

Степанов Сергей Александрович

**ДИССИПАТИВНЫЕ ПРОЦЕССЫ В ВЫСОКООМНЫХ МАТЕРИАЛАХ
ПРИ ВЫСОКИХ УРОВНЯХ ЭЛЕКТРОННОГО ВОЗБУЖДЕНИЯ**

Специальность 01.04.07 – Физика конденсированного состояния

Автореферат диссертации
на соискание ученой степени
кандидата физико-математических наук

Работа выполнена в Федеральном государственном бюджетном образовательном учреждении высшего профессионального образования «Национальный исследовательский Томский политехнический университет»

Научный руководитель:

Штанько Виктор Федорович доктор
физико-математических наук, профессор

Официальные оппоненты:

Кригер Вадим Германович доктор
физико-математических наук, профессор,
Кемеровский государственный
университет, профессор кафедры химии
твердого тела

Пичугин Владимир Федорович доктор
физико-математических наук, профессор,
Национальный исследовательский
Томский политехнический университет,
заведующий кафедрой теоретической и
экспериментальной физики

Ведущая организация:

**ФГАОУ ВПО «Уральский федеральный
университет имени первого Президента
России Б. Н. Ельцина»** (г. Екатеринбург)

Защита диссертации состоится «27» июня 2013 года в 16⁰⁰ на заседании диссертационного совета Д 212.269.02 при ФГБОУ ВПО «Национальный исследовательский Томский политехнический университет» по адресу: 634034, г. Томск, ул. Усова, 7, корпус 8, ауд. 217.

С диссертацией можно ознакомиться в научно-технической библиотеке ФГБОУ ВПО «Национальный исследовательский Томский политехнический университет».

Автореферат разослан « » мая 2013 г.

Ученый секретарь
диссертационного совета



Коровкин Михаил Владимирович

ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

Актуальность темы

Накопление стабильных радиационных дефектов, определяющих изменение физических свойств материалов, является результатом сложной совокупности протекающих во времени процессов генерации, взаимодействия и распада электронных возбуждений и первичных структурных дефектов. Импульсные электронные пучки (ИЭП), генерируемые ускорителями с взрывной эмиссией, разработанные в ИСЭ РАН под руководством Г.А. Месяца и Б.М. Ковальчука, в сочетании с методами импульсной спектроскопии с временным разрешением позволили резко повысить информативность экспериментальных методов исследования радиационно-стимулированных процессов.

Возможность варьирования плотности энергии ИЭП позволяет исследовать механизмы рекомбинации неравновесных электронов и дырок в диэлектриках и полупроводниках в широком диапазоне мощности возбуждения. Результаты таких исследований были положены в основу разработки полупроводниковых лазеров с электронной накачкой, методов контроля излучательных свойств полупроводниковых монокристаллов, а также оптимизации технологии выращивания монокристаллов с высоким энергетическим выходом рекомбинационной люминесценции.

Специфика воздействия ИЭП заключается в том, что одновременно с выделением энергии вследствие ионизационных потерь с высокой скоростью ($\sim 10^{11}$ Кл/м³·с) инжектируется отрицательный заряд и, соответственно, формируется импульсное электрическое поле. В первых же работах по изучению оптических, акустических, электрических и механических свойств твердого тела при воздействии ИЭП высокой мощности обнаружен ряд новых явлений, которые практически невозможно наблюдать при исследованиях на слаботочных ($j_e \ll 1$ А/см²) импульсных ускорителях: внутризонное излучение электронно-дырочной плазмы, высокоинтенсивную люминесценцию с удельной плотностью мощности стимулированного излучения до 300 кВт/см², генерацию интенсивных продольных и изгибных акустических волн в пластинах и стержнях, мощную электронную эмиссию из диэлектриков в вакуум, хрупкое разрушение щелочно-галогенидных кристаллов и стекол, различные типы пробоя, в том числе и периодические структуры разрушения кристаллов. Несмотря на значительное внимание к проблеме преобразования энергии ИЭП в высокоомных материалах многие аспекты процессов, инициируемых при высоких плотностях энергии, изучены явно недостаточно.

Экспериментальные исследования механизмов диссипации энергии в высокоомных материалах в наносекундном диапазоне времен в условиях высокой плотности возбуждения сложны и трудоемки. Также отсутствуют надежные экспериментальные методики регистрации параметров импульсного электрического поля. В этом случае единственным методом, позволяющим лучше разобраться во всем многообразии и взаимосвязях экспериментальных фактов, является математическое моделирование.

При математическом моделировании процессов заряжения, автоэлектронной эмиссии и формы первичного акустического импульса были использованы

экспериментальные результаты, полученные с использованием в качестве источника возбуждения ИЭП.

В данной работе рассматриваются процессы воздействия на высокоомные материалы ИЭП с энергией электронов от 0.04 до 0.3 МэВ, для которых преимущественным механизмом потерь энергии является ионизационный, и длительностью импульса до 100 нс, при которой изменением профиля температур в области торможения пучка вследствие теплопроводности можно пренебречь. Флюенс энергии ИЭП ограничен пороговой плотностью энергии хрупкого разрушения материалов.

Расширение сферы использования ИЭП высокой плотности для исследования фундаментальных радиационно-стимулированных процессов в диэлектриках и полупроводниках, решения прикладных задач изучения процессов деградации сцинтилляционных материалов, оптимизации качества изготовления многослойных гетероструктур с квантовыми ямами, предопределяет актуальность установления и развития представлений о физике процессов энерговыделения в высокоомных материалах.

Цель работы

Изучение процессов диссипации энергии ИЭП в высокоомных материалах путем математического моделирования процессов торможения электронов, роли электрического поля инжектированного заряда в пространственно-временном распределении энергии и закономерностей развития термо- и автоэлектронной эмиссии.

Основные задачи исследования:

1. Разработка и реализация математической модели расчета пространственно-временного распределения энергии и заряда в высокоомных материалах при воздействии ИЭП.

2. Изучение пространственно-временной неоднородности профиля энерговыделения при воздействии на мишень ИЭП переменной плотности с учетом тормозящего действия электрического поля объемного заряда.

3. Расчет формы и амплитуды первичного термоакустического импульса сжатия-растяжения в рамках термоупругой теории напряжений в зависимости от параметров ИЭП, геометрии облучения и свойств материала.

4. Разработка и реализация феноменологической модели термо- и автоэлектронной эмиссии с учетом эффекта Шоттки и греющего действия электрического поля с облучаемой поверхности высокоомного материала в процессе воздействия ИЭП.

5. Расчет пространственно-временного распределения профиля температуры в области торможения ИЭП в высокоомных материалах при температурах облучения 20–400 К.

Научная новизна полученных результатов обусловлена разработкой математических моделей процессов заряжения, автоэлектронной эмиссии, формы и амплитуды первичного термоупругого импульса в рамках модели «однородного» заряжения образца при воздействии на него ИЭП переменной плотности, а также созданием компьютерных программ расчета этих моделей при различных начальных параметрах системы «ИЭП – образец».

Новыми результатами являются:

1. Сублинейная зависимость доли отраженных от образца электронов от величины эффективного заряда вещества.

2. Изменение спектра падающих электронов в геометрии облучения с вакуумным зазором приводит к неравномерному по глубине изменению пространственно-временного распределения удельной плотности поглощенной энергии.

3. Изменение пространственно-временного распределения удельной плотности поглощенной энергии в геометрии облучения с вакуумным зазором приводит к сублинейной зависимости амплитуды акустического импульса сжатия от величин плотности тока ИЭП.

4. Расчет пространственно-временного распределения температуры высокоомных материалов при облучении ИЭП в диапазоне температур 20–400 К.

5. Получена зависимость критической плотности тока ИЭП от энергии сродства к электрону и времени термализации горячих электронов, выше которой возникают высокочастотные колебания плотности тока автоэлектронной эмиссии.

Практическая значимость работы:

1. Изменение пространственно-временного распределения поглощенной энергии ИЭП при изменении геометрии облучения и плотности тока следует учитывать при изучении механизмов рекомбинации неравновесных электронов и дырок, а также выхода первичных структурных дефектов.

2. Явление автоэлектронной эмиссии с высокой эффективностью инициирует различные виды электрического пробоя: вакуумный разряд между диэлектриком и металлом, разряд по поверхности и объемный пробой диэлектрика. Результаты выполненного исследования позволяют не только прогнозировать поведение диэлектриков и полупроводников при облучении ИЭП, но и конструировать технологические установки таким образом, чтобы уменьшить опасность возникновения автоэлектронной эмиссии.

3. Полученные зависимости пространственно-временного распределения температуры в области торможения ИЭП необходимо учитывать при анализе механизмов излучательной рекомбинации в диэлектриках и полупроводниках, характеристических времен в затухании люминесценции и релаксации неустойчивого оптического поглощения, а также температурных зависимостей выхода первичных продуктов радиолиза.

4. Разработанные компьютерные программы могут быть использованы для расчета различных высокоомных материалов; программы разработаны с внедрением методик параллельных вычислений, а соответственно обладают малым временем расчета больших массивов данных, что делает их удобными для экспресс-анализа экспериментальных результатов.

Основные научные положения, выносимые на защиту:

1. Сложное пространственно-временное распределение ионизационных потерь энергии ИЭП в высокоомных материалах обусловлено спектром электронов, зависящим от времени, геометрии облучения и предыстории материала.

2. Сублинейная зависимость выхода люминесценции и амплитуды акустического импульса в высокоомных материалах от плотности тока ИЭП выше $\sim 150 \text{ А/см}^2$ обусловлена изменением спектра падающих электронов вследствие их торможения в электрическом поле инжектированного заряда и уменьшением доли поглощенной энергии пучка.

3. Энергия сродства к электрону и время термализации горячих электронов определяют пороговую плотность тока (энергии) ИЭП, вызывающую интенсивную автоэлектронную эмиссию и последующие высокочастотные $\sim 10^{12}$ Гц колебания напряженности электрического поля на облучаемой поверхности и плотности эмиссионного тока.

Апробация работы

Основные результаты диссертации докладывались на следующих конференциях: Современные техника и технологии: Международная научно-практическая конференция студентов, аспирантов и молодых ученых (Томск, 2009; Томск, 2011); Фундаментальные и прикладные проблемы физики: VII Международной научно-технической конференции (Саранск, 2012); 3rd International Congress on Radiation Physics and Chemistry of Condensed Matter, High Current Electronics and Modification of Materials with Particle Beams and Plasma Flows (Томск, 2012); VIII Международная научная конференция «Радиационно-термические эффекты и процессы в неорганических материалах» (Томск, 2012).

Публикации

По теме диссертационного исследования автором опубликовано 9 работ, в том числе 4 статей в рецензируемых изданиях из перечня ВАК. Получено 2 свидетельства о государственной регистрации программы для ЭВМ № 2012611339 от 2.02.2012 г и № 2012616726 от 26.07.2012 г.

Объем и структура диссертации

Диссертация состоит из введения, 3 глав, заключения, приложения и списка литературы (135 наименований). Работа содержит 106 страниц основного текста, 27 рисунков, а также 9 страниц приложений.

ОСНОВНОЕ СОДЕРЖАНИЕ РАБОТЫ

Во введении обоснована актуальность темы исследований, сформулирована цель и основные задачи работы, положения, выносимые на защиту, показана научная новизна и практическая ценность полученных результатов.

В первой главе приводится обзор работ по современному состоянию проблем, обсуждаемых в диссертации. Приведен краткий обзор теоретических и экспериментальных результатов взаимодействия ИЭП с веществом. Рассмотрены основные каналы диссипации энергии ИЭП в материале. Проведен обзор применения компьютерного моделирования физических явлений. В завершение первой главы поставлены задачи диссертационной работы.

Во второй главе:

I. Методом Монте-Карло, в рамках модели «укрупненных» соударений с использованием углового распределения Мольер-Бете, рассчитано распределения инжектированных электронов в интервале энергий $E_0 = 0.04\text{--}0.3 \text{ МэВ}$.

В работе реализован вариант схемы «укрупненных» соударений, в котором используются следующие предположения:

- потери энергии на ионизацию непрерывные, без учета флуктуаций потерь энергии в слое Мольер (потери энергии детерминированы).
- потери энергии на тормозное излучение не учитываются, так как они много меньше потерь энергии идущей на ионизацию при $E < m_0 c^2$;
- используется угловое распределение Мольер-Бете.
- изменение энергии электронов под действием электрического поля объемного заряда, создаваемого термализованными в материале электронами, много меньше ионизационных потерь энергии электронов в веществе. Данное предположение хорошо выполняется для используемых в экспериментах параметров ИЭП.

Такой вариант схемы «укрупненных» соударений достаточно прост и широко используется в расчетах. В варианте с непрерывным замедлением розыгрышу подвергаются только углы (радиальный и азимутальный). Далее в соответствии с результатами розыгрыша определяется координата электрона.

Результаты численного интегрирования приведены на рис. 1. Поведение интегральной функции Мольер-Бете таково, что она быстро приближается к единице при увеличении значения аргумента. В этом случае практически равновероятные значения, расположенные в двух соседних ячейках, могут соответствовать двум существенно различным параметрам φ^* (например, при $\xi = 0.99$, $\varphi^* = 5$; $\xi = 1$, $\varphi^* = 10$), что приводит к недопустимой погрешности расчета. Поэтому описанный метод применяется дважды: рассчитывается 95 значений φ^* для случайных чисел в интервале ξ от 0 до 0.95 (95 ячеек массива) и дополнительно 50 значений φ^* в интервале ξ от 0.95 до 1.

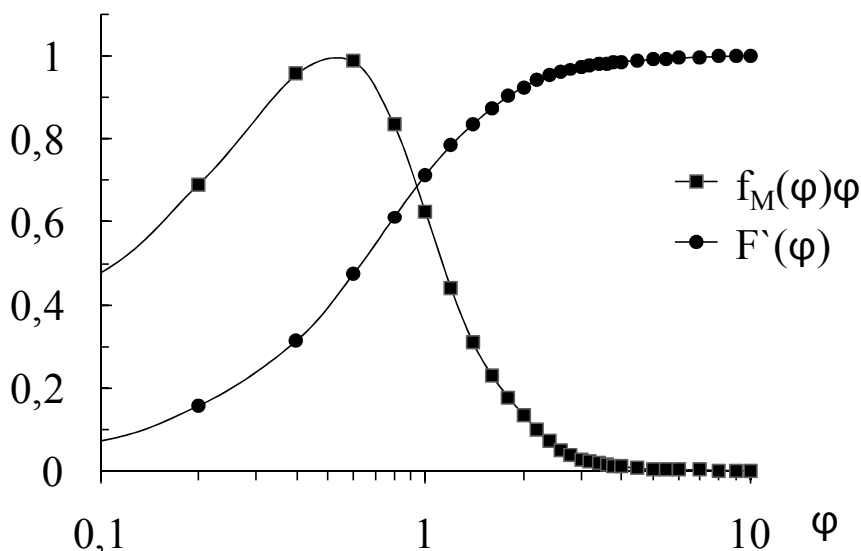


Рис. 1. Распределение функции $f_M(\varphi) \cdot \varphi$ и нормированное к 1 интегральное распределение Мольер-Бете $F(\varphi)$

Параметрами, которые необходимо задать до начала расчета пространственного распределения рассеянных электронов, являются: начальная энергия электрона (E_0); пороговая (минимальная) энергия рассеянного электрона

(E_n), при достижении которой прекращается расчет «истории» данного электрона; угол падения электрона на поверхность ($\vartheta_0 = 0$ при нормальном падении); коэффициент потерь энергии K_0 в слое Мольтер; координата поверхности (обычно $z_0 = 0$).

Далее реализуется следующая схема расчета:

1. Определяется «сброс» энергии ΔE_i электрона с энергией E_{i-1} при прохождении слоя Мольтер с номером i :

$$\Delta E_i = K_0 \cdot E_{i-1}, \quad \text{где } i = 0, 1, 2, \dots, k.$$

Коэффициент потерь энергии K_0 выбирается так, чтобы потери энергии в слое Мольтер были невелики ($K_0 < 0.1$) и в то же время число соударений n в слое не должно быть менее 10. Обычно выбирают в интервале $0.01 \leq K_0 \leq 0.1$. В расчетах принято $K_0 = 0.05$;

2. Определяется энергия рассеянного электрона $E_i = E_{i-1} - \Delta E_i$;

3. Энергия рассеянного электрона сравнивается с E_n (пороговой), при которой электрон считается остановившимся и его траектория заканчивается. Запоминается координата остановившегося электрона и начинается расчет траектории нового электрона;

4. Если $E_i > E_n$ (в нашем случае $E_n = 0.015$ МэВ), то производится расчет ионизационных потерь;

5. Определяется толщина слоя Мольтер Δt_i (в г/см²) из соотношения: $\Delta t_i = \Delta E_i / S_n(E_i)$;

6. Рассчитывается n – число столкновений электрона в слое Мольтер, а затем определяется параметр B : $B = 0.58 + 2.8 \cdot \lg(n)$;

7. Разыгрывается случайная величина ξ_1 и находится из обратного интегрального распределения Мольтер параметр φ^* . Рассчитывается угол χ_{ci} , а затем – радиальный угол рассеяния θ_i ;

8. Генерируется вторая случайная величина ξ_2 и находится азимутальный угол рассеяния электрона $\psi_i = 2\pi \cdot \xi_2$, равномерно распределенный в интервале 2π ;

9. Вычисляется новое направление движения электрона ϑ_i ($i = 1, 2, 3, \dots, k$) после рассеяния: $\cos \vartheta_i = \cos \vartheta_{i-1} \cdot \cos \theta_i + \sin \vartheta_{i-1} \cdot \sin \theta_i \cdot \cos \psi_i$;

10. Глубина проникновения z_i электрона после прохождения i -го слоя Мольтер определяется из выражения:

$$z_i = \sum_{i=1}^k \Delta t_i \cos \vartheta_{i-1};$$

11. Проверяется выполнение условия $0 < z_i < d$, где d – толщина образца. Если $z_i < 0$ (электрон вышел обратно из образца, т.е. отразился) или $z_i > d$ (электрон прошел весь образец и вылетел из него), то моделирование траектории заканчивается. В противном случае энергия E_i и угол ϑ_i становятся входными параметрами для следующего слоя Мольтер.

Расчеты пространственного распределения инжектированных электронов при воздействии ИЭП были выполнены методом Монте-Карло для ряда кристаллических и полимерных материалов. Для каждой энергии электронов из дискретного набора энергий в пределах спектра ИЭП определялось

пространственное распределение инжектированных электронов путем розыгрыша истории 10^6 электронов, падающих нормально к поверхности образца. Толщина образца выбиралась равной длине максимального экстраполированного пробега электронов R_0 в данном материале. Одновременно определялось количество (доля) отраженных электронов γ_0 .

Анализ результатов расчета показал, что для исследованного ряда материалов, в пределах погрешности методики расчета ($\leq 10\%$), пространственное распределение инжектированных электронов в приведенных координатах $\tau = z/R_0$ практически не зависит от начальной энергии электронов ИЭП в пределах 0.04–0.3 МэВ.

В качестве примера на рис. 2 приведены кривые распределения в кристалле KCl для 4 значений энергии падающих электронов.

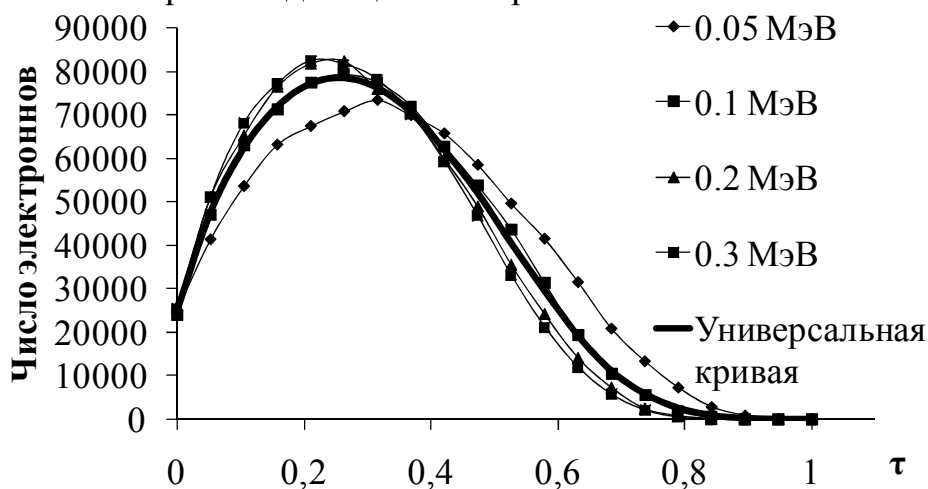


Рис. 2. Распределение инжектированных электронов в KCl при различной энергии падающих электронов E_0

Таким образом, в приведенных координатах $\tau = z/R_0$, для каждого материала существует универсальная, нормированная в максимуме к 1, кривая распределения инжектированных электронов (рис. 3), зависящая только от свойств данного вещества ($\rho, \bar{Z}, \bar{A}, I_{cp}$).

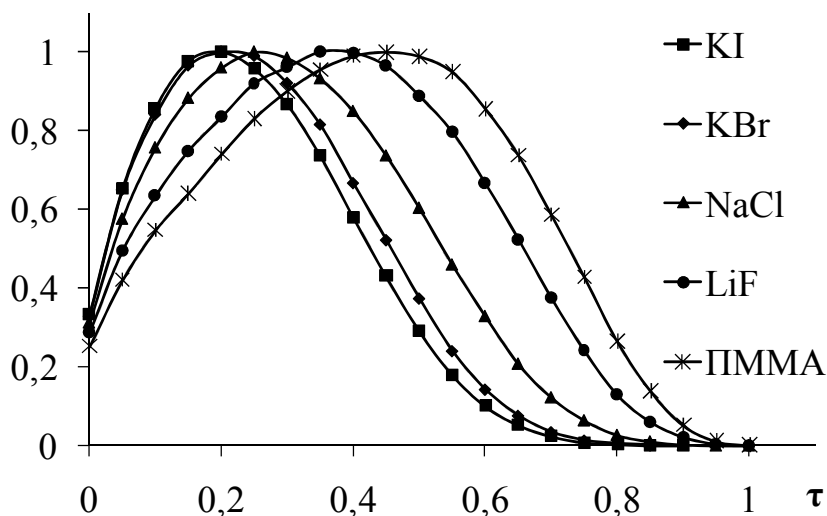


Рис. 3. Пример универсальных кривых распределения инжектированных электронов

Часть электронов пучка в результате рассеяния выходит из объема вещества в обратном направлении, т. е. отражается. По результатам расчета методом Монте-Карло нами определена доля отраженных электронов γ_0 для веществ с различным эффективным зарядом $\bar{Z}$.

Оказалось, что величина γ_0 имеет сублинейную зависимость от $\bar{Z}$ (рис. 4). В тоже время зависимость γ_0 от E_0 очень слабая. Расчеты показали, что разброс значений γ_0 в пределах интервала энергий падающих электронов 0.04–0.3 МэВ не превышает 10 %, что находится в пределах погрешности расчета в модели Мольер-Бете. Следовательно, можно принять, что $\gamma_0(E_0) \approx \text{const}$ для каждого вещества при $0.04 < E_0 < 0.3$ МэВ.

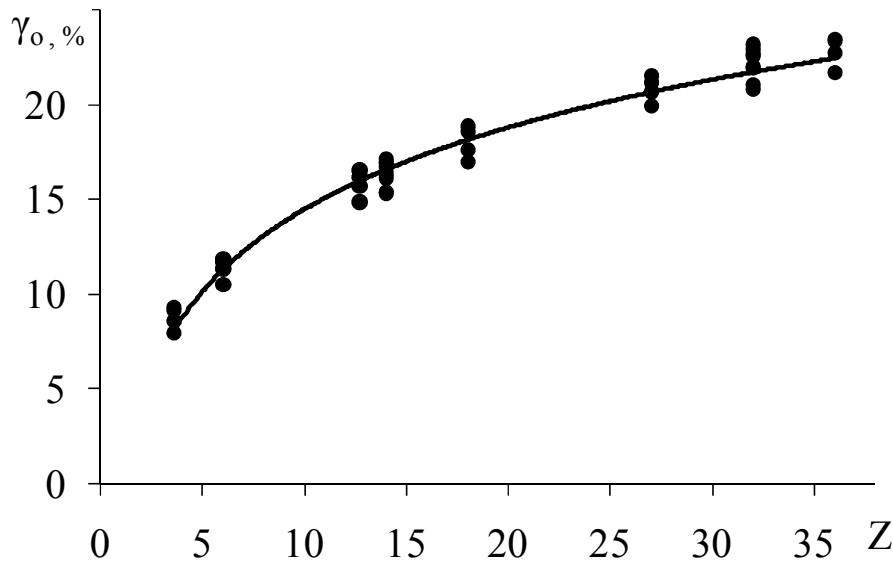


Рис. 4. Зависимость доли отраженных от образца электронов γ_0 от величины эффективного заряда вещества $\bar{Z}$

II. Приведен алгоритм расчета пространственно-временного распределения в материале: инжектированного заряда, поглощенной энергии, напряженности поля, динамических механических напряжений в зависимости от плотности энергии ИЭП произвольной формы, геометрии облучения и плотности тока ИЭП.

III. Разработана феноменологическая модель автоэлектронной эмиссии, возникающей в процессе действия ИЭП на материал. В математической модели учтено не только снижение потенциального барьера для электронов вещества за счет электрического поля объемного заряда, но также разогрев и изменение подвижности электронов в этом электрическом поле.

При моделировании и расчетах плотности тока АЭЭ и ТЭЭ были приняты следующие приближения.

1. Эмиссия электронов происходит из зоны проводимости.
2. В условиях высокой плотности возбуждения распределение электронов по энергии вблизи поверхности кристалла описывается функцией распределения Ферми-Дирака.
3. Предполагается отсутствие эмиссии из поверхностных состояний, т.к. плотность поверхностных состояний не превышает 10^{12} см^{-2} , а потенциальный барьер для таких переходов достаточно большой. Поэтому влияние поверхностных

состояний на плотность тока АЭЭ проявляется только при очень высоких электрических полях.

4. Расчет ведется в приближении «нулевого тока», что предполагает постоянство квазиуровня Ферми в кристалле ($F_e(x) = \text{const}$). Это приближение выполняется тем лучше, чем выше плотность возбуждения, т.е. чем выше концентрация неравновесных электронов в зоне проводимости.

5. Зависимость энергии носителей тока от квазиимпульса параболическая.

Алгоритм расчета плотности тока $j_{\text{АЭЭ}}(t)$ и других параметров системы.

1. Для момента времени t^n рассчитывалось распределение объемного заряда в образце $\rho(z, t^n)$ в результате протекания тока $j_o^n = j_e^n + j_{\text{АЭЭ}}^{n-1}$, где $j_{\text{АЭЭ}}^{n-1}$ – плотность тока АЭЭ, рассчитанная на предыдущем временном шаге t^{n-1} .

2. Методом прогонки решалось уравнение Пуассона и определялось $E^n(z)$.

3. На основании полученных значений $E^n(z)$ рассчитывалось значение напряженности электрического поля в вакууме вблизи поверхности образца $F^n = \varepsilon \cdot E^n$, а затем соответствующая этой напряженности поля плотность тока АЭЭ. Кроме того, определялись и другие параметры системы (энергия падающих на образец электронов, концентрация неравновесных электронов в образце, температура электронной подсистемы кристалла и т.д.)

4. Далее цикл расчетов повторялся для следующего временного шага $t^{n+1} = t^n + \Delta t$.

Шаг Δt определяется временем термализации горячих электронов и составляет, например, для $\text{CaF}_2 - 0,67 \cdot 10^{-12}$ с, $\text{LiF} - 2 \cdot 10^{-12}$ с, $\text{KCl} - 6 \cdot 10^{-12}$ с, $\text{NaCl} - 8 \cdot 10^{-12}$ с, $\text{KI} - 9 \cdot 10^{-12}$ с.

IV. На основе расчета пространственно-временного распределения поглощенной энергии разработан алгоритм расчета нагрева материала во время действия ИЭП.

V. Описана экспериментальная установка, приведены параметры импульсного электронного пучка, а также характеристики использованных в экспериментах материалов.

В третьей главе представлены результаты математического моделирования пространственно-временного распределения: поглощенной энергии, динамических механических напряжений, нагрева материала в зависимости от плотности тока ИЭП для ряда высокоомных материалов.

I. Математическое моделирование профиля энерговыведения

Учет спектрально-временных параметров ИЭП и геометрии облучения приводит к сложной пространственно-временной функции энерговыведения $W(z, t)$ в образце. На рис. 5 представлены зависимости $W(z, t)$ для кристаллов KI и LiF. В короткозамкнутой геометрии (КЗ) облучения временная зависимость удельной объемной плотности поглощенной энергии для приповерхностных слоев образца имеет сложный вид с несколькими максимумами (рис. 5, пунктирные кривые). По мере увеличения координаты z слоя распределение $W(z, t)$ приобретает колоколообразную форму. Максимальное значение $W(z, t)$ соответствует слою с $z \sim 50$ мкм для KI и $z \sim 150$ мкм для LiF и времени облучения $t \sim 10$ нс. Особо следует отметить тот факт, что с увеличением z уменьшается время облучения

слоя. Качественно подобные результаты получены для ряда исследуемых материалов. При этом если время облучения, соответствующее максимальному значению $W(z, t)$, примерно одинаково, то координата определяется характеристиками материала.

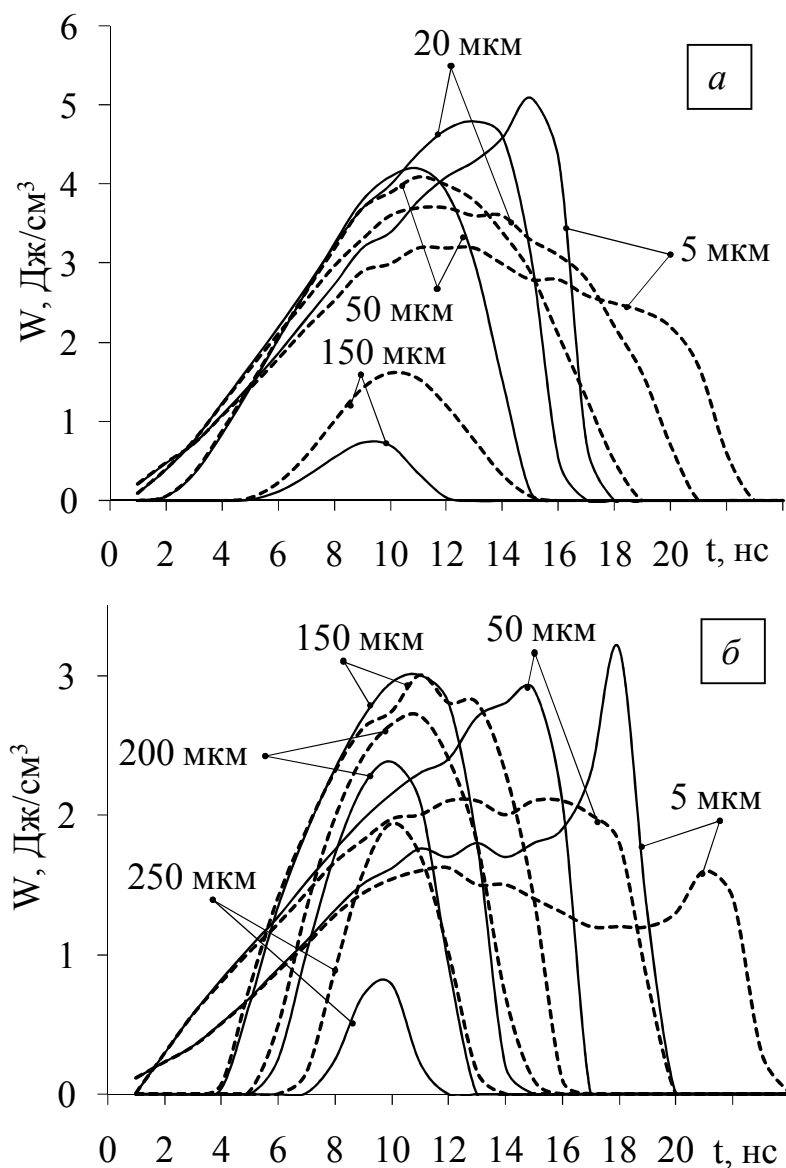


Рис. 5. Рассчитанные временные зависимости удельной плотности поглощенной энергии на различных расстояниях от облучаемой поверхности кристалла KI (а) и LiF (б) при величине вакуумного зазора (ВЗ) 1000 мкм (сплошные кривые) и короткозамкнутой геометрии (пунктирные кривые). Плотность тока пучка ИЭП 250 А/см²

Введение вакуумного зазора перед облучаемой поверхностью приводит как к уменьшению плотности поглощенной энергии W , так и изменению $W(z, t)$ (рис. 5, сплошные кривые). С увеличением величины зазора происходит неоднородное по координате z сокращение времени облучения. Поскольку эффект торможения наиболее сильно сказывается на низкоэнергетических электронах заднего фронта импульса, уменьшение времени облучения слоя вблизи

поверхности максимально. Увеличение относительной доли низкоэнергетических электронов вследствие эффекта торможения в вакуумном зазоре обеспечивает резкий рост объемной плотности поглощенной энергии в приповерхностной области образца, а также уменьшение времени облучения и $W(z, t)$ глубоких слоев.

II. Моделирование контура акустического импульса

Типичная динамика формирования профиля акустического импульса в короткозамкнутой геометрии облучения представлена на рис. 6. Напряжения растяжения соответствуют отрицательным значениям $I_{\text{АИ}}$. Из представленных данных видно, что при длительности импульса тока ИЭП 24 нс форма АИ на момент окончания импульса возбуждения отличается от профиля энерговыведения. Это связано с тем, что начиная со времени падения электронов с максимальной энергией (примерно половины длительности импульса) пробег электронов каждого следующего моноимпульса уменьшается, так как уменьшается их энергия. В то же время передний фронт импульса сжатия распространяется вглубь кристалла. Между максимумом импульса сжатия и облучаемой поверхностью образуется область нулевых напряжений, которая со временем облучения смещается вглубь кристалла. Координаты области нулевых напряжений и максимумов импульсов сжатия и растяжения на момент окончания ИЭП, рассчитанные для ряда исследуемых материалов, определяются тормозной способностью вещества и скоростью звука.

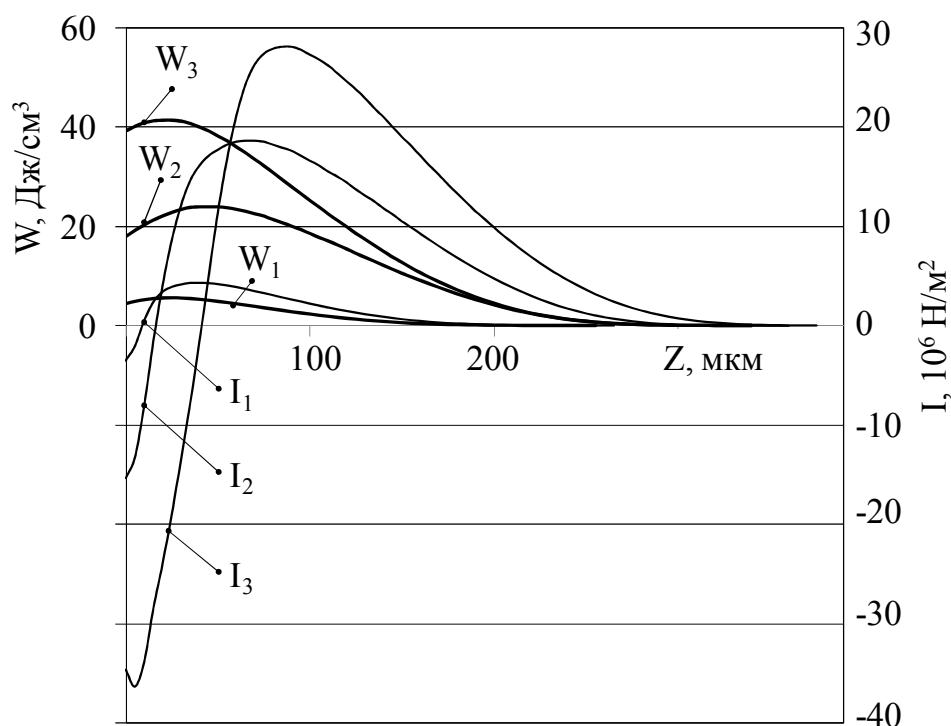


Рис. 6. Рассчитанные формы акустического импульса (I) и профили распределения поглощенной энергии (W) в кристалле KBr через 6 нс (W_1, I_1), 12 нс (W_2, I_2), 24 нс (W_3, I_3) от начала импульса облучения в короткозамкнутой геометрии облучения при плотности тока ИЭП 250 А/см^2

На рис. 7 представлены результаты расчета распределения плотности поглощенной энергии и формы АИ для фиксированной величины вакуумного

зазора при увеличении плотности тока ИЭП. Увеличение плотности тока ИЭП приводит к усилению эффекта торможения электронов пучка в электрическом поле инжектированного заряда. Наиболее сильное торможение испытывают электроны заднего фронта импульса тока. В результате уменьшается доля поглощенной энергии ИЭП, профиль ее распределения и, как следствие, изменение формы АИ.

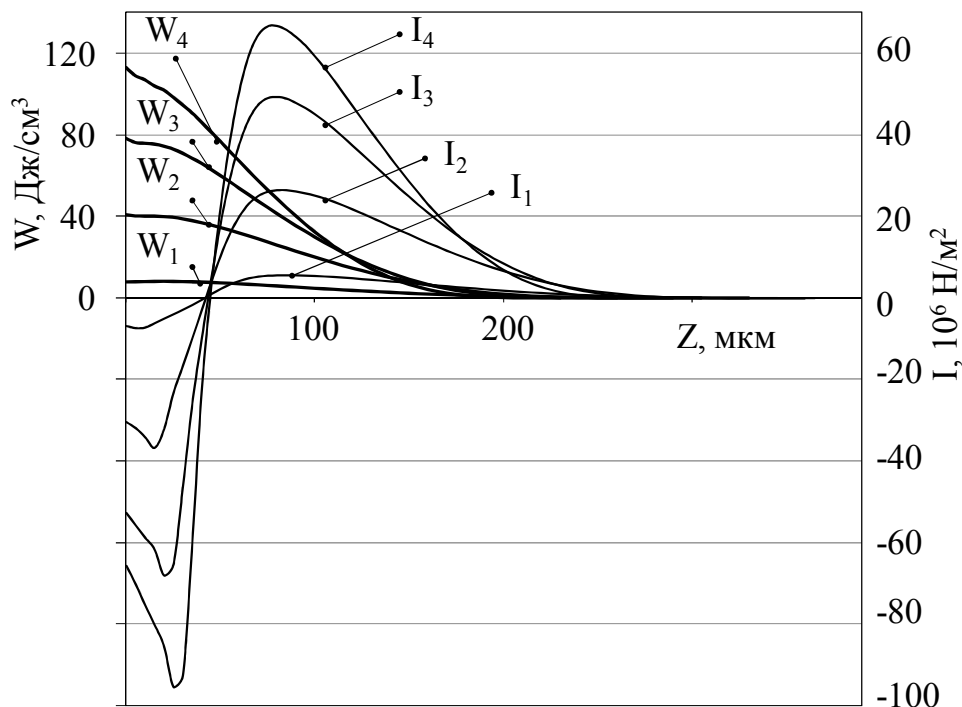


Рис. 7. Рассчитанные формы распределения плотности поглощенной энергии (W) и акустического импульса (I) в кристалле КВг на момент окончания воздействия ИЭП при величине вакуумного зазора 250 мкм и плотностях тока, А/см²: 1 – 50, 2 – 250, 3 – 500, 4 – 750

На рис. 8 представлены результаты расчета профиля поглощенной энергии и формы АИ при увеличении величины вакуумного зазора перед облучаемой поверхностью для фиксированной плотности тока ИЭП. Увеличение величины вакуумного зазора перед облучаемой поверхностью приводит как к уменьшению поглощенной энергии, так и к изменению профиля ее распределения. Это обусловлено усилением эффекта торможения электронов в поле инжектированного объемного заряда. Уменьшение поглощенной энергии сопровождается уменьшением амплитуд импульсов сжатия и растяжения и изменением формы АИ.

Для оценки эффективности влияния геометрии облучения на величину динамических механических были рассчитаны зависимости амплитуды АИ от величины плотности тока ИЭП при разных величинах вакуумного зазора. Результаты расчетов для КВг представлены на рис. 9. Из представленных результатов следует, что для материала характерна сублинейная зависимость амплитуды акустического импульса сжатия, наиболее сильно выраженная при больших зазорах. Качественно подобные зависимости характерны для всех исследованных материалов.

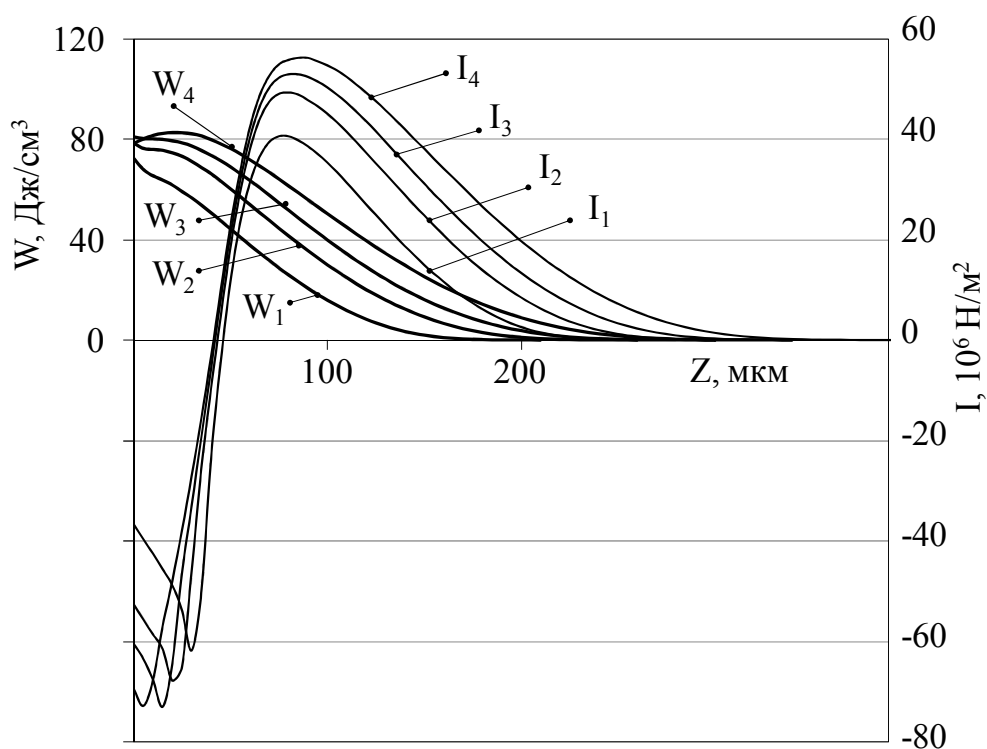


Рис. 8. Рассчитанные формы распределения плотности поглотенной энергии (W) и акустического импульса (I) в кристалле KBr на момент окончания воздействия ИЭП при плотности тока 500 А/см^2 и величине вакуумного зазора, мкм: 1 – 1000, 2 – 250, 3 – 100, 4 – 0

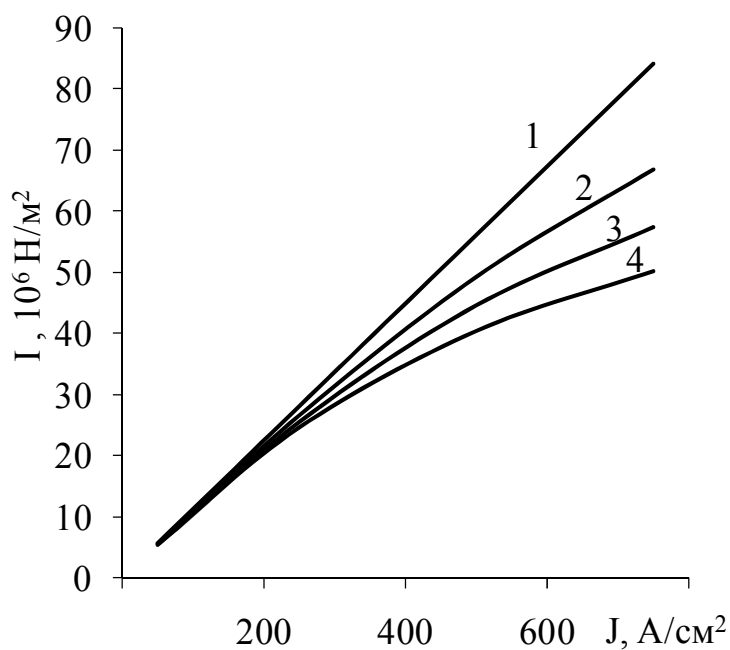


Рис. 9. Рассчитанные зависимости амплитуды АИ от плотности тока ИЭП для кристалла KBr при величине вакуумного зазора, мкм: 1 – 0, 2 – 250, 3 – 500, 4 – 1000

Представленные на рис. 10а результаты экспериментального изучения АИ свидетельствуют о том, что при низких плотностях возбуждения $W \sim 0.1 \text{ Дж/см}^2$ в

ЩГК формируется биполярный АИ. Амплитуда импульса сжатия несколько меньше амплитуды импульса растяжения, а расстояние между максимумами импульсов сжатия и растяжения зависит от параметров кристалла (тормозной способности вещества, скорости звука), что соответствует результатам расчетов. При облучении серией импульсов с плотностью энергии больше $\sim 0,2$ Дж/см² в форме АИ наблюдается появление тонкой структуры, заключающейся в возникновении дополнительных максимумов, наложенных на основной АИ, и общее удлинение импульса (рис. 10б).

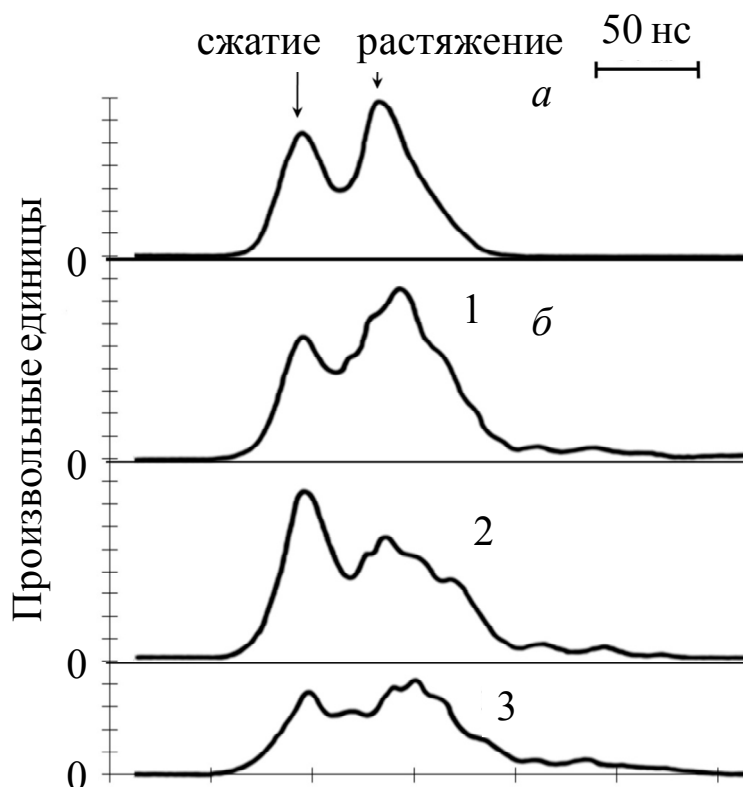


Рис. 10. Осциллограммы форм акустического импульса в КВг при вакуумном зазоре 300 мкм и плотностях энергии ИЭП, Дж/см²: *a* – 0,1, *б* – 0,35 (1,2,3 – импульсы облучения)

Обнаружено, что в первых импульсах облучения, как правило, возникновение тонкой структуры в форме АИ не сопровождается возникновением трещин или других видов разрушений в области торможения электронов. При этом амплитуда импульса сжатия остается ниже амплитуды импульса растяжения. При воздействии второго импульса облучения происходит некоторое увеличение амплитуды импульса сжатия, резкое уменьшение импульса растяжения с наложенной тонкой структурой, приводящей к увеличению общей длительности АИ, и образованию плоскостей раскола, параллельных облучаемой поверхности. Снижение амплитуды импульса растяжения прямо свидетельствует о том, что возникновение плоскостей раскола происходит во время облучения, что приводит к нарушению сплошности среды и условий формирования импульса растяжения. Увеличение амплитуды импульса сжатия во втором импульсе облучения (см. кривая 2, рис. 10б) обусловлено наложением на основной импульс сжатия акустического импульса, обусловленного развитием электрического пробоя в

первой половине импульса облучения. Снижение амплитуды импульса растяжения вызвано появлением плоскостей раскола в области торможения электронов. В третьем импульсе облучения торможение электронов происходит в области кристалла, содержащей плоскости расколов. Наличие плоскостей раскола приводит к наложению и многократному отражению волн сжатия и растяжения, что в итоге снижает амплитуды импульсов сжатия и растяжения в результирующем АИ, выходящем из области торможения электронов.

Экспериментально установлено, что отличие формы АИ, измеренной поляризационно-оптическим методом, от расчетной наблюдается при плотностях тока пучка выше некоторых пороговых значений.

III. Импульсный нагрев материалов в процессе облучения ИЭП

Расчет нагрева материала в области диссипации энергии ИЭП, проводился на основе полученного пространственно-временного распределения плотности поглощенной энергии.

На рис. 11 представлены рассчитанные зависимости ΔT в максимуме энергосвечения от начальной температуры (T_M) для кристаллов KBr, NaCl, LiF.

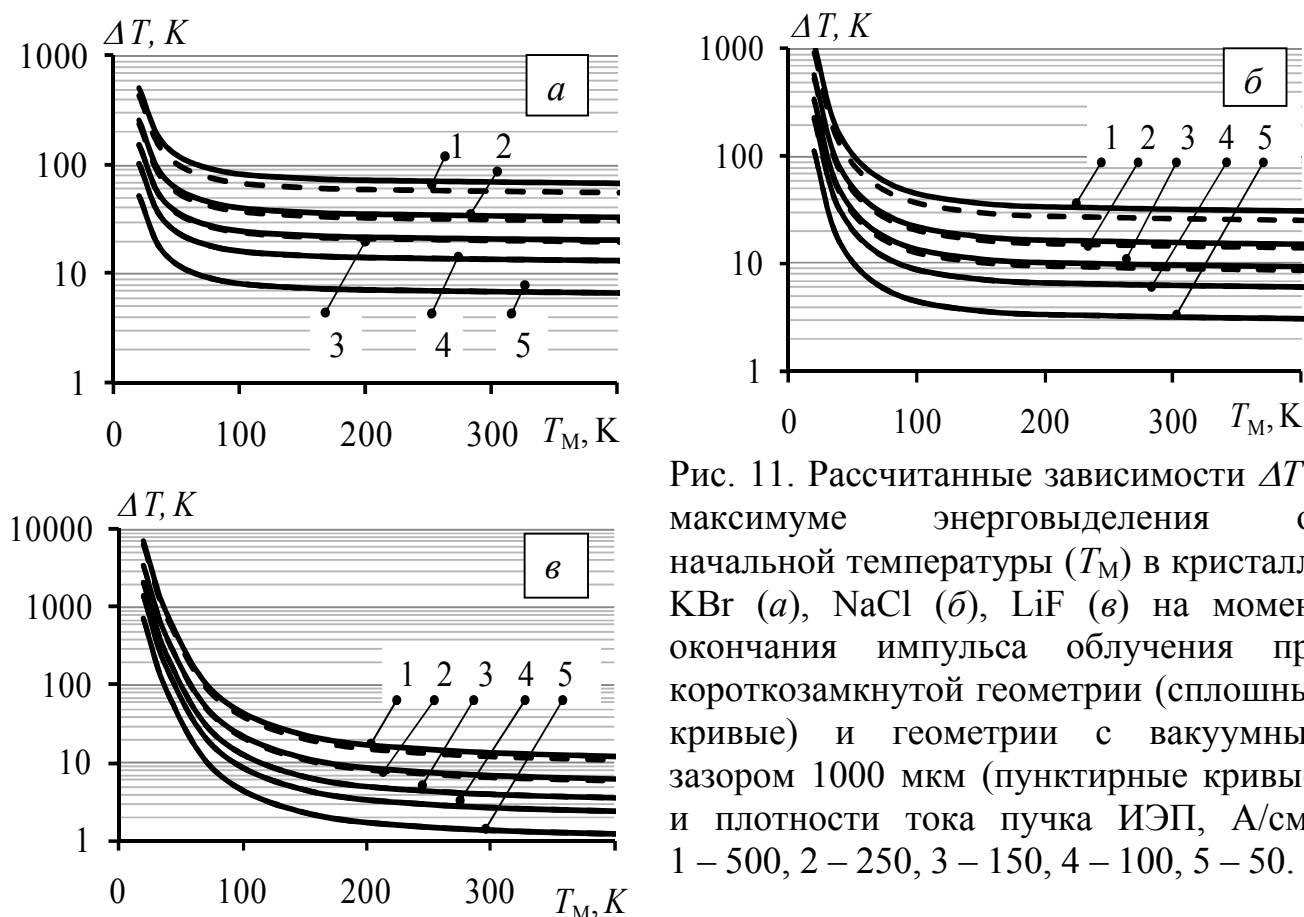


Рис. 11. Рассчитанные зависимости ΔT в максимуме энергосвечения от начальной температуры (T_M) в кристалле KBr (а), NaCl (б), LiF (в) на момент окончания импульса облучения при короткозамкнутой геометрии (сплошные кривые) и геометрии с вакуумным зазором 1000 мкм (пунктирные кривые) и плотности тока пучка ИЭП, А/см²: 1 – 500, 2 – 250, 3 – 150, 4 – 100, 5 – 50.

При геометрии с вакуумным зазором доля поглощенной энергии ИЭП уменьшается вследствие торможения электронов в электрическом поле инжектированного объемного заряда. Вследствие этого уменьшается ΔT в максимуме энергосвечения и профиль ее распределения в направлении падения ИЭП.

Результаты расчетов для ряда указанных выше материалов показали, что распределения роста температуры и ее максимальное значение определяются с одной стороны тормозной способностью вещества, с другой – удельной теплоемкостью. Например при плотности тока ИЭП 250 А/см^2 (рис. 11, кривая 2), ΔT при $T_M = 250 \text{ К}$ в максимуме энерговыделения в LiF составляет 7.5 К , в NaCl – 16.4 К , в KBr – 35 К . В первую очередь это связано с увеличением тормозной способности в ряду LiF, NaCl, KBr. С понижением T_M до 80 К в максимуме энерговыделения наблюдается сильное увеличение ΔT в кристалле LiF до 34 К , в NaCl – до 27 К , в KBr – до 45 К . При $T_M = 20 \text{ К}$ во всех кристаллах в максимуме энерговыделения наблюдается сильный рост ΔT : в LiF до $3.5 \cdot 10^3 \text{ К}$, в NaCl – до 560 К , в KBr – до 250 К . Значение ΔT при $T_M = 20 \text{ К}$ в кристаллах объясняется их малой удельной теплоемкостью (для LiF – $0.003 \text{ Дж/г}\cdot\text{К}$, для NaCl – $0.025 \text{ Дж/г}\cdot\text{К}$, для KBr – $0.058 \text{ Дж/г}\cdot\text{К}$).

Из приведенных результатов моделирования изменения температур кристалла во время облучения ИЭП, видно, что процесс сопровождается значительным изменением температуры кристалла, особенно при низких начальных температурах кристалла.

IV. Математическое моделирование автоэлектронной эмиссии

На основе феноменологической модели автоэлектронной эмиссии (АЭЭ) для «однородной» поверхности, проведен расчет плотности тока АЭЭ с облучаемой ИЭП поверхности образца в геометрии с вакуумным зазором.

На рис. 12 показано изменение ряда выходных параметров расчета в процессе импульса возбуждения на примере KCl (рис. 12а) и NaCl (рис. 12б) при малой плотности тока ИЭП. Результаты расчетов показывают, что спустя некоторое время (время задержки t_3) относительно начала облучения наблюдается резкий рост плотности тока $j_{\text{АЭЭ}}$ (рис. 12). Одновременно резко падает скорость нарастания напряженности электрического поля $E_{\text{вз}}$ у облучаемой поверхности. Из полученных результатов моделирования следует, что основным фактором, определяющим время задержки начала АЭЭ (t_3) является величина энергии сродства к электрону χ . Например, при равных прочих условиях ($T = 295 \text{ К}$, плотности тока ИЭП 7 А/см^2) в KCl ($\chi = 0.2 \text{ эВ}$) время задержки $t_3 \approx 4 \cdot 10^{-9} \text{ с}$, а в NaCl ($\chi = 0.9 \text{ эВ}$) $t_3 \approx 15 \cdot 10^{-9} \text{ с}$.

Как видно из результатов моделирования (рис. 12) плотность тока АЭЭ в процессе действия ИЭП не превышает плотности тока возбуждения. В этом случае к концу импульса возбуждения потенциал образца возрастает до значений, когда электроны ИЭП полностью тормозятся в поле кристалла (плотность тока возбуждения (j_e) падает практически до нуля).

Из результатов расчета, представленных на рис. 13, следует, что увеличение плотности тока ИЭП до 15 А/см^2 , приводит к уменьшению времени задержки развития АЭЭ. С увеличением времени наблюдается рост напряженности поля в зазоре и возникновение бифуркаций тока АЭЭ с частотой $\sim 10^{11} - 10^{12} \text{ Гц}$, при которых пиковые значения тока АЭЭ превосходят ток инжектируемых электронов.

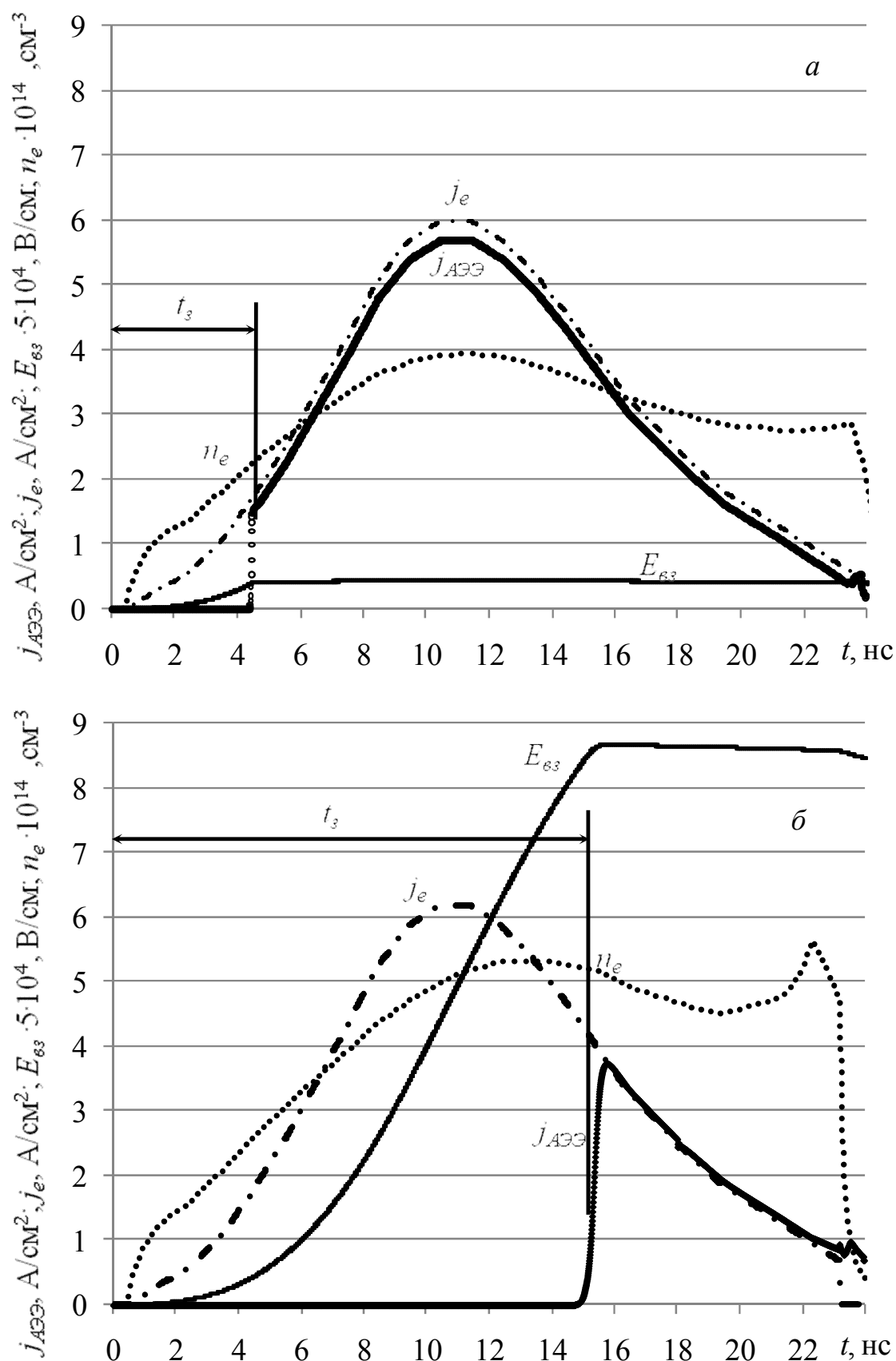


Рис. 12. Расчетные значения тока АЭЭ ($j_{AЭЭ}$), плотности тока возбуждения (j_e), концентрации неравновесных электронов в зоне проводимости (n_e), напряженности электрического поля у облучаемой поверхности ($E_{эз}$) для кристалла KCl (a) и NaCl (б) при плотности тока ИЭП $7 A/cm^2$

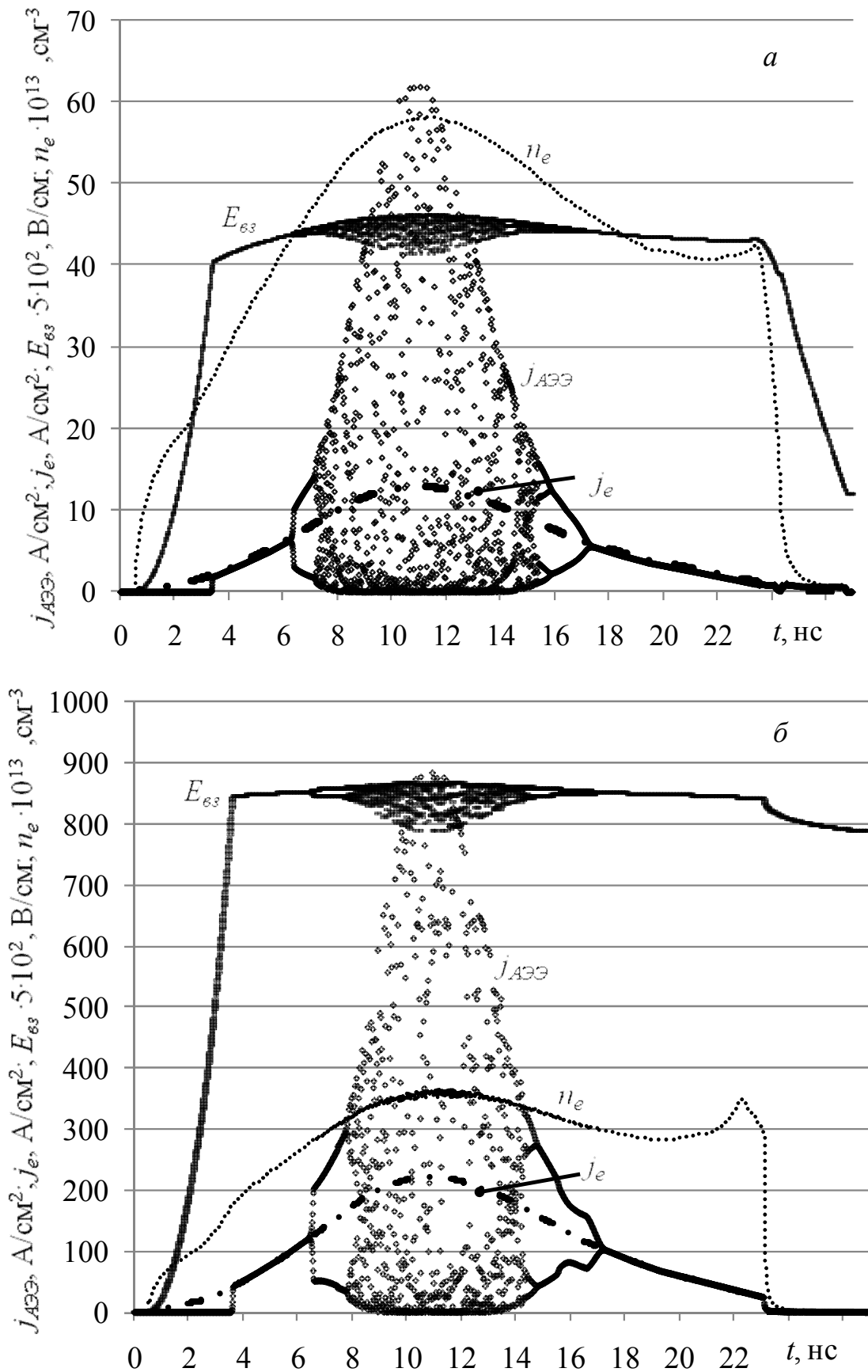


Рис. 13. Расчетные значения тока АЭЭ ($j_{AЭЭ}$), плотности тока возбуждения (j_e), концентрации неравновесных электронов в зоне проводимости (n_e), напряженности электрического поля у облучаемой поверхности ($E_{эз}$) для кристалла KCl (a) при плотности тока ИЭП $15 A/cm^2$ и NaCl (б) при плотности тока ИЭП $250 A/cm^2$

По мере дальнейшего увеличения времени действия ИЭП, когда напряженность электрического поля вблизи облучаемой поверхности и концентрация неравновесных электронов достигнут некоторых критических значений, частота колебаний электрического поля резко возрастает, что вызывает высокочастотные стохастические колебания тока АЭЭ, пиковые значения $j_{\text{АЭЭ}}$ начинают существенно превосходить плотность тока возбуждения j_e . После времени, соответствующего максимуму тока ИЭП, уменьшение частоты колебаний тока эмиссии и бифуркаций происходит в обратном порядке с последующим исчезновением $j_{\text{АЭЭ}}$.

Из полученных результатов моделирования следует, что основными факторами, определяющим момент возникновения высокочастотных колебаний плотности тока автоэлектронной эмиссии, является величина энергии сродства к электрону χ и время термализации горячих электронов ($t_{\bar{e}}$). Поэтому для построения зависимости представленной на рис. 14 было использовано отношение энергии сродства к электрону к времени жизни электрона в зоне проводимости.

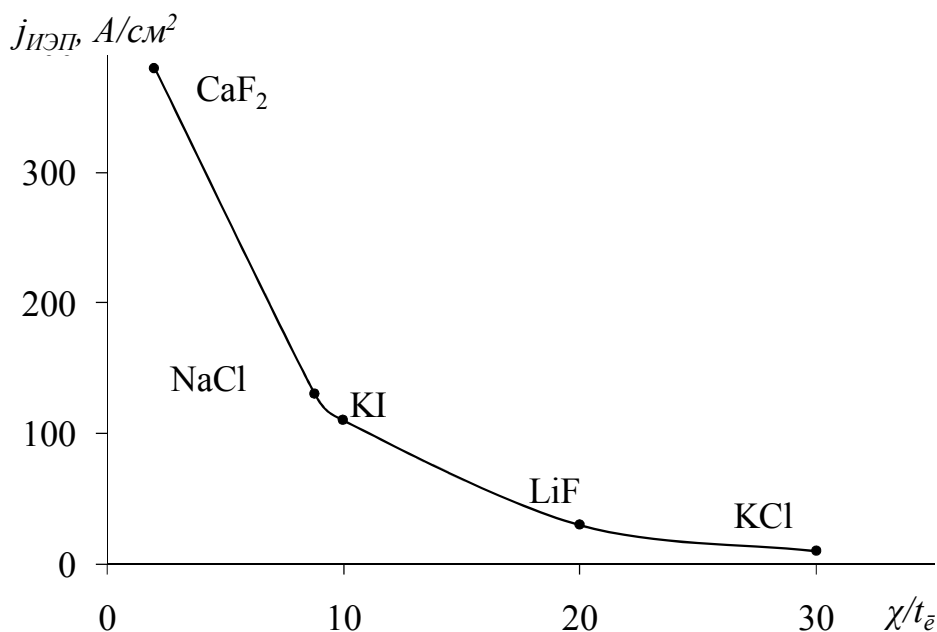


Рис. 14. Расчетная зависимость критической плотности тока ИЭП, выше которой возникают высокочастотные колебания плотности тока АЭЭ от $\chi/t_{\bar{e}}$

Данная зависимость качественно отображает устойчивость материала к электрическому пробую, что хорошо согласуется с экспериментальными результатами.

ОСНОВНЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ И ВЫВОДЫ

1. Разработаны модели расчета, реализованные в компьютерных программах математического моделирования пространственно-временного распределения заряда, энергии, акустического импульса распространяющегося в материале, плотности тока термо- и автоэлектронной эмиссии.

2. В результате модернизации программы математического моделирования для расчета распределения истории 10^6 инжектированных электронов в материале

и, соответственно, повышения точности расчетов, впервые получена сублинейная зависимость коэффициента отражения электронов от величины эффективного заряда вещества.

3. Разработанные компьютерные программы могут быть использованы для расчета различных высокоомных материалов в широком диапазоне изменения параметров ИЭП (плотности тока и длительности импульса до ~ 500 А/см² и ~ 100 нс соответственно) и геометрии облучения.

4. Математическое моделирование воздействия ИЭП на высокоомные материалы позволило показать, что геометрия облучения, характеристики пучка, а также свойства материала оказывают существенное влияние на формирование электрического поля инжектированного заряда и, как следствие, на пространственно-временное распределение поглощенной энергии.

5. Теоретически и экспериментально изучен профиль АИ, возбуждаемого в материалах воздействием ИЭП, его зависимость от плотности энергии и геометрии облучения. При низких плотностях энергии ИЭП (< 0.1 Дж/см²) и длительности импульса электронного пучка, сопоставимой с временем релаксации акустического импульса, АИ обусловлен в основном неоднородным импульсным нагревом области торможения электронов и представляет собой асимметричный биполярный импульс, разделенный зоной нулевых напряжений. Возникновение на фоне контура основного АИ тонкой структуры и увеличение ее вклада с увеличением плотности энергии ИЭП выше 0.1 Дж/см² в ВЗ геометрии обусловлено динамическими механическими напряжениями, вызванными локальным выделением энергии при развитии электроразрядных процессов. Наличие тонкой структуры АИ, наложенной на основной импульс сжатия, прямо свидетельствует о том, что электроразрядные процессы развиваются непосредственно во время облучения.

6. Показано, что изменение спектра электронов ИЭП в течение импульса облучения, вызванное их торможением в электрическом поле инжектированного заряда, приводит к изменению профиля акустического импульса и сублинейной зависимости амплитуды импульса «сжатие-растяжение» с ростом плотности тока (энергии) пучка.

7. Расчеты в рамках обобщенной теории Фаулера-Нордгейма одномерной модели автоэлектронной эмиссии показали, что в процессе интенсивной импульсной АЭЭ, стимулированной полем объемного заряда, развивается токовая высокочастотная неустойчивость в системе «образец-ИЭП» с частотами колебаний 10^{11} – 10^{12} Гц. Основными факторами, определяющим момент возникновения высокочастотных колебаний плотности тока автоэлектронной эмиссии, является величина энергии сродства к электрону и время термализации горячих электронов.

8. Результаты расчетов для ряда материалов показали, что распределения роста температуры и ее максимальное значение определяются с одной стороны тормозной способностью вещества, с другой – удельной теплоемкостью. Приведенные результаты моделирования изменения температуры кристалла в максимуме энерговыделения на момент окончания импульса облучения, показали, что процесс сопровождается значительным изменением температуры кристалла, особенно при низких начальных температурах кристалла.

Основное содержание работы отражено в следующих публикациях

1. Степанов, С. А. Закономерности рекомбинации неравновесных электронов и дырок в диэлектриках и полупроводниках при импульсном электронном возбуждении / Е. П. Чинков, В. Ф. Штанько, С. А. Степанов, Е. Е. Обухова // Известия вузов. Физика. – 2011. – Т. 54, № 11/3. – С. 179-183.
2. Степанов, С. А. Пространственное распределение динамических механических напряжений в ионных кристаллах при воздействии импульсного электронного пучка / В. Ф. Штанько, В. М. Толмачев, С. А. Степанов, Е. П. Чинков // Журнал технической физики. – 2012. – Т. 82, № 2. – С. 68-72.
3. Степанов, С. А. Автоэлектронная эмиссия с поверхности щелочно-галогенидных кристаллов в процессе возбуждения импульсным электронным пучком / С. А. Степанов, В. Ф. Штанько, Е. П. Чинков, В. М. Толмачев // Известия вузов. Физика. – 2012. – Т. 55, № 6/2. – С. 82-87.
4. Stepanov, S. A. Simulation of Electron Field Emission from the Surface of Ionic Crystals under Irradiation by Pulsed Electron Beam / S. A. Stepanov, V. F. Shtan'ko, E. P. Chinkov // Известия вузов. Физика. – 2012. – Т. 55, № 11/3. – С. 227-230.
5. Степанов, С. А. Динамические механические напряжения в ионных кристаллах при воздействии импульсного электронного пучка / С. А. Степанов, Чинков Е. П. // Современные техника и технологии : сборник трудов XV Международная научно-практическая конференция студентов, аспирантов и молодых ученых : в 3 т. – Томск : Изд-во Том. политех. ун-та, 2009. – Т. 3. – С. 117-119.
6. Степанов, С. А. Пространственно-временное распределение поглощенной энергии импульсного электронного пучка в ионных кристаллах / С. А. Степанов // Современные техника и технологии : сборник трудов XVII Международной научно-практической конференции студентов, аспирантов и молодых ученых : в 3 т. – Томск : Изд-во Том. политех. ун-та, 2011. – Т. 3. – С. 77-78.
7. Степанов, С. А. Импульсный нагрев материалов при воздействии сильнотоочных электронных пучков / С. А. Степанов, В. Ф. Штанько // Фундаментальные и прикладные проблемы физики : материалы VII Международной научно-технической конференции : в 2 т. / Мордов. гос. политех. ун-т – Саранск, 2012. – Т. 1. – С. 60-63.
8. Stepanov, S. A. Simulation of electron field emission from the surface of ionic crystals under irradiation by a pulsed electron beam / S. A. Stepanov, V. F. Shtan'ko, E. P. Chinkov // 3rd International Congress on Radiation Physics and Chemistry of Condensed Matter, High Current Electronics and Modification of Materials with Particle Beams and Plasma Flows : abstracts. – Tomsk : TPU Press, 2012. – P. 140-144.
9. Степанов, С. А. Нагрев материалов при воздействии импульсных электронных пучков / С. А. Степанов, В. Ф. Штанько, Е. П. Чинков // Радиационно-термические эффекты и процессы в неорганических материалах : сборник трудов VIII международной научной конференции. – Томск : Изд-во Том. политех. ун-та, 2012. – С. 614-617.

Подписано в печать 21.05.2013 г.
Формат А4/2. Ризография
Печ. л. 1,0. Тираж 100 экз. Заказ № 09/05-13
Отпечатано в ООО «Позитив-НБ»
634050 г. Томск, пр. Ленина 34а