

МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ
В ЯДЕРНЫХ ТЕХНОЛОГИЯХ

УДК 621.384.6,544.034.7,51-73

МОДЕЛИРОВАНИЕ ДИНАМИКИ ЗАРЯДА
ПОЛУПРОВОДНИКОВОГО СЛОЯ ФОТОКАТОДА

© 2024 г. М. В. Владимиров^а, * С. М. Полозов^а, В. И. Ращиков^а

^аНациональный исследовательский ядерный университет “МИФИ”, Москва, 115409 Россия

*E-mail: MVLadimirov@mephi.ru

Поступила в редакцию 20.06.2023 г.

После доработки 23.06.2023 г.

Принята к публикации 26.06.2023 г.

В качестве развития ранее описанного подхода рассмотрено влияние генерации электронов проводимости за счет лазерно-индуцированного фотоэффекта на динамику заряда полупроводникового слоя фотокатода $q(t)$. Получено качественное и количественное согласие зависимости $q(t)$ с численным экспериментом.

Ключевые слова: фотокатод, электронные фотоинжекторы, диффузия, фотоэффект

DOI: 10.56304/S207956292405049X

ВВЕДЕНИЕ

Одними из основных генераторов электронных сгустков в настоящий момент являются сверхвысокочастотные (СВЧ) фотопушки [1–3]. Современные СВЧ фотопушки позволяют получать короткие электронные сгустки с большим зарядом, малым поперечным эмиттансом, и высокой монохроматичностью. Названные качества позволяют использовать СВЧ фотопушки при создании широкого класса ускорительных комплексов, включая источники синхротронного излучения 4-го поколения, лазеры на свободных электронах, коллайдеры и др. [1, 4–6].

Достижение необходимых параметров электронных сгустков в значительной степени определяется процессом фотоэмиссии и работой фотокатода. Все чаще с развитием физики и техники полупроводников СВЧ фотоинжекторы используют полупроводниковые фотокатоды. Это связано с тем, что они, в сравнении с металлическими фотокатодами, обладают меньшей работой выхода, большей квантовой эффективностью QE и, таким образом, позволяют получать электронные сгустки с большим зарядом.

Современные полупроводниковые фотокатоды состоят, как правило, из тонкого (единицы-десятки нанометров) слоя полупроводника, выращенного на металлической подложке [1, 7]. Использование подобных структур, вместе с очевидными преимуществами, сопряжено с рядом вызовов, таких, например, как поддержание температурного режима, сверхвысокого вакуума и другие. Еще одна особенность, связанная с исполь-

зованием теллурида цезия (один из наиболее перспективных полупроводниковых материалов) в качестве фотокатода, была обнаружена сравнительно недавно на фотопушке PITZ в DESY.

Используемый на указанной установке фотокатод представляет собой тонкий слой Cs₂Te (≤ 100 нм), выращенный на молибденовой (Mo) подложке. В процессе фотоэмиссии пикосекундных электронных сгустков в полупроводниковом слое Cs₂Te/Mo, как было показано в работах [6, 8, 9], образуется динамический заряд $q(t)$, без которого, например, невозможно достижение согласия между эмиссионными кривыми, полученными из эксперимента и численного моделирования¹ (рис. 1).

Необходимость учета зависимости заряда полупроводника $q(t)$ при проектировании фотоинжекторов и моделировании их работы продиктована и другими соображениями. С одной стороны, электрическое поле, создаваемое этим динамическим зарядом, оказывает влияние на дальнейшее движение электронных сгустков. С другой, возможна ситуация, когда величина $q(t)$ сравнима с полным электронным зарядом полупроводникового слоя $q_e = eS n_e a$, где S – площадь поверхности полупроводника, n_e – концентрация электронов проводимости, a – толщина полупроводникового слоя, полупроводниковый слой значительно

¹ Согласия моделирования с экспериментом удалось достичь за счет полуэмпирическим образом введенной временной зависимости заряда полупроводникового слоя [8, 9].

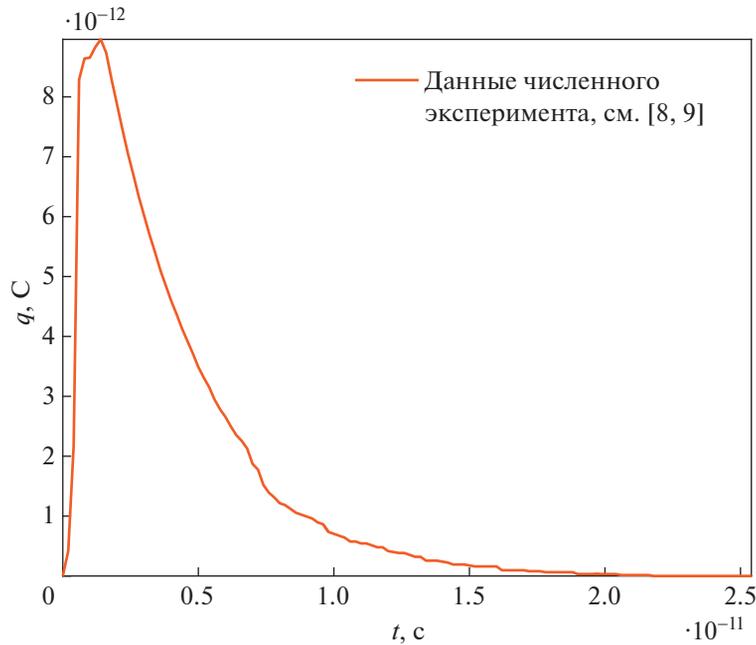


Рис. 1. Полуэмпирическая зависимость заряда полупроводникового слоя фотокатода Cs₂Te/Мо, полученная из численного эксперимента [8, 9].

обеднен электронами и режим работы фотокатода претерпевает существенные изменения.

Таким образом, очевидной является потребность понимания физики в тонком слое полупроводника при фотоэмиссии коротких пикосекундных электронных сгустков.

ФИЗИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ

В качестве основного физического явления, объясняющего возникновение, движение электронов проводимости в полупроводниковом слое фотокатода в структурах типа полупроводник, выращенный на металлической подложке, рассматривается диффузия. Диффузионное движение электронов связано с возникновением в процессе фотоэмиссии градиентов электронной концентрации на границе полупроводник-вакуум, а затем и внутри полупроводникового слоя фотокатода.

Еще одним механизмом возникновения электронов проводимости является их генерация за счет лазерно-индуцированного фотоэффекта. Учет генерации является развитием и логическим продолжением предыдущей работы [10], где этого сделано не было, а процесс фотоэмиссии не рассматривался как единое целое.

Электрическое поле в данной работе не учтено, дрейфовое движение не рассматривается.

МАТЕМАТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ

Сформулируем основанную на уравнении диффузии математическую модель, описывающую динамику концентрации электронов проводимости вдоль полупроводникового слоя фотокатода. Будем использовать следующие упрощения:

1. одномерность задачи (единственная координата – направление роста фотокатода, ось $0z$) и ее аксиальная симметрия,
2. отсутствие влияния дырок на движение электронов,
3. существование “резкой” границы между металлом и полупроводником, отсутствие промежуточного слоя,
4. постоянство толщины полупроводника – a ,
5. однородность генерации, т.е. ее независимость от координаты вдоль слоя полупроводника.

Уравнение диффузии. Учет генерации

Уравнение диффузии принимает вид:

$$\frac{\partial n}{\partial t} = \nabla(D\nabla n) + S. \tag{1}$$

где $n(\mathbf{r}, t)$ – концентрация электронов проводимости, а $D(n, \mathbf{r})$ – коэффициент диффузии, а слагаемое $S(\mathbf{r}, t)$ связано с источниками. Учет допущения

ний, приведенных выше, позволяет существенно упростить равенство (1):

$$D \frac{\partial^2 n}{\partial z^2} - \frac{\partial n}{\partial t} = -S. \quad (2)$$

Слагаемое S , поскольку рекомбинацией электронов с дырками пренебрегаем, связано с одной лишь генерацией за счет фотоэффекта. Как итог, это слагаемое пропорционально профилю индуцирующего фотоэффекта лазерного импульса $P(t)$:

$$P(t) = \frac{1}{\tau} [t\theta(t) - (t - \tau)\theta(t - \tau)], \quad (3)$$

где τ – длительность переднего фронта лазерного импульса (задний фронт не рассматривается), а $\theta(t)$ – ступенчатая функция (функция Хэвисайда).

Таким образом, окончательно уравнение диффузии принимает вид

$$D \frac{\partial^2 n}{\partial z^2} - \frac{\partial n}{\partial t} = -\frac{vN}{\tau} [t\theta(t) - (t - \tau)\theta(t - \tau)], \quad (4)$$

где vN – скорость нарастания концентрации электронов проводимости за счет фотоэффекта (определяется мощностью лазера): $[vN] = \text{м}^{-3} \text{с}^{-1}$.

Выбор граничных и начальных условий

Начальное распределение электронов проводимости вдоль полупроводникового слоя фотокатода считается заданным:

$$n(z, 0) = n_0, \quad (5)$$

где n_0 – их равновесная концентрация до начала процесса фотоэмиссии.

Граничное условие на левом конце полупроводникового слоя рассматривается как граничное условие первого рода:

$$n(0, t) = n_0. \quad (6)$$

Хотя это в значительной степени и является вольностью, можно найти положение вблизи границы контакта металл-полупроводник, где электронная концентрация практически постоянна и не слишком отлична от равновесной. Граничное условие на правом конце, имея в виду процесс фотоэмиссии, рассматривается как граничное условие третьего рода.

Таким образом, получена следующая задача диффузии:

$$\begin{cases} Dn'' - \dot{n} = -\frac{vN}{\tau} [t\theta(t) - (t - \tau)\theta(t - \tau)], \\ n(z, 0) = n(0, t) = n_0, \\ n'(a, t) + hn(a, t) = 0. \end{cases} \quad (7)$$

РЕЗУЛЬТАТЫ РАСЧЕТОВ

С использованием метода собственных функций задача (7) решена.

Решение задачи диффузии

Решение (7) может быть представлено в следующем виде

$$n(z, t) = n_0 - \frac{hn_0}{1 + ah} z - 2 \sum_{k=1}^{\infty} \frac{\mathbb{M}_k}{\gamma_k} \sin\left(\frac{\gamma_k}{a} z\right) \times \left[n_0 \cos \gamma_k e^{-\omega_k t} - \frac{vN}{\tau} \frac{1 - \cos \gamma_k}{\omega_k} \mathbb{F}_k(t) \right], \quad (8)$$

где γ_k – положительные корни уравнения

$$\gamma = -ah \tan \gamma, \quad (9)$$

и введены следующие обозначения:

$$\mathbb{M}_k = \frac{(ah)^2 + \gamma_k^2}{(ah)^2 + ah + \gamma_k^2}, \quad (10)$$

$$\omega_k = \left(\frac{\gamma_k}{a}\right)^2 D, \quad (11)$$

$$\mathbb{F}_k(t) = \frac{1 - e^{\theta(t-\tau)\omega_k \tau}}{\omega_k} e^{-\omega_k t} + \tau P(t). \quad (12)$$

Интегрированием (8) с учетом

$$q(t) = q_e(t) + q_+ = eS \left(\int_0^a n(z, t) dz - n_0 a \right), \quad (13)$$

где e – заряд электрона, S – площадь засвечиваемого лазером пятна (эффективная эмиссионная поверхность), получен некомпенсированный заряд полупроводникового слоя фотокатода:

$$\frac{q(t)}{|e|S} = \frac{hn_0}{1 + ah} \frac{a^2}{2} + 2a \sum_{k=1}^{\infty} \frac{\mathbb{M}_k}{\gamma_k^2} (1 - \cos \gamma_k) \times \left[n_0 \cos \gamma_k e^{-\omega_k t} - \frac{vN}{\tau} \frac{1 - \cos \gamma_k}{\omega_k} \mathbb{F}_k(t) \right]. \quad (14)$$

Рисунок 2 иллюстрирует качественный вид зависимости $q(t)$ при различных значениях параметра vN .

В отсутствии генерации принципиально невозможно получение согласия с численным экспериментом [8, 9], поскольку кривая заряда носит монотонный характер. Учет генерации позволяет получить немонотонный характер зависимости $q(t)$ и ее качественное согласие с экспериментальной кривой (рис. 1).

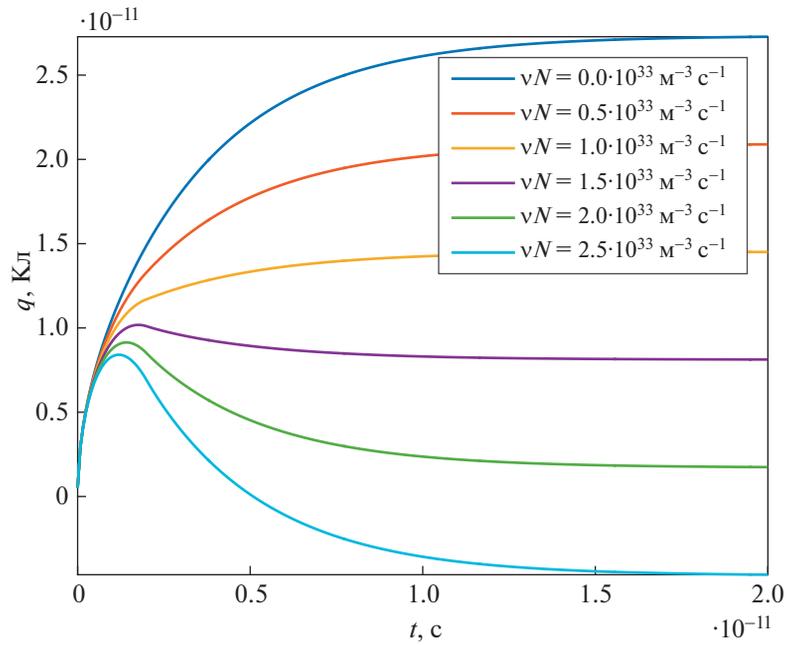


Рис. 2. Временная зависимость заряда полупроводникового слоя фотокатода $q(t)$: $D = 2.95 \text{ см}^2 \text{ с}^{-1}$, $a = 100 \text{ нм}$, $h = 10^{10} \text{ м}^{-1}$, $\tau = 2 \text{ пс}$, $r_0 = 0.3 \text{ мм}$ (эффективный радиус поверхности фотокатода).

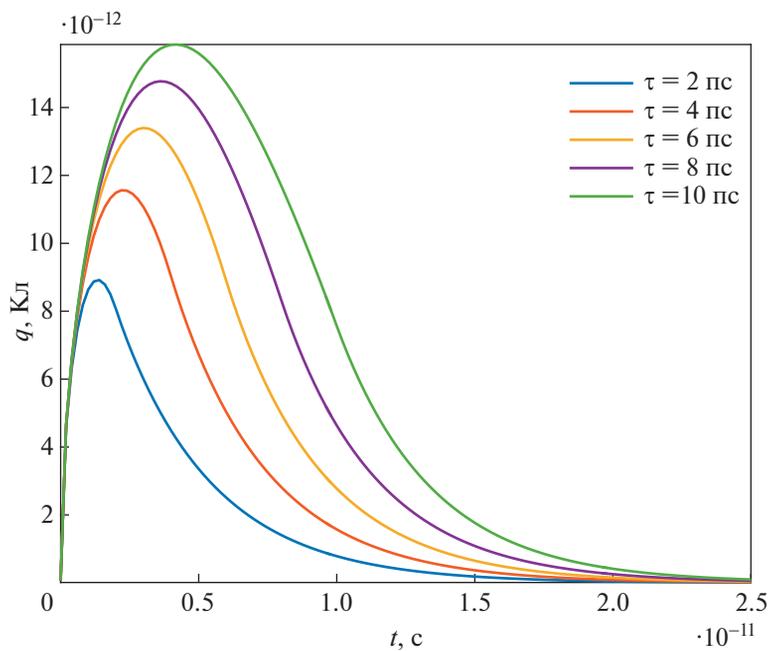


Рис. 3. Временная зависимость заряда полупроводникового слоя фотокатода $q(t)$: $D = 2.95 \text{ см}^2 \text{ с}^{-1}$, $a = 100 \text{ нм}$, $n_0 = 1.21 \cdot 10^{22} \text{ м}^{-3}$, $vN = 6hn_0D/a(ah + 4)q(\infty) = 0$, $h = 10^{10} \text{ м}^{-1}$, $r_0 = 0.3 \text{ мм}$ (эффективный радиус поверхности фотокатода).

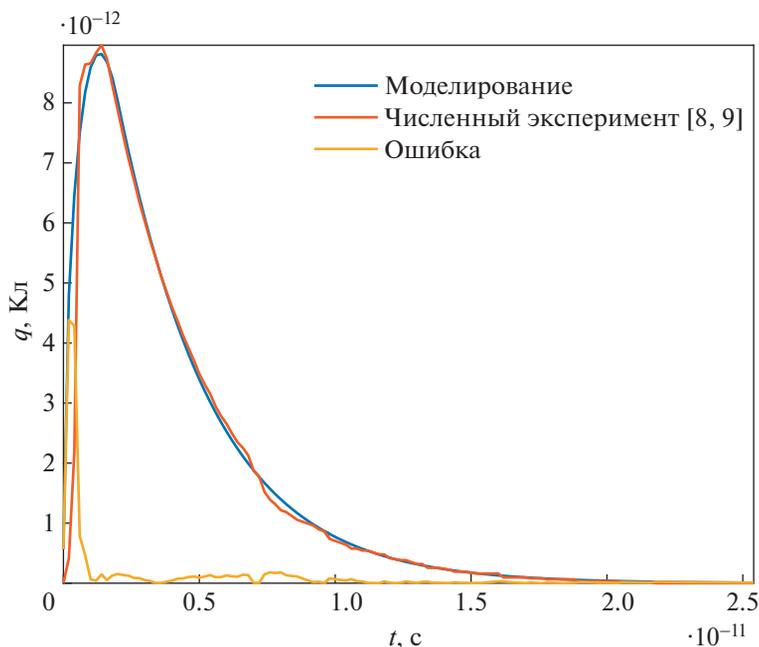


Рис. 4. “Оптимальная” зависимость $q(t)$. Параметры, полученные из оптимизации: $D = 2.95 \text{ см}^2 \text{ с}^{-1}$, $h = 10^{10} \text{ м}^{-1}$, $n_0 = 1.21 \cdot 10^{22} \text{ м}^{-3}$.

Рисунок 3 иллюстрирует качественный вид эволюции распределения при различных значениях длительности переднего фронта. Как видно, большая длительность фронта соответствует более позднему достижению максимума зависимости $q(t)$.

Рисунки, подобные рис. 3, могут быть получены при варьировании прочих параметров модели. По причине их малой информативности они не приводятся.

Временные зависимости заряда полупроводникового слоя и соотношение с экспериментом

Проведем сопоставление кривых $q(t)$, полученных из моделирования, с экспериментальной (полученной из численного эксперимента) зависимостью некомпенсированного заряда полупроводникового слоя фотокатода $\text{Cs}_2\text{Te}/\text{Mo}$ (DESY PITZ). Будем искать “оптимальную” с точки зрения минимизации значения функции

$$\delta(D, h, n_0) = \sum_{k=k_i}^{k_f} \sqrt{(q^{\text{exp}}(t_k) - q^{\text{th}}(t_k))^2} \rightarrow \min, \quad (15)$$

временную зависимость заряда, где $k_i = 1$ и $k_f = 128$ соответствуют начальному $t = 0$ пс и конечному $t = 25.4$ пс моментам времени для экспериментальной кривой (метод наименьших квад-

ратов)². Прочие параметры считаются известными и сами собойразумеются при построении рис. 4 и 5:

- толщина полупроводникового слоя фотокатода теллурида цезия, выращенного на молибденовой подложке: $a = 100 \text{ нм}$,
- длительность переднего фронта лазерного импульса: $\tau = 2 \text{ пс}$ (длительность пологого участка составляет 20 пс, а заднего фронта – 2 пс), длительность заднего фронта в модели не учитывается,
- радиус засвечиваемого лазером пятна (соответствует эффективной эмиссионной поверхности фотокатода): $r_0 = 0.3 \text{ мм}$,
- скорость нарастания концентрации внутри Cs_2Te за счет лазерно-индуцированного фотоэффекта $vN = 6hn_0D/a(ah + 4)$.

“Оптимальная” временная зависимость заряда полупроводникового слоя фотокатода, полученная с использованием модели диффузии с граничными условиями первого и третьего рода на левой и правой границах слоя полупроводника, приведена на рис. 4.

² Строго говоря, найденный таким образом минимум будет являться локальным. Существование глобального минимума в подобных задачах не гарантировано. Интерес представляет сама возможность получения согласия между теорией и экспериментом, а не параметры, при которых это согласие достигается.

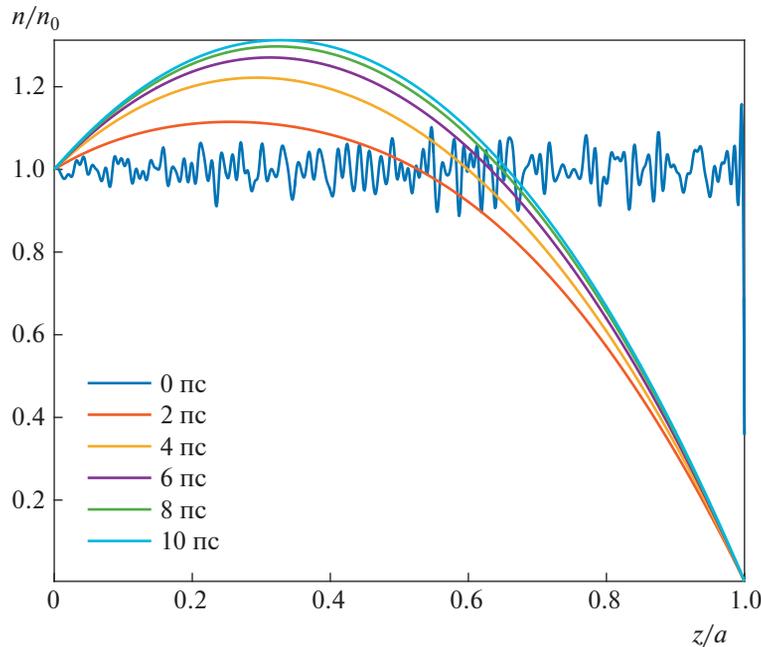


Рис. 5. Распределения $n(z, t)$ для задачи диффузии с граничными условиями первого рода слева и третьего рода справа, соответствующие “оптимальным” параметрам (приведены на рис. 4).

Согласно рис. 4 при помощи используемой модели удастся достичь хорошего согласия временной зависимости заряда полупроводникового слоя, полученного из теории (моделирование) и экспериментальной [8, 9], на всем, кроме первой пикосекунды, временном промежутке. На рис. 5 приведены распределения электронной концентрации для различных моментов времени при полученных параметрах.

ВЫВОДЫ

Рассмотрено влияние генерации на динамику заряда в полупроводниковом слое фотокатода Cs_2Te . В результате решения задач диффузии с граничными условиями первого рода на левом и третьего на правом конце были получены распределения концентрации электронов проводимости вдоль полупроводника $n(z, t)$. Интегрированием $n(z, t)$ вдоль полупроводникового слоя фотокатода получена временная зависимость его заряда $q(t)$.

Полученные семейства кривых $q(t)$ качественно близки к экспериментальной зависимости [8, 9] в течение всего процесса фотоэмиссии, что указывает на учет генерации как на выбор правильного направления развития модели [10]. Оптимизация параметров модели, не известных из эксперимента и не описанных в литературе, позволяет получить достаточно хорошее количе-

ственное согласие с экспериментальной зависимостью. Все это является надежным подтверждением адекватности приведенных рассуждений.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ/REFERENCES

1. *Hernandez-Garcia C., O Shea P.G., Stutzman M.L.* // Phys. Today. 2008. V. 61 (2). P. 44.
2. *Bossart R. et al.* // Nucl. Instrum. Methods Phys. Res., Sect. A. 1996. V. 375 (1–3). P. ABS7–ABS8.
3. *Chen Y. et al.* // Nucl. Instrum. Methods Phys. Res., Sect. A. 2018. V. 889. P. 129–137.
4. *Levichev E.B.* // Phys. Usp. 2018. V. 61 (1). P. 29.
5. *Stragier X.F.D. et al.* // J. Appl. Phys. 2011. V. 110 (2). P. 024910.
6. *Krasilnikov M. et al.* // Phys. Rev. Spec. Top. Accel. Beams. 2012. V. 15 (10). P. 100701.
7. *Schaber J., Xiang R., Gaponik N.* // J. Mater. Chem. C. 2023. V. 11 (9). P. 3162–3179.
8. *Polozov S.M., Rashchikov V.I.* // Cybern. Phys. 2020. V. 9 (2). P. 103–106.
9. *Красильников М., Полозов С.М., Ращиков В.И.* // Ядерная физика и инжиниринг. 2022. Т. 13 (1). С. 73–78 [Krasilnikov M., Polozov S.M., Rashchikov V.I. // Phys. At. Nucl. 2021. V. 84 (11). P. 1881–1885].
10. *Владимиров М.В., Полозов С.М., Ращиков В.И.* // Ядерная физика и инжиниринг. 2023. Т. 14 (4). С. 389–393 [Vladimirov M.V., Polozov S.M., Rashchikov V.I. // Phys. At. Nucl. 2022. V. 85 (12). P. 2032–2035].

Simulation of Charge Dynamics of a Photocathode Semiconductor Layer

M. V. Vladimirov¹, *, S. M. Polozov¹, and V. I. Rashchikov¹

¹National Research Nuclear University МЕРФИ (Moscow Engineering Physics Institute), Moscow, 115409 Russia

*e-mail: MVVladimirov@mephi.ru

Received June 20, 2023; revised June 23, 2023; accepted June 26, 2023

Abstract—The impact of the generation of conduction electrons due to the laser-induced photoelectric effect on the charge dynamics of the semiconductor layer of the photocathode $q(t)$ is considered. Qualitative and quantitative agreement between the dependence $q(t)$ and the data of a numerical experiment has been achieved.

Keywords: photocathode, electron photoinjectors, diffusion, laser induced photoeffect