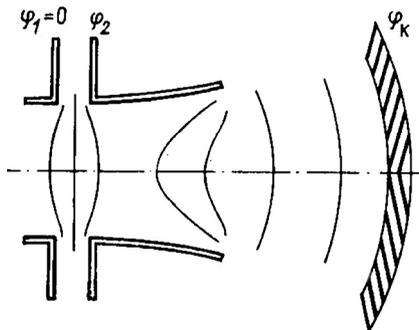


Рис. 3.106. Трехэлектродный бессеточный рекуператор

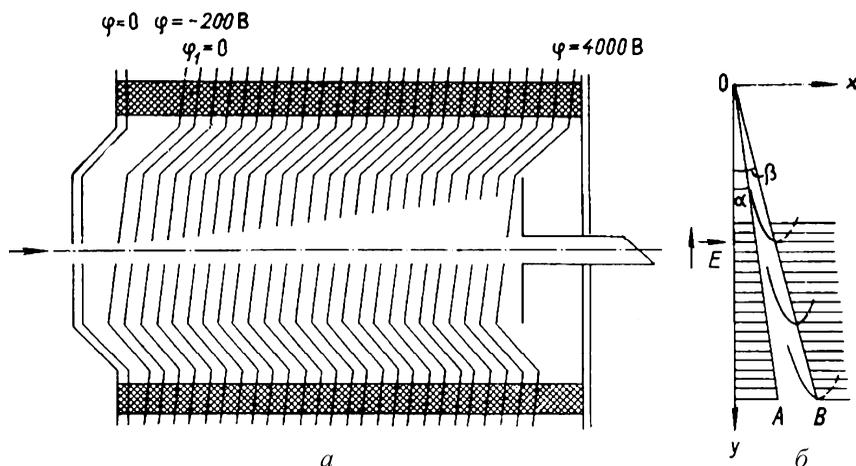


Рис. 3.107. Рекуператор со скошенными диафрагмами (а) и траектории ионов в ней (б)

Этот рекуператор рассчитан на тонкий пучок в пренебрежении объемным зарядам. При равномерной подаче на электроды тормозящей разности потенциалов в зазоре наряду с вектором силы, тормозящей ионы, возникает перпендикулярное электрическое поле, отклоняющее ионы с соответствующей энергией на «нужный» электрод. Идея торможения такого пучка уже рассматривалась (см. рис. 3.5). В идеальном случае при условии  $\text{tg} \beta = 2 \text{tg} \alpha$  ( $\beta$  – угол среза по вершинам парабол,  $\alpha$  – угол скоса диафрагм):

$$\eta_{\text{рек}} = 1 - \frac{W_x}{W_0} \sin^2 \alpha.$$

В реальной ситуации расходящегося пучка с учетом распределения плотности тока в нем КПД такой системы может быть очень высоким (для пучка с равномерной плотностью тока по сечению и углом расходимости пучка  $\sim 4^\circ$   $\eta_{\text{рек}} = 0,95$ ).

### 3.11. Плазменные источники электронов

Плазменные источники электронов обладают рядом специфических свойств, которые в некоторых случаях делают их применение более предпочтительным по сравнению с источниками с накаливаемыми катодами. Плазменные источники дают более высокую

плотность эмиссионного тока, они удобнее при работе в импульсном режиме, могут работать при более высоком давлении газов, чем термокатоды, которые при высоком давлении быстро разрушаются ионной бомбардировкой за счет физического (или химического) распыления. Кроме того, плазменные катоды позволяют получать пучки большего сечения.

Наиболее широко в качестве плазменных катодов используются тлеющие разряды с полым катодом, пеннинговские разряды или разряды цилиндрического магнетронного типа, а также дуговые разряды.

В отличие от положительных ионов, ускоряемых к стенке в двойном слое между плазмой и поверхностью эмиссионного электрода, электроны в этом слое тормозятся. Даже если разность между анодом и эмиссионным электродом равна нулю, электроны тормозятся в этом слое. При подаче ускоряющего электроны напряжения на коллектор и снижении тормозящего электроны барьера ток на коллектор возрастает, но это возможно только за счет уменьшения электронного тока на элементы окружающего плазму анода. В соответствии с соотношением Больцмана такое снижение тока возможно лишь за счет увеличения потенциала плазмы  $I_a \propto \exp[-e(\phi_{пл} - \phi_a)]$ . Ускорение электронов при отборе их из плазмы возможно при выполнении соотношения

$$G \frac{S_3}{S_3 + S_a} \leq 1,$$

где  $S_3$  – площадь эмиссионной поверхности;  $S_a$  – площадь поверхности всех электродов разряда, на которые могут уходить электроны;  $G$  – параметр, примерно равный отношению плотности специально не ускоряемой (хаотической) части тока электронов к плотности тока без отбора электронов из плазмы с целью формирования электронного пучка ( $G \approx 2 - 20$ ). Это условие следствие закона сохранения заряда – из плазмы нельзя извлечь больше электронов, чем в ней рождается, т.е. в разряде при излучении электронов происходит перераспределение токов вплоть до равенства извлекаемого тока току разряда (ионная составляющая не превышает нескольких процентов). Влияние извлечения электронов из плазмы помимо повышения ее потенциала сопровождается изменением плотности плазмы, тока разряда, появлению ВЧ-колебаний, неус-

тойчивому горению разряда. Поэтому в реальных источниках плазмы эмиссию производят через отверстия, сравнимые по размерам со слоем пространственного заряда у поверхности эмиссионного электрода (рис. 3.108). В результате эмиссия электронов происходит как с открытой плазменной поверхности в центре эмиссионного отверстия, так и на периферии через потенциальный барьер. Но так как эмиссия из плазмы без барьера много больше, то ток, эмитируемый каждым отверстием в соответствии с рис. 3.108, равен

$$I \approx j\pi(r_e - l_i)^2. \quad (3.61)$$

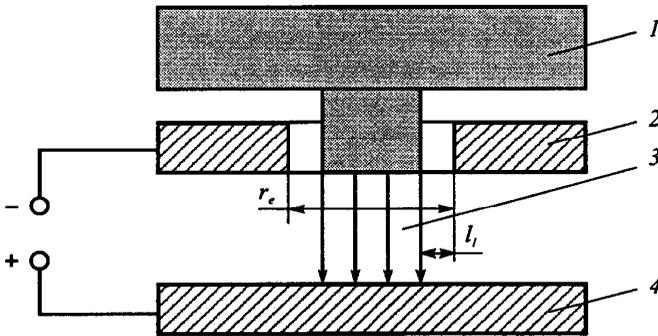


Рис. 3.108. Извлечение электронов из плазмы через эмиссионное отверстие с радиусом  $r_e$ : 1 – плазма; 2 – эмиссионный электрод; 3 – электронный пучок; 4 – ускоряющий электрод

Толщина двойного слоя  $l_i \equiv d$ , как и в случае эмиссии ионов, может быть оценена из равенства плотности тока на зонд, определяемой законом Бомы  $j = 0,4n(2kT/M)^{1/2}$  и законом Чайлда – Ленгмюра (3.19):

$$l_i \equiv d \approx \frac{0,3(\varphi_{пл} - \varphi_a)^{3,4}}{n^{1/2}(ekT)^{1/4}}. \quad (3.62)$$

Использование сеток или небольших отверстий с размерами, меньшими ширины двойного слоя, приводит к так называемой «слоевой стабилизации» эмиссии. Действительно, случайное увеличение тока эмиссии приводит к возрастанию потенциала плазмы относительно анода и в соответствии с (3.62) к увеличению шири-

ны двойного слоя. Но в этом случае ток эмиссии согласно (3.61) должен уменьшиться.

Управление эффективной площадью эмиссионной поверхности и, соответственно, извлекаемого тока можно осуществить подачей на эмиссионный электрод отрицательно относительно анода смещения.

На рис. 3.109 приведена схема источника, формирующего мощный электронный пучок для обработки материалов из дугового разряда с полым катодом, а на рис. 3.110 дан его внешний вид.

### 3.12. Компенсация объемного заряда ионных пучков

Различные способы компенсации объемного заряда ионного пучка приведены на рис. 3.111.

*Компенсация на газе.* В пучке положительных ионов с концентрацией  $n_{\text{п}}^+$  и скоростью частиц  $v_{\text{п}}$  в единицу времени образуется  $n_e^+ = n_{\text{п}}^+ v_{\text{п}} n_a \sigma_e^i$  электронов, где  $n_a$  – концентрация нейтральных атомов;  $\sigma_e^i$  – сечение ионизации атомов ионами пучка. Одновременно с электронами в пучке образуются медленные положительные ионы с концентрацией

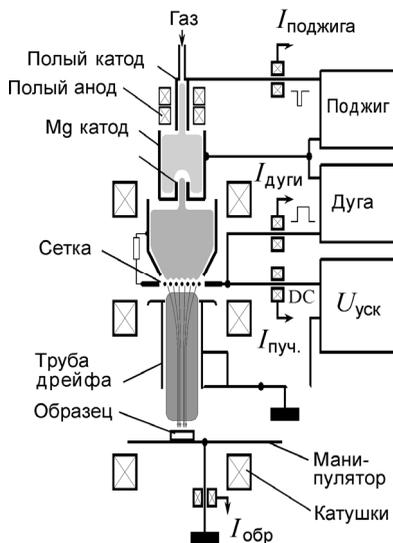


Рис. 3.109. Схема электронного источника с плазменным эмиттером



Рис. 3.110. Источник электронов с плазменным катодом

$n_i^+ = n_{\text{п}}^+ \gamma_{\text{п}} n_a \sigma_i^+$ , где  $\sigma_i^+$  – суммарное сечение образования положительных ионов за счет ионизации ионным ударом и перезарядки.

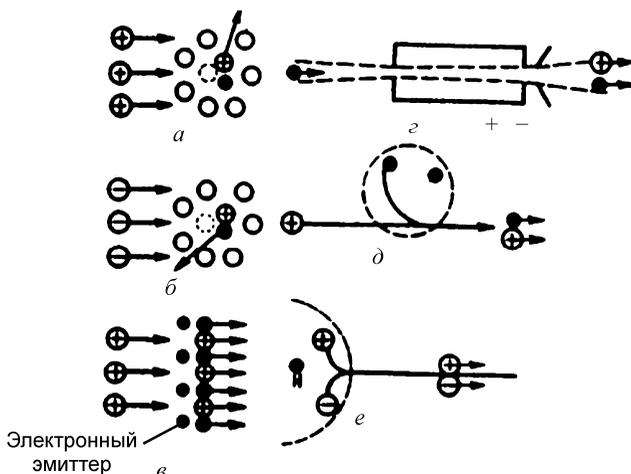


Рис. 3.111. Схематическое изображение способов компенсации объемного заряда ионных пучков: *a* и *б* – газовая компенсация пучков положительных и отрицательных ионов соответственно; *в* – образование синтезированного ион-электронного пучка с помощью термоэлектронного эмиттера; *г* – образование синтезированного пучка при прохождении электронного пучка через ионный источник; *д* – совмещение ионного и электронного пучков с помощью магнитного поля; *e* – образование ион-ионного пучка совмещением компонентов в магнитном поле

Как ранее было показано, из-за наличия положительного объемного заряда в пучке радиусом  $r_0$  образуется потенциальная яма глубиной  $\Delta\phi = en_{\text{п}}\pi r_0^2$ , которая выталкивает медленные ионы и, наоборот, аккумулирует электроны, от этого потенциал пучка понижается, но так как накопление положительных ионов происходит и за счет перезарядки, при которой электроны не образуются, то скорость образования положительных ионов всегда больше скорости образования электронов.

В пучке отрицательных ионов за счет накопления в отрицательной потенциальной яме положительных ионов возможна перекомпенсация заряда пучка (рис. 3.112), что может привести к самофокусировке такого пучка.

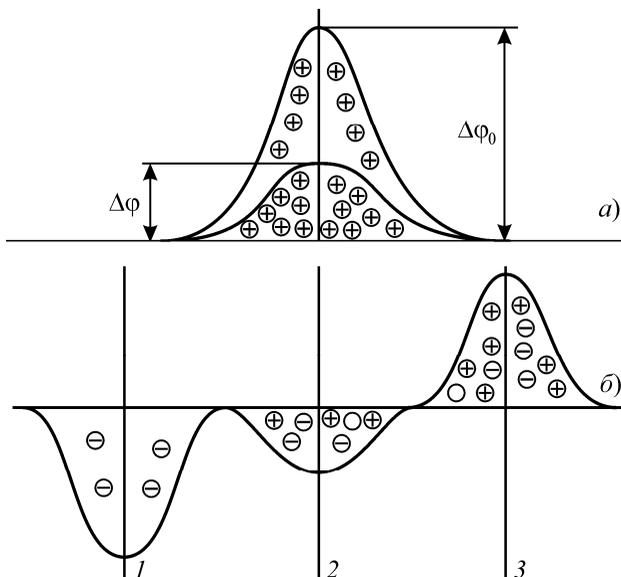


Рис. 3.112. Радиальные распределения потенциала в пучке положительных ионов до компенсации и после нее (а), а также в пучке отрицательных ионов при различных давлениях газа в ионопроводе (б): 1 – распределение потенциала в высоком вакууме; 2 – распределение потенциала при большом давлении; 3 – распределение потенциала при дальнейшем увеличении давления газа, когда произошло обращение знака потенциала

В условиях высокого вакуума газовая компенсация невозможна, поэтому компенсацию можно осуществить иным способом, а именно: вносить извне заряды противоположного знака. Широко используется так называемый *синтезированный пучок*, состоящий из взаимопроникающих пучков ионов и электронов, движущихся в одном направлении. При равенстве концентраций и скоростей компонент не только осуществляется компенсация объемного заряда, но и обеспечивается равенство нулю общего тока. Последнее необходимо, например, в том случае, когда испускаемый ионный пучок служит для создания реактивной тяги. Для того, чтобы движимое изолированное тело не заряжалось, оно, кроме ионов, должно в равном количестве испускать и электроны. В противном случае тело приобрело бы отрицательный потенциал и перестало испускать ионы.

Такие синтезированные пучки можно создать с помощью накачиваемых эмиттеров электронов, расположенных на пути ионного пучка (см. рис. 3.111, в). Другой способ получения — пропускание сформированного и ускоренного электронного пучка через источник ионов (см. рис. 3.111, з), или совмещение ускоренного электронного пучка с ионным при помощи магнитного поля (см. рис. 3.111, д).

Транспортировке ионного пучка можно способствовать, совмещая его с электронным пучком с равной концентрацией объемного заряда, но с большим током. Собственное магнитное поле скомпенсированного электронного пучка вызывает его самосжатие, а взаимосвязь объемных зарядов разного знака обуславливает стягивание также и пучка положительных ионов.

Если внутри металлического ионопровода пролетает единичный короткий сгусток положительных ионов, он образует на своем пути электроны и медленные положительные ионы. Движущаяся потенциальная яма, образуемая пролетающим сгустком, может захватывать электроны, компенсирующие объемный заряд сгустка, и тогда потенциал последнего понижается. Газовая компенсация сгустков положительных ионов облегчается, когда они следуют один за другим с достаточной частотой, и созданы условия для накопления в ионопроводе медленных ионов и электронов. Благоприятное действие ионов состоит в том, что они сами медленно уходят на стенки и своим объемным зарядом удерживают электроны до прихода захватывающего их очередного сгустка быстрых ионов. Компенсацию сгустков положительных ионов можно улучшить, располагая на их пути эмиттеры электронов.

В плазме пучка под его действием может происходить возбуждение электронных колебаний, которые потом "подпитываются" пучком. Амплитуда электронных колебаний ограничена следующим эффектом. Движущаяся со скоростью, близкой к скорости ионного пучка  $v_{\Pi}$ , волна, когда ее амплитуда достигает  $e\varphi_{\max} = Mv_{\Pi}^2/2$ , "сгребает" и захватывает с собой холодные компенсирующие электроны. Этот процесс идет с потерей энергии волны и ограничивает ее амплитуду. Если кулоновские столкновения ионных и электронных пучков приводят к выбросу последних преимущественно в радиальном направлении, то при возбуждении

коллективных колебаний электроны ускоряются преимущественно в направлении распространения пучка. Наряду с раскачкой электронных колебаний в пучках наблюдаются также ионные ленгмюровские колебания с характерной для них частотой. Для раскачки ионно-звуковых волн требуется резонансный пучок со скоростью, равной фазовой скорости этих волн. Поэтому медленный ионный пучок со скоростью ионного звука возбуждает в плазме продольные низкочастотные колебания.

Переменные электрические поля возбуждаемых колебаний приводят к разбросу поперечных скоростей ионов. Возбуждение электронных колебаний приводит также к нагреву электронного газа, способствующему декомпенсации ионного пучка, т.е. увеличению напряженности электрического поля.

### **3.13. Формирование импульсных пучков заряженных частиц**

Импульсные сильноточные ускорители электронов характеризуются формированием за короткие времена масштаба от микро- до пикосекунд токов в единицы мегаампер и при напряжениях до десятков мегавольт. Как правило, это – диодные системы, в которых электроны ускоряются до максимальных энергий при однократном прохождении приложенной разности потенциалов. При импульсной подаче напряжения за счет конечных времен развития пробоя и генерации вторичной плазмы возможно создание электрических полей на порядок больших, чем в стационарном случае. Источником электронов является взрывная эмиссия микроострий поверхности катода за счет их джоулева разогрева до образования плазмы. При этом плотности токов оказываются намного большими, чем возможно в стационарном случае. При энергии электронов более 0,5 МэВ говорят о релятивистских электронных пучках (РЭП).

В релятивистском случае решение уравнения Пуассона для плоского диода приводит к следующему выражению для закона Чайлда – Ленгмюра (3.19)

$$j_{3/2}^p[A/M^2] = j_{\text{ЧЛ}}^p \approx \frac{1,7 \cdot 10^4}{8\pi} \frac{1}{d^2} \left[ \int_0^{U_A} \frac{dU}{(2U + U^2)^{1/4}} \right]^2, \quad (3.61)$$

где  $U$  – безразмерный потенциал, выраженный в долях релятивистской энергии покоя электрона  $u = e\phi/m_e c^2$ . Строго говоря, эллиптический интеграл в (3.61) не соответствует «закону 3/2». В ультрарелятивистском случае плотность тока линейно зависит от ускоряющего (безразмерного) потенциала  $U_A$ :

$$j_{\text{ЧЛ}}^p[A/M^2] \approx \frac{1,7 \cdot 10^4}{2\pi} \frac{U_A}{d^2}.$$

При наличии в диоде биполярного потока (электронов и ионов) за счет частичной компенсации объемного заряда значение плотности тока увеличивается для нерелятивистского случая в 1,86 раза. В релятивистском случае плотность тока ионов в биполярном режиме связана с плотностью электронного тока выражением:

$$j_i = j_e \sqrt{\frac{Z_i m_e}{M_i}} \cdot \sqrt{1 + \frac{U}{2}}.$$

## СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Курнаев В.А., Машкова Е.С., Молчанов В.А. Отражение легких ионов от поверхности твердого тела. – М.: Энергоатомиздат, 1985. – 192 с.
2. Писарев А.А. Захват ионов водорода в металлы: учебное пособие. – М.: МИФИ, 2006. – 45 с.
3. Распыление твердых тел ионной бомбардировкой / Под ред. Р. Бериша, пер. с англ. под ред. Е.С. Машковой. М.: Мир, 1984, вып. 2; 1988, вып. 3 (под ред. Р. Бериша и К. Витмарка), 1998.
4. Беграмбеков Л.Б. Основы физических процессов в твердом теле под действием ионов и плазмы: учебное пособие. – М.: МИФИ, 2008. – 244 с.
5. Курнаев В.А. Взаимодействие плазмы с поверхностью: учебное пособие. – М.: МИФИ, 2003. – 112 с.
6. Диденко А.Н., Курнаев В.А. Взаимодействие плазмы с конденсированным веществом: Энциклопедия низкотемпературной плазмы / Под ред. В.Е. Фортова. – Вводный том III. – М.: Наука, 2000. – С. 6–13.
7. Nuclear fusion research. Understanding plasma surface interactions / Eds. R.E.H. Clark, D.H. Reiter, Springler Berlin Heldenberg. – New York, 2005. – 461 p.
8. Методы анализа поверхности / Ред. А. Зандерна; пер. с англ. – М.: Мир, 1979. – 582 с.
9. Димитров С.К. Генерация и торможение пучков, заряженных частиц: учебное пособие. – М.: МИФИ, 1990. – 80 с.
10. Протасов Ю.С., Чувашев С.Н. Физическая электроника газоразрядных устройств. – М.: Изд-во МГТУ им. Баумана, ч. I, 1992. – 464 с., ч. II, 1993, 736 с.
11. Энциклопедия низкотемпературной плазмы / Под ред. В.Е. Фортова. – Вводный том III. – М.: Наука, 2000. – С. 66–92.
12. Райзер Ю.С. Физика газового разряда. М.: Наука, 1992. – 536 с.
13. Форрестер А.Т. Интенсивные ионные пучки. – М.: Мир, Пер. с англ. под ред. Н.Н. Семашко. – М.: Мир, 1992. – 358 с.
14. Браун Я. и др. Физика и технология источников ионов / Пер. с англ. под ред. Е.С. Машковой. – М.: Мир, 1998. – 496 с.

15. Морозов А.И. Введение в плазмодинамику. – М.: Физматлит, 2006. – 576 с.
16. Диденко А.Н., Лигачев А.Е., Куракин И.Б. Воздействие пучков заряженных частиц на поверхность металлов и сплавов. – М.: Энергоатомиздат, 1987. – 184 с.
17. Взаимодействие импульсных пучков заряженных частиц с веществом / В.И. Бойко, В.А. Скворцов, В.Е. Фортвов, И.В. Шамагин. – М.: Физматлит, 2003. – 288 с.
18. Вакуумная электроника. Ч. 1. Учебное пособие / А.Н. Диденко, Н.К. Никулин, Ю.С. Протасов, Г.Н. Фурсей. – М.: Изд-во МГТУ им. Баумана, 2008. – 608 с.
19. Месяц Г.А., Яландин М.И. Пикосекундная электроника больших мощностей // Успехи физических наук. – 2005. – 175. – № 3. С. 226–246.
20. Григорьев А.Б., Курнаев В.А. Двухчастичные взаимодействия: электронное учебное пособие. – М.: МИФИ, 2003.

ДАННЫЕ ПО РАБОТЕ ВЫХОДА ПОВЕРХНОСТЕЙ ЧИСТЫХ  
МАТЕРИАЛОВ И МАТЕРИАЛОВ С ПОКРЫТИЯМИ

Таблица П.1.1

## Работа выхода поликристаллических металлов

Элемент	$\phi$ , эВ	Элемент	$\phi$ , эВ	Элемент	$\phi$ , эВ
Li	2,38	Mo	4,3	Be	3,92
Ru	4,60	B	4,5	Rh	4,75
C	4,7	Pd	4,8	Na	2,35
Ag	4,3	Mg	3,64	Cd	4,1
Al	4,25	In	3,8	Si	4,8
Sn	4,38	K	2,22	Sb	4,08
Ca	2,80	Te	4,73	Sc	3,3
Cs	1,81	Ti	3,95	Ba	2,49
V	4,12	La	3,3	Cr	4,58
Ce	2,7	Mn	3,83	Hf	3,53
Fe	4,31	Ta	4,12	Co	4,41
W	4,54	Ni	4,50	Re	5,0
Cu	4,40	Os	4,7	Zn	4,24
Ir	4,7	Ga	3,96	Pt	5,32
Ge	4,76	Au	4,30	As	4,72
Hg	4,52	Se	4,72	Tl	3,7
Rb	2,16	Pb	4,0	Sr	2,35
Bi	4,4	Y	3,3	Th	3,30
Zr	3,9	U	3,3	Nb	3,99

Таблица П.1.2

Работа выхода поверхности  $W$ , покрытой  $Cs$ 

Грань	$\phi$ , эВ	Примечание
Поликристалл	1,71	Оптимальное покрытие
	1,80	Толстый слой
100	1,5	Оптимальное покрытие
	1,65	Толстый слой
	1,82	Монослойное покрытие
	2,06	Толстый слой
110	1,67	Оптимальное покрытие
	1,73	Толстый слой
	$2,07 \pm 0,01$	Монослойное покрытие
111	1,81	Оптимальное покрытие
	1,83	Толстый слой
112	1,75	Оптимальное покрытие
	1,85	Толстый слой

Таблица П.1.3

## Работа выхода поверхностей с оптимальным покрытием

Адсорбент — адсорбат	$\phi$ , эВ	Адсорбент — адсорбат	$\phi$ , эВ
Be—Cs	1,94	Pt—O	6,55
C—Cs	1,37	Pt—Na	2,10
Ti—Cs	1,32	Pt—K	1,62
Cr—Cs	1,71	Pt—Pb	1,57
Fe—Cs	1,82	Pt—Cs	1,38
Ni—Cs	1,37	Pt—Ba	1,9
Cu—Cs	1,64	Pt—Ba	3,28
Cu—Ba	3,35	Au—O	6,46
Ge—Ba	2,2	Au—O	5,66
Zr—Cs	3,93	Au—Ba	2,3
Mo—Cs	1,54	Au—Ba	3,35
Mo—Th	2,58	W—O—Na	1,72
Ag—Ba	1,56	W—O—K	1,76
Hf—Cs	3,62	Сталь	1,41
Ta—Cs	1,1	12X18H9T—Cs	
Ta—Cs	1,6	Сталь 304—Cs	1,52
W—Li	2,18	Ag <sub>2</sub> O—Cs	0,75
W—O	6,20	NbC—Cs	1,2
W—Ba	1,75	ZrC—Cs	1,60
W—La	2,2	MO <sub>2</sub> C—Cs	1,45
W—Th	2,63	Ta <sub>2</sub> C—Cs	1,4
Re—Cs	1,45	MoSi <sub>2</sub> —Cs	1,75
Re—Ba	2,3	TaSi <sub>2</sub> —Cs	1,47
Re—Th	2,58	WSi <sub>2</sub> —Cs	1,47
Al—BaO	1,80	Ag—BaO	1,32
Ti—BaO	1,58	Ta—BaO	1,58
Cr—BaO	1,72	W—BaO	1,34
Fe—BaO	1,62	W—ThO <sub>2</sub>	2,5
Ni—BaO	1,35	Pt—BaO	1,71
Mo—BaO	1,39	Au—BaO	1,90
Mo—ThO <sub>2</sub>	2,9	LaB <sub>6</sub> —BaO	2,27—2,07

ЗНАЧЕНИЕ ПАРАМЕТРА  $Q$  ДЛЯ ВЫЧИСЛЕНИЯ КОЭФФИЦИЕНТА РАСПЫЛЕНИЯ  
ПО ФОРМУЛЕ БОДАНСКИ (2.16a)\*

<i>Мишень</i>	<i>Ион</i>		<b>H</b>	<b>D</b>	<b>He</b>	<b>C</b>	<b>O</b>	Саморас- пыление		
	$Z_1$									
	$M_1$									
	$eI, \text{эВ}$									
	$Z_2$	$M_2$	$e\phi, \text{эВ}$	$U, \text{эВ}$						
Бериллий	4	9	3,92	3,48	0,1	0,3	1,6	1,3	1,4	
Углерод	6	12	4,7	7,41	0,035	0,1	0,32	1,5	1,5	
Кремний	14	28	4,8	3,91	–	–	–	–	–	
Титан	22	48	3,95	4,34	–	–	–	–	–	
Железо	26	56	4,31	4,15	0,042	0,13	0,21	3,2	–	13
Медь	29	64	4,4	3,56	–	–	–	–	–	–
Молибден	42	96	4,3	6,9	0,007	0,045	0,12	0,93	–	18
Вольфрам	74	184	4,54	8,76	0,007	0,019	0,106	0,93	2,2	20

\* Приведены также значения атомных номеров и масс падающих частиц и их потенциалов ионизации и атомов мишени и значение работы выхода поверхности ( $e\phi$ ) и энергии связи атомов на ней ( $U$  (эВ)).