

05; 10

© 1991 г.

ПОТЕНЦИАЛЬНОЕ РАССЕЯНИЕ РЕЛЯТИВИСТСКИХ ЧАСТИЦ ПРИ КАНАЛИРОВАНИИ

А. М. Канлов, Ф. Р. Кунгуров, В. И. Телегин

Рассмотрено влияние возмущения аксиальной симметрии усредненного электростатического потенциала в осевом канале монокристалла кремния на динамику электрона в связанном состоянии и изменение его углового момента. Показано, что существует среднее по времени значение углового момента, которое может быть приписано определенному состоянию частицы. Показано также, что увеличение деканалирования вследствие нарушения аксиальной симметрии потенциала канала мало. Исследуется влияние потенциального и многократного рассеяния релятивистских лептонов в режиме каналирования на их угловое распределение. Показано, что в кристаллах с толщиной меньше длины деканалирования определяющую роль в формировании распределения частиц по углам вылета играет потенциальное рассеяние частиц цепочками атомов. Влияние многократного рассеяния на угловое распределение при такой толщине кристаллов пренебрежимо мало.

Введение

Как известно, в теоретических исследованиях эффекта каналирования релятивистских электронов и позитронов в кристаллах используется электростатический потенциал атомов монокристалла, усредненный вдоль направления кристаллографических осей и плоскостей и тепловым колебаниям атомов решетки [1, 2]. Совокупность эффектов, обусловленных искривлением траектории проходящей через кристалл частицы под влиянием такого потенциала, объединяется термином «потенциальное рассеяние». При этом частицы, находящиеся в связанных состояниях определенных каналов, испытывают возмущающее действие потенциала соседних цепочек атомов, что также позволяет говорить о потенциальном рассеянии таких частиц. Проходящие через кристалл частицы испытывают также многократное рассеяние на тепловых колебаниях решетки кристалла и электронных оболочках атомов.

В настоящей работе проводится исследование влияния потенциального рассеяния на проходящие через кристалл частицы путем использования теоретических моделей, не включающих многократное рассеяние. Для исследования движения частиц использовались численные методы. Вклад многократного рассеяния оценивался повторным решением задачи с учетом указанного рассеяния.

Потенциальное рассеяние по-разному влияет на движение связанных в каналах и несвязанных частиц, поэтому ниже результаты расчетов обсуждаются отдельно.

Угловой момент каналированных электронов при нарушении аксиальной симметрии потенциала

В теоретических исследованиях эффекта осевого каналирования электронов в монокристаллах обычно используется приближение аксиально-симметричного электростатического потенциала непрерывной цепочки атомов. Без учета многократного рассеяния каналированных электронов составляющая момента импульса в направлении оси канала, или угловой момент частицы, в таком

потенциале является одним из интегралов движения. Реальное распределение усредненного электростатического потенциала отличается от аксиально-симметричного вследствие возмущающего влияния соседних цепочек.

Влияние возмущения аксиальной симметрии в области квантового описания связанных состояний электронов рассматривалось в работе [3]. Путем вычисления поправок к волновым функциям электронов, соответствующим аксиально-симметричному потенциалу, было показано, что состояния с квантовым числом $l \neq 0$, наиболее сильно взаимодействующие с тепловыми колебаниями ядер цепочки, содержат примесь состояний с большими значениями квантовых чисел $l=1, 2, \dots$. На этом основании авторами сделан вывод, что возмущение аксиальной симметрии осевого потенциала приводит к увеличению деканалирования электронов.

Несохранение углового момента электрона вследствие возмущения азимутальной симметрии послужило основанием авторам работы [4] сформулировать необходимость описания динамики электрона в случае осевого каналирования на основе стохастической теории. По этой же причине авторами указанной работы поставлена под сомнение правомерность использования кинетического уравнения Белошицкого и Кумахова [6]. Утверждалось также, что стохастизация траекторий электронов должна в конечном итоге увеличить вероятность проникновения электронов в область сильного рассеяния на ядрах и тем самым их деканалирование.

Необходимо, однако, отметить, что уже в ранних экспериментах по обнаружению излучения, предсказанного М. А. Кумаховым [6], в области энергий электронов 2—5 МэВ, излучающих в режиме аксиального каналирования [7, 8], было однозначно идентифицировано излучение электронов с рассчитанным для переходов между состояниями определенным угловым моментом. При этом результаты измерения спектра излучения оказываются в хорошем согласии с расчетами, в которых используется аксиально-симметричный электростатический потенциал. Таким образом, данные этих экспериментов указывают на существование состояний, близких к состояниям с определенным угловым моментом. Ниже приводятся результаты исследования изменения углового момента при движении электрона в возмущенном потенциале осевого канала.

Исследование углового момента проводилось для кристаллографического направления $\langle 111 \rangle$ монокристалла кремния толщиной до 40 мкм при каналировании электронов с энергией 1 ГэВ. Определенная из экспериментов длина деканалирования электронов в этом случае равна 39 ± 5 мкм [9]. Как известно, при такой энергии применимо классическое описание движения электронов. Динамические характеристики движения электронов получались путем численного решения на ЭВМ уравнений, описывающих изменение во времени расстояния электрона до оси канала,

$$m \frac{d^2 \mathbf{r}_\perp}{dt^2} = -\nabla U(\mathbf{r}_\perp), \quad (1)$$

где $m = \gamma m_0$ — релятивистская масса электрона, $\gamma = (1 - v^2/c^2)^{-1/2}$ — фактор Лоренца, U — усредненный электростатический потенциал.

В качестве потенциала канала использовался суммарный усредненный электростатический потенциал цепочки атомов канала и окружающих его цепочек

$$U(\mathbf{r}_\perp) = - \sum_j \frac{\alpha}{\sqrt{2u_j^2 + (\mathbf{r}_\perp - \mathbf{r}_{\perp j})^2}} + C, \quad (2)$$

где u_j — амплитуда тепловых колебаний атомов, $\mathbf{r}_{\perp j}$ — координаты соседних цепочек относительно оси выбранного канала. Величина α , равная $5 \text{ эВ} \cdot \text{Å}$, определялась близостью потенциала (2) к потенциалу Мольера, усредненному по тепловым колебаниям решетки и вдоль оси канала. Постоянная C в (2) определяется условием

$$\max U(\mathbf{r}_\perp) = 0. \quad (3)$$

Для упрощения анализа результатов вычислений в расположении соседних цепочек использовалась симметрия более высокого порядка C_6 [10] по сравне-

нию с симметрией реального канала $\langle 111 \rangle$. Вычисляемые в ходе решения уравнений (1) величины r_{\perp} и $p_{\perp} = mv_{\perp}$ использовались для анализа изменения компоненты углового момента частицы вдоль оси канала

$$M_x = xp_y - yp_x \quad (4)$$

с изменением глубины проникновения в кристалл $z=ct$, c — скорость света. Характерные особенности траекторий частиц с отрицательной поперечной

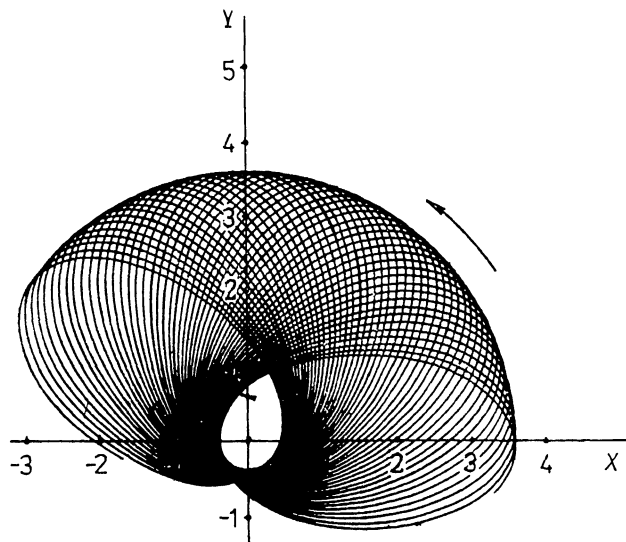


Рис. 1. Траектория электрона с энергией $E=1$ ГэВ в поперечной плоскости при каналировании вдоль оси $\langle 111 \rangle$ монокристалла кремния толщиной 40 мкм.

энергией E_{\perp} в поперечной плоскости и углового момента приведены на рис. 1, 2. Траектории частиц имеют форму эллипсов, прецессирующих вокруг оси канала. Представленный участок траектории соответствует толщине кристалла $l=$

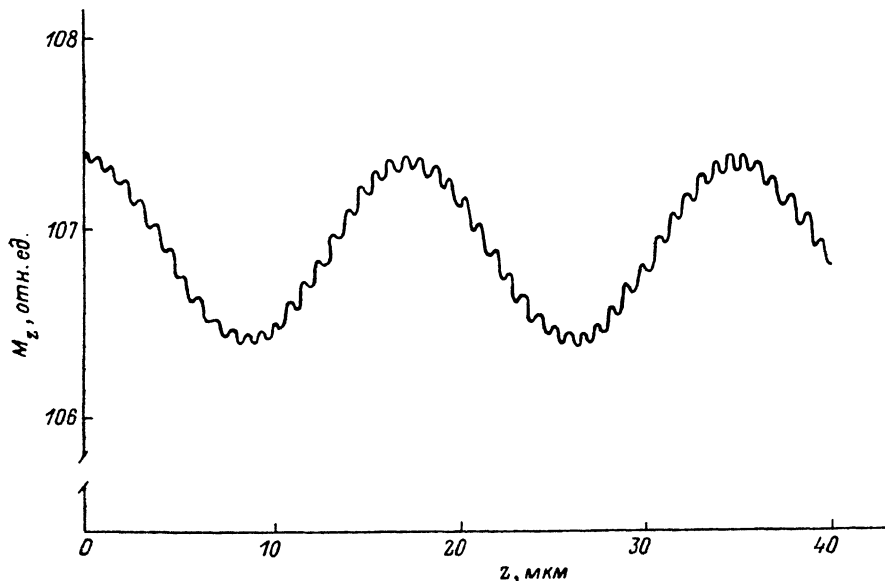


Рис. 2. Угловой момент электрона, вычисленный вдоль траектории, показанной на рис. 1.

$l=40$ мкм. График изменения углового момента (4) этой же частицы с глубиной проникновения в кристалл приведен на рис. 2. Видно, что изменение углового момента частицы происходит около некоторого среднего значения M . Отклоне-

ние от среднего значения имеет вид колебаний с двумя частотами. Высоко-частотные колебания соответствуют частоте обращения частицы вокруг оси канала. Низкочастотные колебания обусловлены медленным перемещением траектории частицы в канале вследствие прецессии и соответствующим изменением локальных значений аксиально-несимметричного потенциала. Амплитуда высокочастотных колебаний в данном случае не превышает 0.08 % от величины среднего значения углового момента M . Амплитуда низкочастотных колебаний, обусловленных изменением потенциала, не превышает 0.5 % от M . Ввиду отсутствия в расчетах многократного рассеяния характер изменения траектории и углового момента, как видно из рисунков, не изменится с дальнейшим увеличением толщины кристалла.

Таким образом, результаты расчетов показывают существование среднего значения изменяющегося во времени углового момента, это среднее значение может быть приписано соответствующему состоянию частицы. Колебания около среднего значения в случае необходимости могут быть вычислены методами теории возмущений. Для большей части частиц отклонение углового момента от среднего значения будут невелики. По этой причине в теории [5] результаты усреднения по времени локальных диффузионных коэффициентов многократного рассеяния вдоль возмущенной и невозмущенной траекторий будут отличаться не слишком значительно, следовательно, возмущение азимутальной симметрии потенциала не приведет к существенному увеличению деканализирования электронов.

Анизотропия углового распределения релятивистских лептонов

При исследовании прошедших через кристаллы под небольшими углами относительно кристаллографических осей однородных пучков электронов и позитронов было обнаружено появление асимметрии в угловом распределении частиц [11, 12]. В последующих экспериментальных исследованиях электронов [13, 14] было установлено, что угловое распределение частиц после прохождения через ориентированный монокристалл принимает своеобразную форму «рогалика» (doughnut [14]). Расчеты углового распределения прошедших через кристалл электронов и позитронов, проведенных для монокристалла Au толщиной 600 Å при энергии частиц 1 МэВ и кристаллографического направления $\langle 111 \rangle$ [15], показали зависимость его формы от угла разориентации между осью симметрии падающего пучка и кристаллографической осью. Результаты детальных исследований формы углового распределения в пучке π^- -мезонов с энергией 15 ГэВ в зависимости от толщины монокристалла Si и угла разориентации между осью симметрии падающего пучка и кристаллографической осью $\langle 110 \rangle$ приведены в [14].

Проведенные исследования позволили выявить главные особенности в форме углового распределения прошедших через кристалл частиц и условия их появления. Однако определение относительного вклада различных факторов, влияющих на распределение частиц, при этом оказывается затруднительным вследствие большой толщины использовавшихся в экспериментах кристаллов. Численные расчеты [15], проведенные с использованием метода бинарных столкновений, также не позволяют отделить вклад усредненного электростатического потенциала цепочек атомов осевых каналов и многократного рассеяния быстрых частиц на тепловых колебаниях атомов решетки и их электронных оболочках. В настоящей работе приводятся результаты исследования этого вопроса.

Исследование влияния потенциального рассеяния на угловое распределение не связанных в определенных аксиальных каналах лептонов проводилось путем численного интегрирования уравнений движения большого числа частиц, моделировавших падающий пучок. Расчеты проводились для параллельного пучка частиц с энергией 500 МэВ, падающих на поверхность монокристалла кремния, ориентированного осью $\langle 111 \rangle$, с углами разориентации ψ_c и $2\psi_c$, где ψ_c — критический угол каналирования.

В случае выбранных для расчетов значений энергии частиц и материала монокристалла применимо классическое описание движения частиц. В отсутствие многократного рассеяния быстрой частицы проекция ее радиуса-вектора

на плоскость, перпендикулярную оси канала, удовлетворяет уравнению (1). В качестве аппроксимации электростатического потенциала атома использовался потенциал Мольера. Электростатический потенциал отдельной цепочки атомов рассчитывался усреднением потенциала атомов в направлении кристаллографической оси и по поперечным колебаниям атомов при комнатной температуре. При расчетах с учетом многократного рассеяния после каждого шага интегрирования по времени уравнений (1) для всех частиц с использованием датчика случайных чисел рассчитывался угол многократного рассеяния и выполнялась коррективка импульсов частиц. Значения координат и импульсов частиц на поверхности кристалла определялись из условия однородности распределения частиц в падающем пучке.

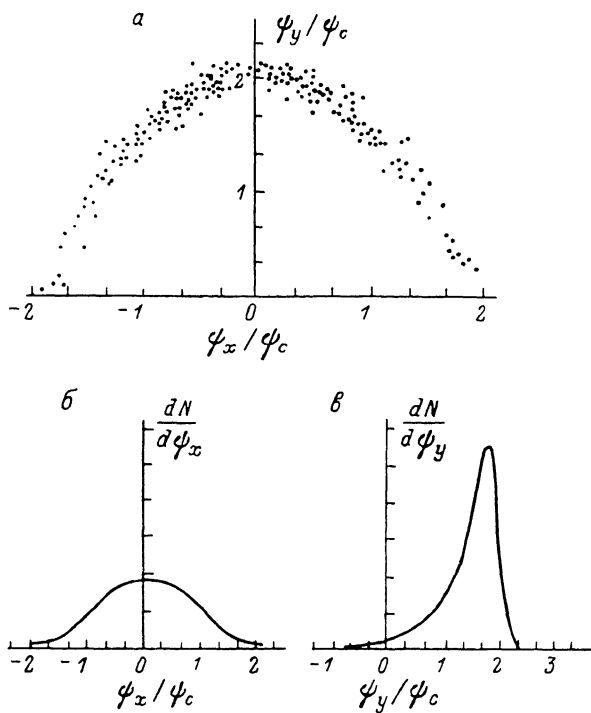


Рис. 3. Двумерное угловое распределение электронов с энергией 500 МэВ на выходе из монокристалла Si толщиной 10 мкм (угол падения на поверхность кристалла $2\psi_c$) (а), проекция углового распределения частиц на ось ψ_x (б) и ψ_y (в).

Результаты расчетов углового распределения электронов с энергией 500 МэВ, падающих на поверхность кристалла под углом $2\psi_c = 1.2 \cdot 10^{-3}$ рад относительно кристаллографической оси $\langle 111 \rangle$, после прохождения монокристалла кремния толщиной 10 мкм приведены на рис. 3, а. Начальные импульсы всех частиц параллельны плоскости ZY. Обсуждаемый расчет проведен без учета многократного рассеяния частиц, все особенности углового распределения определяются потенциальным рассеянием электронов суммарным потенциалом цепочек атомов. Угловое распределение симметрично относительно плоскости ZY. Рассеяние частиц происходит по азимутальному углу φ относительно кристаллографического направления.

На рис. 3, б приведены графики числа частиц, имеющих на выходе заданную угловую координату ψ_x , и на рис. 3, в — соответственно числа частиц с координатой ψ_y . Из графиков видно, что число частиц с большими значениями азимутального угла быстро уменьшается с ростом этого угла, так что углы вылета большей части частиц близки к углу влета падающего пучка.

Отметим, что идентичный описанному выше расчет проведен также и с учетом многократного рассеяния электронов на тепловых колебаниях решетки кристалла и электронных оболочках. При выбранной толщине кристалла

результаты обоих расчетов практически не отличаются. Таким образом, расчеты показывают, что в формировании углового распределения частиц при прохождении через тонкий монокристалл определяющую роль играет потенциальное рассеяние частиц усредненным потенциалом цепочек атомов.

При углах падения пучка на поверхность кристалла порядка $\psi_0 = 0.6 \cdot 10^{-3}$ рад угловое рассеяние частиц резко возрастает. В этом случае при выбранной толщине кристалла 10 мкм угловое распределение частиц на выходе имеет

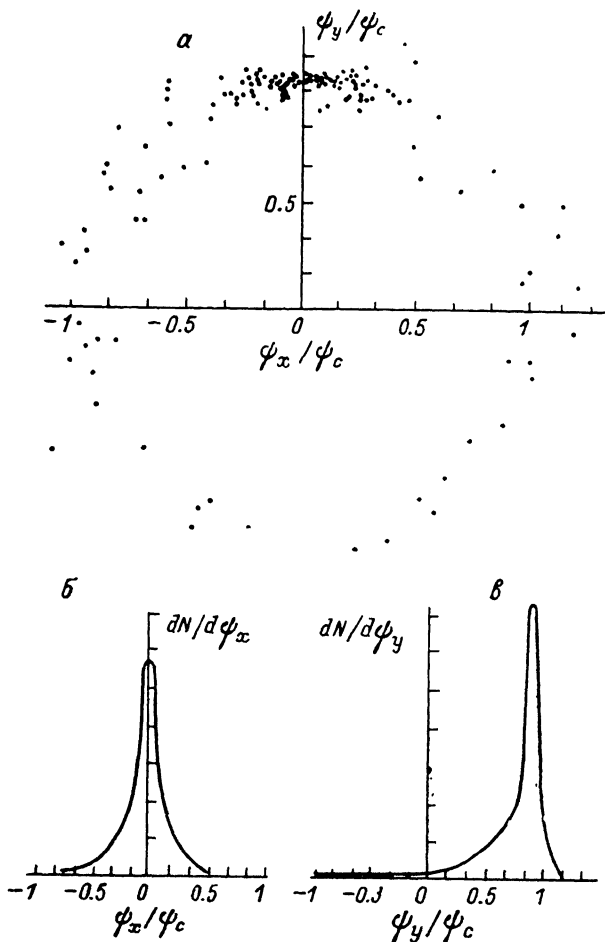


Рис. 4. Двумерное угловое распределение позитронов с энергией 500 МэВ на выходе из монокристалла Si толщиной 10 мкм (угол падения на поверхность кристалла ψ_0) (а), проекция углового распределения частиц на ось ψ_x (б), ψ_y (в).

кольцеобразную форму. С увеличением угла разориентации угловое рассеяние быстро уменьшается и при выбранной толщине кристалла распределение практически не отличается от аксиально-симметричного относительно оси пучка.

Расчеты, проведенные для позитронных пучков в аналогичных условиях, также показывают определяющее влияние потенциального рассеяния частиц на цепочках кристалла в формировании их углового распределения. На рис. 4, а приведено угловое распределение позитронов с энергией 500 МэВ, падающих на поверхность кристалла Si толщиной 10 мкм под углом $\psi_0 = 0.6 \cdot 10^{-3}$ рад относительно кристаллографической оси $\langle 111 \rangle$. Частицы испытывают сильное угловое рассеяние, так что распределение имеет вид кругового кольца. Распределение плотности частиц по азимутальной координате φ неоднородно (рис. 4, б, в). Видно, что большая часть частиц сохраняет направление импульса, близкое к первоначальному. С увеличением угла разориентации угловое рассеяние позитронов также быстро уменьшается и распределение принимает форму кольцевого сегмента.

Как известно, для каналированных позитронов рост угла многократного рассеяния с толщиной кристалла существенно меньше, чем в случае электронов. Результаты расчетов, представленные на рис. 3 и 4, показывают, что формирование асимметричного углового распределения с ростом толщины кристалла идентично для электронов и позитронов. Это обстоятельство также однозначно указывает на определяющую роль потенциального рассеяния в формировании асимметричного углового распределения частиц на относительно малых глубинах проникновения.

Заключение

Результаты численных расчетов показывают существование среднего значения изменяющегося во времени углового момента, которое может быть приписано соответствующему состоянию частицы. Колебания около среднего значения малы и могут быть вычислены методами теории возмущений. Для большинства частиц возмущающее действие соседних цепочек атомов невелико и не должно приводить к значительному увеличению деканалирования.

В случае электронов и позитронов, проходящих через кристалл в несвязанных состояниях, их угловое распределение на выходе в виде кольцевых сегментов формируется вследствие потенциального рассеяния частиц электростатическим полем цепочек атомов. Потенциальное рассеяние наиболее сильно при углах порядка критического угла каналирования и быстро уменьшается с ростом угла разориентации. Многократное рассеяние в толстых кристаллах приводит к уширению и размыванию углового распределения частиц как по азимутальному, так и по полярному углам.

Список литературы

- [1] *Appleton B. R., Erginsoy C., Gibson W. M.* // Phys. Rev. 1967. Vol. 161. N 2. P. 330—349.
- [2] *Lindhard J., Kgl. Dan Vid. Selsk.* // Mat. Fys. Medd. 1965. Vol. 34. N 14. P. 1—45.
- [3] *Жукова Т. И., Фирсов О. Б.* // ЖТФ. 1986. Т. 56. Вып. 6. С. 1033—1039.
- [4] *Болотин Ю. Л., Гончар В. Ю., Трутень В. И., Шулъга Н. Ф.* // УФЖ. 1986. Т. 31. № 1. С. 14—16.
- [5] *Белошуккий В. В., Кумазов М. А.* // ЖЭТФ. 1982. Т. 82. Вып. 2. С. 462—472.
- [6] *Кумазов М. А.* // ДАН СССР. 1976. Т. 230. № 5. С. 1077—1080.
- [7] *Andersen J. U., Laegsgaard E.* // Phys. Rev. Lett. 1980. Vol. 44. N 16. P. 1079—1082.
- [8] *Cue N., Bonderup E., Marsh B. B. et al.* // Phys. Lett. 1980. Vol. 80A. N 1. P. 26—28.
- [9] *Адейшвили Д. И., Бочек Г. Л., Витько В. И. и др.* // Письма в ЖТФ. 1984. Т. 10. Вып. 4. С. 197—200.
- [10] *Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М.* Квантовая механика. М.: Физматгиз, 1963. 400 с.
- [11] *Китт Н., Bell F., Sizmann R. et al.* // Rad. Eff. 1972. Vol. 12. N 1-2. P. 56—61.
- [12] *Гришаев И. А., Морозовский В. Л., Шраменко Б. И.* // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Физика высоких энергий. 1973. № 5 (7). С. 56—57.
- [13] *Гришаев И. А., Морозовский В. Л., Шраменко Б. И.* // Тр. V Всесоюз. совещания по физике взаимодействия частиц с монокристаллами. М., 1974. С. 282—288.
- [14] *Andersen S. K., Fitch O., Nielsen H. et al.* // Nucl. Phys. B. 1980. Vol. 167. N 1-2. P. 1—40.
- [15] *Kudrin V. V., Vorobiev S. A.* // Rad. Eff. 1974. Vol. 21. N 3. P. 145—149.

Поступило в Редакцию
7 февраля 1990 г.