

УДК 537.533.7

ВОЛНОВЫЕ ФУНКЦИИ КАНАЛИРОВАННЫХ ЭЛЕКТРОНОВ
В КРИСТАЛЛЕ

С. Б. Дабагов, Л. И. Огнев

Получено уравнение для эволюции волновой функции каналированного электрона в кристалле с учетом некогерентного рассеяния на тепловых колебаниях атомов. Методом прямого интегрирования полученного уравнения исследована модовая структура волновой функции при осевом каналировании электронов с энергией 1—20 МэВ в монокристалле кремния. Рассчитаны угловые распределения электронов, прошедших через монокристалл кремния, при малых углах влета по отношению к оси $\langle 111 \rangle$.

Прохождение релятивистских электронов с энергией около 1 МэВ в кристаллах вызывает в последнее время растущий интерес в связи с возможностями диагностики свойств твердого тела, его кристаллического потенциала, дефектов структуры [1-5]. После разработки квантовой теории излучения релятивистских каналированных частиц [6] структуру энергетических зон поперечного движения каналированных частиц часто связывают со спектром спонтанного излучения таких частиц в кристаллах (см. обзор [7]). Для определения структуры поперечного движения каналированных частиц наибольшее распространение получил метод разложения волновой функции в ряд по плоским волнам или метод многоволновой дифракции [8]. При этом проблема сводится к решению задачи на собственные значения. Однако рассмотрение с помощью этого метода осевого каналирования электронов с энергией E , большей 1 МэВ, встречает трудности даже при численном решении, так как необходимое число волн в разложении растет как E^2 . Еще большие трудности возникают при рассмотрении кинетики каналированных частиц [9, 10]. По-видимому, именно в силу вычислительных трудностей задача о кинетике электронов, каналированных вдоль оси, с энергией несколько МэВ до настоящего времени не рассматривалась.

Отмеченные трудности могут быть в значительной степени преодолены, если для определения волновой функции использовать метод прямого численного интегрирования [11] нестационарного уравнения Шредингера [12] без решения задачи на собственные значения.

1. Вывод уравнения для волновой функции
каналированных электронов

Выделим в волновой функции каналированного электрона быстроосциллирующей множитель, записав ее в виде

$$\Psi(z, \mathbf{r}) = \psi(z, \mathbf{r}) \exp(ik_z z),$$

где k_z — проекция волнового вектора релятивистского электрона на направление каналирования, совпадающее с осью z ; \mathbf{r} — поперечные координаты. Тогда уравнение Клейна—Гордона может быть преобразовано в уравнение типа Шредингера для медленно меняющейся амплитуды $\psi(z, \mathbf{r})$

$$2ik_z \frac{\partial}{\partial z} \psi + \Delta_{\perp} \psi = k_z^2 V'(z, \mathbf{r}) \psi(z, \mathbf{r}), \quad (1)$$

где $V'(z, \mathbf{r}) = V(z, \mathbf{r})(2\gamma m_0 / \hbar^2 k_z^2)$; γ — релятивистский фактор; m_0 — масса электрона; Δ_{\perp} — поперечный лапласиан; $V(z, \mathbf{r})$ — кристаллический потенциал. При записи уравнения (1) использовано условие $|\partial^2 \psi / \partial z^2| \ll |k_z \partial \psi / \partial z|$, означающее пренебрежение обратным рассеянием электронов. Выделим в кристаллическом потенциале флуктуирующую часть¹ δV , соответствующую тепловым колебаниям атомов

$$V(z, \mathbf{r}) = \langle V(z, \mathbf{r}) \rangle + \delta V(z, \mathbf{r}) \quad \langle \delta V \rangle = 0. \quad (2)$$

После усреднения (1) по флуктуациям δV приходим к уравнению

$$2ik_z \frac{\partial}{\partial z} \langle \psi \rangle + \Delta_{\perp} \langle \psi \rangle + k_z^2 \langle V(z, \mathbf{r}) \rangle \langle \psi \rangle + k_z^2 \langle \delta V(z, \mathbf{r}) \psi \rangle = 0. \quad (3)$$

Метод интегрирования уравнения (3) в отсутствие флуктуаций в приближении усредненного потенциала $\langle V(\mathbf{r}) \rangle$, зависящего лишь от поперечных координат, описан в [11].

Для преобразования последнего члена в уравнении (3) воспользуемся методом работы [13], предполагая, что $\delta V(z, \mathbf{r})$ можно рассматривать как марковский процесс по z . Будем далее полагать $\delta V(z, \mathbf{r})$ гауссовым случайным полем, что соответствует пренебрежению близкими столкновениями, приводящими к рассеянию электронов на большие углы. В этом случае можно воспользоваться соотношением [14]

$$\langle \delta V(z, \mathbf{r}) \psi \rangle = \int dz' \int d\mathbf{r}' \langle \delta V(z, \mathbf{r}) \delta V(z', \mathbf{r}') \rangle \left\langle \frac{\delta z(\delta V)}{\delta V(z', \mathbf{r}')} \right\rangle, \quad (4)$$

где $Z(\delta V)$ — функционал от гауссового случайного поля $\delta V(z, \mathbf{r})$. С учетом последнего соотношения для записи уравнения (3) в замкнутом виде необходимо выразить функциональную производную $\delta \psi / \delta V$ через ψ и статистические свойства поля δV . Используя метод работы [13], можно показать, что для решения уравнения (1) имеет место соотношение

$$\frac{\delta \psi(z, \mathbf{r})}{\delta V(z', \mathbf{r}')} = i \frac{k_z}{4} \frac{\delta V(z, \mathbf{r})}{\delta V(z', \mathbf{r}')} \psi(z, \mathbf{r}).$$

Период продольных колебаний волновой функции каналированного электрона в потенциальной яме глубиной $U_0 = 30$ эВ имеет порядок $\hbar c / U_0 \approx 10^2$ Å, что значительно превышает как расстояние между атомами кристалла, так и радиус корреляции тепловых колебаний. Поэтому будем флуктуации полагать δ -коррелированными по продольной координате, потенциал заменим на усредненный вдоль оси z

$$\begin{aligned} \langle \psi(z, \mathbf{r}) \delta V(z, \mathbf{r}) \rangle &= \langle \psi(z, \mathbf{r}) \rangle i \frac{k_z}{4} \iint d^2 \mathbf{r}' \langle \delta V(z, \mathbf{r}) \delta V(z, \mathbf{r}') \rangle \left\langle \frac{\delta V(z, \mathbf{r})}{\delta V(z, \mathbf{r}')} \right\rangle \equiv \\ &\equiv iW(\mathbf{r}) \langle \psi(z, \mathbf{r}) \rangle. \end{aligned}$$

Используя последнее соотношение, получаем

$$2ik_z \frac{\partial}{\partial z} \langle \psi \rangle + \Delta_{\perp} \langle \psi \rangle + k_z^2 \langle V(\mathbf{r}) \rangle \langle \psi \rangle + ik_z^2 W(\mathbf{r}) \langle \psi(z, \mathbf{r}) \rangle = 0. \quad (5)$$

Полученное уравнение позволяет полностью описать процесс рассеяния электронов на тепловых колебаниях атомов без учета отдачи. Рассеяние на атомных электронах может быть учтено введением дополнительного мнимого слагаемого в выражение для усредненного потенциала аналогично методу «мнимого потенциала» [1, 15]. Уравнение (5) описывает когерентную часть волновой функции, ответственную за появление дифракционной картины в распределении электронов, прошедших через монокристалл. Описание полного распределения потока электронов, включая диффузный фон, может быть выполнено с использованием функции взаимной когерентности [13] $\langle \psi(z, \mathbf{r}_1) \times \psi(z, \mathbf{r}_2) \rangle$. Наиболее полно возможности метода проявляются при исследовании осевого каналирования электронов.

¹ Штрих над V' здесь и везде в дальнейшем опущен.

2. Расчет для осевого каналирования электронов

Рассмотрим каналирование электронов с энергией 1—15 МэВ в монокристаллах кремния вдоль осей $\langle 100 \rangle$ и $\langle 111 \rangle$. В расчетах усредненных периодических потенциалов используется приближение Дойля—Гернера [16]. Для численного представления волновой функции каналированного электрона производилось разложение в ограниченный двумерный ряд Фурье

$$\psi(z, x, y) = \sum_{m=0}^N \sum_{n=0}^N \psi_{mn}(z) \exp \left[2\pi i \left(\frac{mx}{L_x} + \frac{ny}{L_y} \right) \right], \quad (6)$$

где L_x, L_y — поперечные размеры области, в которой задана волновая функция. Интегрирование уравнения (5) с использованием представления (6) легко может быть выполнено с помощью алгоритма быстрого преобразования Фурье методом последовательного учета дифракции и фокусировки электронов в усредненном потенциале канала на каждом шаге интегрирования [11]. Для более точного описания дифракции косых пучков использовалась уточненная схема расчета, соответствующая учету в уравнении (1) поправок, пропорциональных d^2/dz^2 [11]. При выполнении конкретных расчетов для функции $w(r)$ в выражении (5) использовалась следующая аппроксимация [17]:

$$W(r) \simeq \frac{Nd^3}{(\hbar v)^2} \int d^2k V_a^2(k) [1 - \exp(-k^2 \rho_{\perp}^2)] \exp(-r^2/2\rho_{\perp}^2), \quad (7)$$

где v — скорость электрона; N — плотность атомов среды; d — расстояние между атомами в цепочке; ρ_{\perp} — среднеквадратичная амплитуда колебаний атомов,

$$V_a(k) = \int dR V_a(R) \exp(-ikR)$$

— Фурье-компонента атомного потенциала $V_a(R)$. Рассеяние на атомных электронах, приводящее в основном к диффузному рассеянию релятивистских электронов, не учитывалось. В рассматриваемом диапазоне энергий электронное рассеяние примерно на порядок меньше рассеяния на ядрах [9].

В результате численного моделирования получена эволюция волновой функции при влете электронов в осевые каналы. При этом за счет когерентного рассеяния первоначально плоской или слабо расходящейся волны наблюдалось постепенное формирование связанных состояний и состояний надбарьерного движения.

Пусть $(\mathcal{E}_{\perp})_n$ и $\varphi_n(r)$ являются собственными значениями поперечной энергии и собственными волновыми функциями связанного движения электронов в кристаллических каналах. Используя полноту системы $\{\varphi_n(r)\}$, для любой волновой функции $\psi(z, r)$ можно выполнить разложение

$$\psi(z, r) = \sum_n C_n(z) \varphi_n(r) \exp[i\hbar^{-1}(\mathcal{E}_{\perp})_n^2 z/c]. \quad (8)$$

Поскольку в установившемся режиме $C_n(z) = \text{const}$, спектр значений $\{(\mathcal{E}_{\perp})_n\}$ можно получить, выполнив преобразование Фурье от $\psi(z, r_0)$ по z , зафиксировав при этом точку r_0 . Выполняя преобразование Фурье для различных точек r_0 , можно определить структуру собственных функций $\varphi_n(r)$. Результаты исследования энергетического спектра для точки $r_0=0$, соответствующей центру канала Si $\langle 100 \rangle$ и $\langle 111 \rangle$, представлены на рис. 1. Фурье-преобразование производилось для различных интервалов z : менялись и размеры «окна», по которому велось преобразование, и глубина расположения «окна» от входной поверхности. Из результатов расчетов следует, что спектральные пики, соответствующие сильно связанным состояниям, мало изменяются с глубиной. Это свидетельствует о том, что формирование состояний подбарьерного движения электронов происходит в непосредственной близости от поверхности кристалла $z=0$. Начиная с некоторой глубины z^* картина становится стационарной. Для электронов с энергией $E=4$ МэВ при каналировании вдоль оси $\langle 100 \rangle$ эта глу-

бина составляла около 0.25 мкм, а в случае каналирования вдоль оси $\langle 111 \rangle$ Si $z^* = 0.17$ мкм. Уменьшение z^* в данном случае, по-видимому, качественно отражает уменьшение длины экстинкции с ростом амплитуды соответствующих гармоник V_G при возрастании глубины потенциальной ямы. Результаты расчетов волновых мод (рис. 2) и энергетических спектров хорошо согласуются с приведенными в литературе результатами расчетов по методу многоволновой

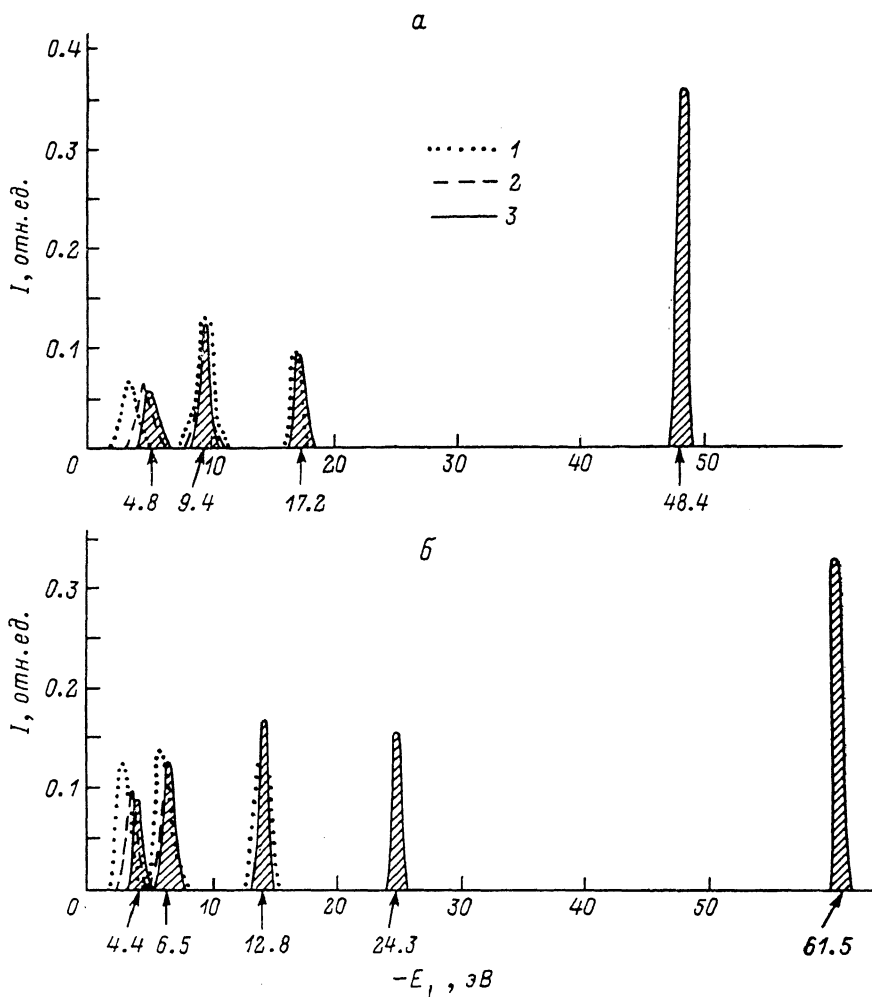


Рис. 1. Формирование энергетического спектра связанных состояний каналированного электрона с энергией 4 МэВ, падающего на кристалл параллельно оси $\langle 100 \rangle$ Si (а) и оси $\langle 111 \rangle$ (б).

Начальная расходимость пучка $\Delta\varphi = 0.25\varphi_{кр}$. 1 — спектр поперечного движения, соответствующий $0 < z < 0.32$ мкм; 2 — $0.32 < z < 0.64$ мкм; 3 (заштриховано) — $1.0 < z < 1.64$ мкм.

дифракции и результатами экспериментов по наблюдению спектров излучения каналированных частиц [17].

С помощью метода прямого интегрирования уравнения (5) были рассчитаны угловые распределения каналированных электронов на выходе из кристалла при различных начальных углах влета по отношению к оси. В расчетах учитывалось некогерентное рассеяние на ядрах решетки в приближении (7). Расчеты угловых распределений электронов с энергией 1 МэВ на выходе из монокристалла кремния вдоль оси $\langle 111 \rangle$ приведены на рис. 3. Толщина кристалла и углы влета электронов соответствовали параметрам эксперимента [2]. Из рис. 3 видно, что рост угла падения электронов от значения $\varphi = 0$ (а) до $\varphi = 0.17^\circ$ (б) приводит к исчезновению внутреннего осесимметричного кольца в угловом распределении электронов. Это связано, как показывают результаты

численного моделирования, с начальным заселением более высоковозбужденных состояний поперечного движения электронов. Расположение боковых дифракционных максимумов отражает структуру симметрии осевого канала $\langle 111 \rangle \text{Si}$.

Угловые распределения электронов, прошедших через кристалл толщиной 20 мкм (рис. 3, е), принимают вид сложной картины, в которой минимумы между боковыми дифракционными максимумами принимают характер прямых линий

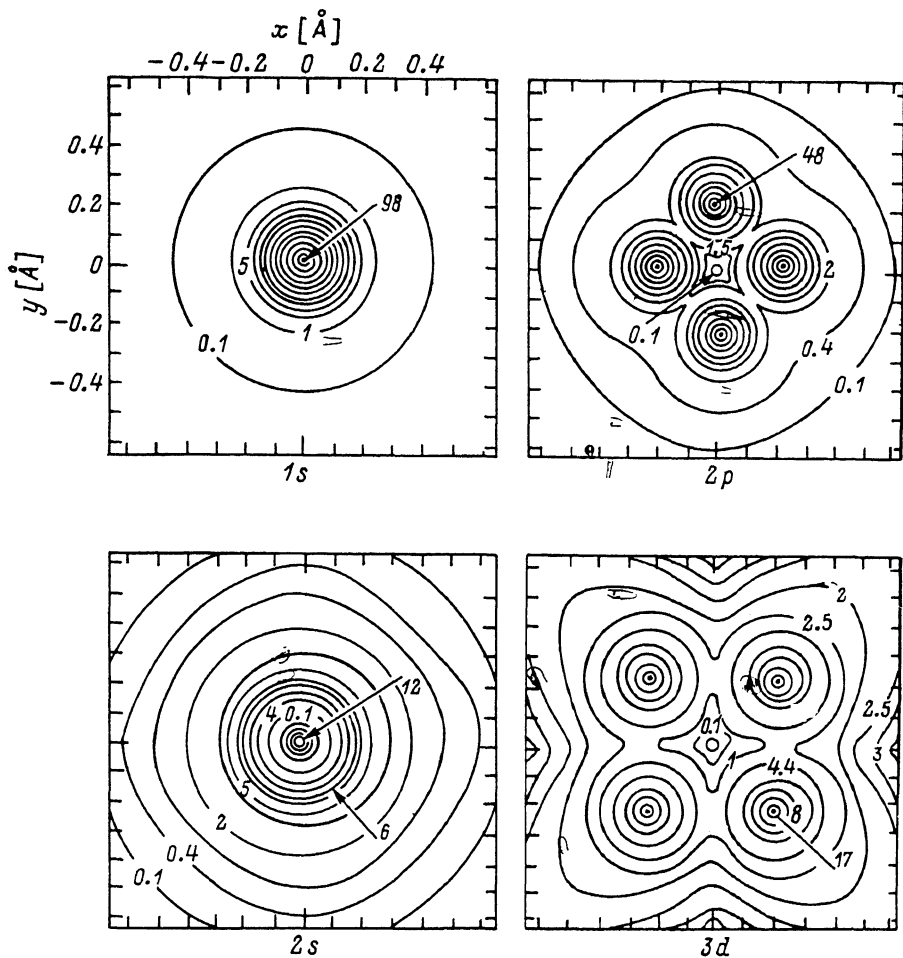


Рис. 2. Модовая структура волновых функций электронов с энергией 4 МэВ, каналированных вдоль оси $\langle 100 \rangle \text{Si}$, соответствующая энергетическому спектру на рис. 1, а для $1.0 < z < 1.64$ мкм.

Приведены линии равной вероятности, соответствующие максимумам энергетического спектра.

Кикучи, ориентированных параллельно плоскостям кристалла (110). Как показано в работе [17], неупругое рассеяние электронов с энергией $E \leq 2$ МэВ в плоскостном канале толстого кристалла приводит как раз к появлению минимума в угловом распределении в направлении плоскости.

Расчеты для осевого каналирования электронов с энергией 15 МэВ показали, что распределение электронов имеет выраженную осевую симметрию, интенсивность боковых максимумов мала. Угловое распределение прошедших электронов соответствует каналированию электронов вдоль отдельных атомных цепочек.

Как следует из рис. 1—3, развитая в настоящей работе модель позволяет описывать все основные особенности осевого каналирования электронов с энергией 1—20 МэВ. Для электронов с энергией около 1 МэВ преобладает дифракция. При этом угловое распределение прошедших электронов отражает струк-

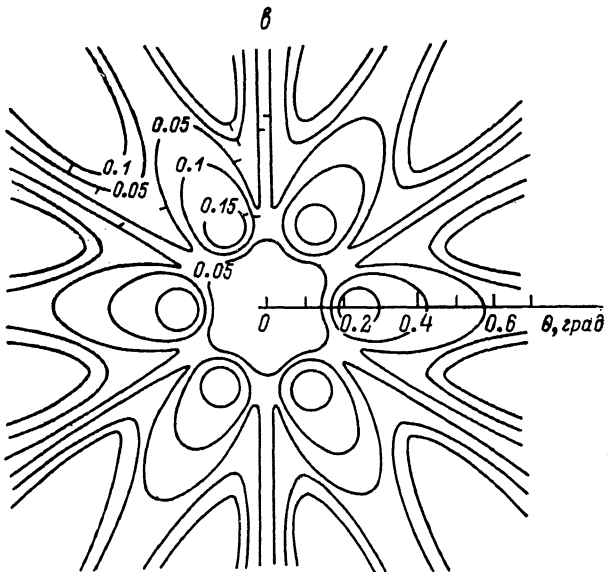
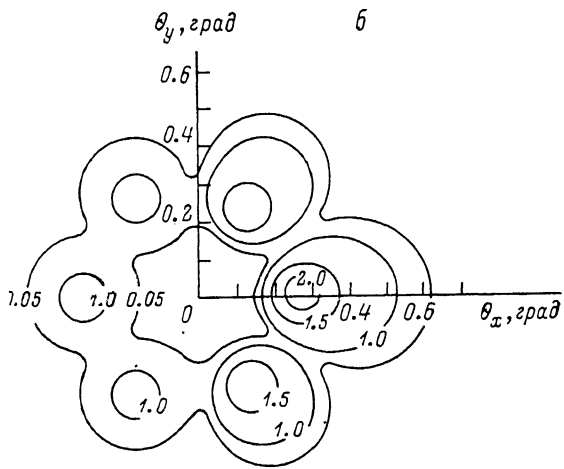
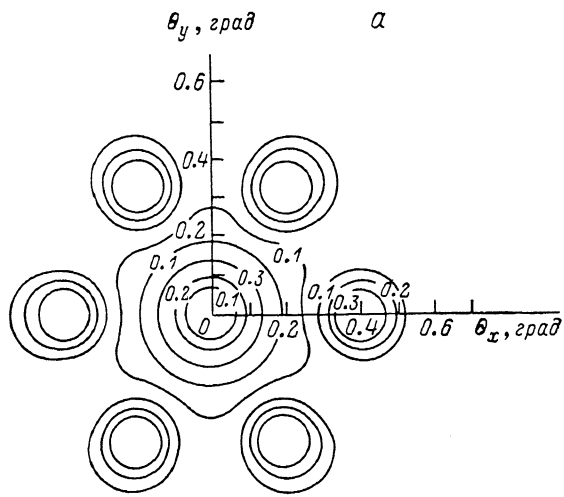


Рис. 3. Рассчитанные угловые распределения электронов с энергией 1 МэВ на выходе из монокристалла кремния, ось $\langle 111 \rangle$.

При расчетах использованы те же параметры, что и в эксперименте [2].

туру кристаллического потенциала. Для электронов с энергией ≥ 15 МэВ преобладают эффекты, характерные для каналирования вдоль отдельных осей кристалла.

Литература

- [1] *Andersen S. K., Bell F., Frandsen F., Uggerhoj E.* — Phys. Rev., 1973, v. B8, N 11, p. 4913—4925.
- [2] *Kaplin V. V., Plotnikov S. V., Tsekhanovsky I. A., Vorobiev S. A.* Phys. Lett., 1975, v. A54, N 6, p. 447—449.
- [3] *Andersen J. U., Andersen S. K., Augustyniak W. M.* K. Dansk. Vid. Selsk. Mat. Fys. Medd., 1977, v. 39, N 10, p. 1—58.
- [4] *Воробьев С. А., Нурмагамбетов С. Б., Каплин В. В., Розум Е. И.* ЖТФ, 1985, т. 55, № 2, с. 359—367.
- [5] *Faltø J., Gjønnes J.* Ultramicroscopy, 1985, v. 17, N 4, p. 329—335.
- [6] *Белошицкий В. В., Кумахов М. А.* ЖЭТФ, 1978, т. 74, № 4, с. 1244—1256.
- [7] *Beloshitsky V. V., Komarov F. F.* Physics Reports, 1982, v. 93, N 3, p. 117—197.
- [8] *Хирш П., Хови А., Николсон Р., Пэшли Л. В., Уэлан М.* Электронная микроскопия тонких кристаллов. М.: Мир, 1968. 574 с.
- [9] *Andersen J. U., Bonderup E., Laegsgaard E., Sorensen A. H.* Physica Scripta, 1983, v. 28, N 3, p. 308—330.
- [10] *Буренков А. Ф., Дудчик Ю. И., Комаров Ф. Ф.* ЖТФ, 1985, т. 55, № 11, с. 2184—2190.
- [11] *Дабатов С. Б., Огнев Л. И.* ЖТФ, 1988, т. 58, № 2, с. 277—288.
- [12] *Lervig Ph., Lindhard J., Nielsen V.* Nuclear Physics, 1967, v. A96, N 3, p. 481—504.
- [13] *Татарский В. И.* ЖЭТФ, 1969, т. 56, № 6, с. 2106—2117.
- [14] *Новиков Е. А.* ЖЭТФ, 1964, т. 47, № 5, с. 1919—1926.
- [15] *Оцуки Е.-Х.* Взаимодействие заряженных частиц с твердыми телами. М.: Мир, 1985. 280 с.
- [16] *Doyle P. A., Turner P. S.* Acta Cryst. A, 1968, v. 24, N 3, p. 390—397.
- [17] *Белошицкий В. В., Огнев Л. И.* ЖТФ, 1986, т. 56, № 9, с. 1786—1790.

Институт Атомной Энергии
им И. В. Курчатова
Москва

Поступило в Редакцию
12 февраля 1987 г.
В окончательной редакции
11 ноября 1987 г.