

УДК 539.21 : 539.16 : 04  
 © 1991

## ВЛИЯНИЕ ИЗОМОРФНЫХ ТОЧЕЧНЫХ ДЕФЕКТОВ НА ХАРАКТЕРИСТИКИ ИЗЛУЧЕНИЯ РЕЛЯТИВИСТСКИХ ЭЛЕКТРОНОВ ПРИ КАНАЛИРОВАНИИ

С. А. Михеев

Рассмотрено влияние изоморфных точечных дефектов на характеристики излучения электронов при каналировании. На основании разработанной теории сделаны численные оценки, показывающие, что при концентрациях  $\leq 10^{-3}$  никаких изменений практически не происходит. При концентрациях примесных атомов  $10^{-2}$ — $10^{-1}$  меняются положение линий и их ширины, обусловленные рассеянием каналированных электронов, причем для разных примесей знак изменения может быть разным.

В последнее время появляется все больше работ, в которых рассматривается возможность определения некоторых характеристик кристаллов, таких, например, как температура Дебая [<sup>1-3</sup>], корреляции тепловых смещений атомов [<sup>4, 5</sup>], структура дислокаций в алмазе [<sup>6, 7</sup>] и т. д., по спектрам излучения каналированных электронов. В рамках этого направления в настоящей работе исследуется влияние изоморфных точечных дефектов (дефектов замещения) на характеристики излучения электронов при каналировании. Такая задача представляет определенный интерес, поскольку эксперименты могут проводиться с кристаллами кремния с примесями, например бора, которые создают именно дефекты замещения. Концентрация примесей может достигать нескольких единиц  $\cdot 10^{21}$  см<sup>-3</sup>, т. е.  $\sim 10$  %. Как будет показано, разрабатываемая теория справедлива вплоть до  $\sim 10$ %-ной концентрации примесей, охватывая, таким образом, весь возможный диапазон.

### 1. П о с т а н о в к а з а д а ч и

Будем исследовать влияние изоморфных точечных дефектов на излучение электронов при каналировании, основываясь в основном на идеях работ [<sup>8, 9</sup>]. Взаимодействие каналированной частицы с кристаллом можно разделить на неупругое взаимодействие с электронами кристалла и упругое с атомами, находящимися в тепловом движении (фононами). В рамках модели газа свободных электронов неупругое взаимодействие легко учитывается путем изменения плотности. Рассмотрим подробнее упругое взаимодействие. Для упругих процессов гамильтониан взаимодействия сводится к сумме энергий взаимодействия с отдельными атомами

$$v(\mathbf{r}) = \sum_{a \neq d} v_0(\mathbf{r} - \mathbf{r}_a) + \sum_d v_d(\mathbf{r} - \mathbf{r}_d). \quad (1)$$

Здесь  $\mathbf{r}_a$ ,  $\mathbf{r}_d$  — координаты основных и примесных атомов;  $v_0$ ,  $v_d$  — потенциалы этих атомов.

Уравнение Дирака, описывающее движение релятивистского электрона, может быть сведено к уравнению Клейна—Гордона (см., например, [<sup>10</sup>])

$$\{-\hbar^2 c^2 + m^2 c^4 - 2Ev(\mathbf{r})\} \psi(\mathbf{r}) = E^2 \psi(\mathbf{r}), \quad (2)$$

$E$  — энергия электрона. Для решения этого уравнения можно использовать теорию возмущений [8, 10]. При относительно малых концентрациях дефектов в качестве нулевого приближения можно рассматривать движение частиц в непрерывном потенциале осей или плоскостей кристалла без примесей, усредненным по поперечным тепловым колебаниям атомов

$$U_0^T(\mathbf{r}_\perp) = n \int d\mathbf{r}_\parallel \left( \sum_a v(\mathbf{r} - \mathbf{r}_a) \right), \quad (3)$$

$n$  — плотность атомов оси или плоскости. В нулевом приближении волновую функцию можно записать в виде

$$|i_0\rangle = \psi_0^i(\mathbf{r}) = (NS_0)^{-1/2} \exp(i\mathbf{p}_\parallel \mathbf{r}_\parallel / \hbar c) \psi_i(\mathbf{r}_\perp), \quad (4)$$

где  $\mathbf{p}_\parallel$  — продольный импульс частицы,  $NS_0$  — нормировочная площадь (длина), а волновая функция поперечного движения  $|i\rangle = \psi_i(\mathbf{r}_\perp)$  удовлетворяет уравнению Шредингера с релятивистской массой и непрерывным потенциалом (3) [11].

Возмущение, т. е. разница между реальным потенциалом кристалла и непрерывным потенциалом (3), приводит к сдвигу уровней поперечной энергии и переходам между уровнями, т. е. к их уширению. Сдвиг  $i$ -го уровня определяется величиной

$$\Delta E_{\perp i} = \langle i_0 | \Delta V | i_0 \rangle, \quad (5)$$

а вероятность переходов имеет вид

$$dW_{i_f} = \frac{2\pi}{\hbar} \int \frac{NS_0 d\mathbf{p}_\parallel}{(2\pi)^m} |M_{i_f}|^2 \delta(E_{\parallel i} + E_{\perp i} - E_{\parallel f} - E_{\perp f}) d\tau_\perp, \quad (6)$$

где  $m=1$  (2) для оси (плоскости),  $d\tau_\perp$  — интервал конечных состояний поперечного движения

$$M_{i_f} = \langle f_0 | \Delta V | i_0 \rangle.$$

Поскольку конечное состояние кристалла не фиксируется, то (5), (6) необходимо усреднить по тепловым колебаниям атомов кристалла [12]. Перейдем теперь к конкретному исследованию сдвигов и уширений уровней поперечной энергии для осевого и плоскостного каналирования электронов.

## 2. Сдвиги и ширины уровней поперечной энергии

Очевидно, что наибольшим образом влияние дефектов сказывается на характеристиках, связанных с одной осью или плоскостью состояний поперечного движения каналированных электронов. Вследствие этого рассмотрение такого влияния можно проводить в рамках приближения изолированной оси (плоскости). Обратимся сначала к осевому каналированию. В этом случае (4) имеет вид

$$\begin{aligned} \langle i_0 | \Delta V | i_0 \rangle &= \frac{1}{Ld_x} \sum_{a \neq d}^L \int d\rho dz |\psi_i(\rho)|^2 v_0(\mathbf{r} - \mathbf{r}_a) + \frac{1}{Ld_x} \times \\ &\times \sum_a^l \int d\rho dz |\psi_i(\rho)|^2 v_d(\mathbf{r} - \mathbf{r}_a) - \int d\rho |\psi_i(\rho)|^2 U_0^T(\rho), \end{aligned} \quad (7)$$

где  $d_x$  — расстояние между атомами оси,  $L$  — число атомов в оси,  $l$  — число примесных атомов ( $q=l/L$  — концентрация примесных атомов; примесные атомы расположены случайно, с равномерным распределением). Для получения величин сдвигов уровней поперечной энергии  $\Delta E_{\perp i}$ , выражение (7) необходимо усреднить по тепловым колебаниям с плотностью вероятности смещений для основных и примесных атомов

$$P(\{r_{a,d}\}) = \prod_{a,d} \frac{1}{\sqrt{2\pi u_{a,d}^2}} \exp\{-\frac{1}{2}(\mathbf{z}_{a,d} - \mathbf{z}_{a,d}^0)^2 / 2u_{a,d}^2\} \frac{1}{\sqrt{2\pi u_{a,d}^2}} \exp\{-\frac{1}{2}p_{a,d}^2 / 2u_{a,d}^2\}, \quad (8)$$

где  $u_{a,d}$  — одномерные амплитуды тепловых колебаний основных и примесных атомов; при этом в  $u_d$  могут входить смещения, связанные с разницей в их ионных радиусах (предполагается независимость колебаний отдельных атомов кристалла). Окончательно для сдвига  $i$ -го уровня получим

$$\Delta E_i = \langle i_0 | \Delta V | i_0 \rangle_T = \frac{L-l}{L} \int d\rho |\psi_i|^2 U_0^T(\rho) + \frac{l}{L} \int d\rho |\psi_i|^2 U_0^T(\rho) - \int d\rho |\psi_i|^2 U_0^T(\rho) = q \langle i | U_d^T - U_0^T | i \rangle. \quad (9)$$

При определении вероятностей переходов прежде всего рассмотрим квадрат модуля матричного элемента  $M_{if}$

$$\begin{aligned} |M_{if}|^2 &= \left| \frac{1}{Ld_x} \int dz e^{-i\Delta p_{\parallel} z} \left[ \sum_{a \neq d}^L \langle f | v_0 | i \rangle + \sum_d^l \langle f | v_d | i \rangle \right] \right|^2 = \\ &= \left| \frac{1}{Ld_x} \int dz e^{-i\Delta p_{\parallel} z} \sum_{a \neq d}^L \langle f | v_0 | i \rangle \right|^2 + \left| \frac{1}{Ld_x} \int dz e^{i\Delta p_{\parallel} z} \sum_d^l \langle f | v_d | i \rangle \right|^2 + \\ &+ \left\{ \frac{1}{L^2 d_x^2} \int dz e^{-i\Delta p_{\parallel} z} \sum_{a \neq d}^L \langle f | v_0 | i \rangle \int dz' e^{-i\Delta p_{\parallel} z'} \sum_d^l \langle i | v_d | f \rangle + \text{к. с.} \right\} \quad (10) \end{aligned}$$

(будем рассматривать только некогерентные слагаемые; смысл и значение когерентного рассеяния были подробно исследованы в [8]). Из сравнения (10) и соответствующих выражений для кристалла без дефектов видно, что после усреднения по тепловым колебаниям первым членом определяется рассеяние на основных атомах кристалла

$$\frac{(1-q)}{L} (\langle |f| V_0 | i \rangle^2)_T - \frac{1}{L} |\langle f | V_0 | i \rangle_T|^2$$

(здесь второй член описывает подавление рассеяния за счет периодичности расположения атомов в оси), а вторым членом в (10) определяется рассеяние на случайно расположенных примесных атомах

$$\frac{q}{L} (\langle |f| V_d | i \rangle^2)_T, \quad V_{0,d} = \frac{1}{d_x} \int dz e^{i\Delta p_{\parallel} z} v_{0,d}(\mathbf{r}).$$

Третий член имеет вид

$$\frac{1}{L^2} e^{-(u_a^2 + u_d^2) \Delta p_{\parallel}^2 / 2} (\langle |f| V_0 | i \rangle^2)_T (\langle |i| V_d | f \rangle)_T \sum e^{i\Delta p_{\parallel} z_0^a} \sum e^{-i\Delta p_{\parallel} z_0^d} + \text{к. с.}$$

и равен нулю в силу случайного распределения расположения дефектов. Окончательно для ширины уровней поперечной энергии, получающихся путем суммирования вероятностей переходов по конечным состояниям, имеем

$$\begin{aligned} \Gamma_i &= \frac{d_x}{\hbar c} \{ (1-q) [ \langle |i| U_0^2 | i \rangle_T^2 - \langle |i| U_0 | i \rangle_T^2 ] + q [ \langle |i| U_d^2 | i \rangle_T^2 - \\ &- \langle |i| U_d | i \rangle_T^2 ] - \langle i | ((U_0)_T^2 | i \rangle + | \langle |i| U_0 | i \rangle_T |^2 ], \\ &U_{0,d} = \frac{1}{d_x} \int dz v_{0,d}(\mathbf{r}). \quad (11) \end{aligned}$$

Из вышеизложенного, таким образом, очевидны и границы применимости выражений (9), (11). Кроме требования для выполнения теории возмущений  $\Delta E_{\pm i, f}, \Gamma_{i, f} < |E_i - E_f|$ , накладывается и требование на

максимальную концентрацию дефектов, при которой еще можно считать их случайно расположенными  $q < 10^{-1}$ .

Достаточно просто получить выражения и для случая плоскостного каналирования

$$\Delta E_{\perp i} = q \langle i | U_a^T(x) - U_0^T(x) | i \rangle, \quad (12)$$

$$\Gamma_i = \frac{n}{\pi \hbar c} \int_0^{\infty} d\rho \{ (1-q) [ \langle i | U_0^2 | i \rangle_T^a - ( \langle i | U_0 | i \rangle^2 )_T^a ] + q [ \langle i | U_a^2 | i \rangle_T^d - ( \langle i | U_a | i \rangle^2 )_T^d ] - e^{-\rho^2 u^2} [ \langle i | ( (U_a)_T^a )^2 | i \rangle - | \langle i | U_0 | i \rangle_T^a |^2 ] \},$$

$$U_{0,a}^T = n \int d\rho (v_{0,a}(\mathbf{r}))_{T,a}^{\rho}, \quad U_{0,a} = \int d\rho e^{i\rho z} v_{0,a}(\mathbf{r}). \quad (13)$$

Таким образом, используя развитую теорию и методы решения задачи в нулевом приближении [13, 14], можно перейти к оценкам влияния изоморфных дефектов на характеристики излучения каналированных электронов.

### 3. Численные оценки влияния дефектов

Численные оценки сдвигов и ширины уровней поперечной энергии довольно легко провести, аппроксимируя волновые функции каналированных электронов следующими выражениями: для оси

$$|1s\rangle = \psi_{1s} = \frac{1}{(\pi)^{1/2} d_{1s}} e^{-\rho^2/2d_{1s}^2},$$

$$|2p\rangle = \psi_{2p} = \frac{1}{(\pi)^{1/2} d_{2p}^2} e^{-\rho^2/d_{2p}^2} e^{\pm i\varphi}, \quad (14)$$

( $\rho, \varphi$  — поперечные координаты), для плоскости

$$|0\rangle = \psi_0 = \frac{1}{(2\pi)^{1/4} (d_0)^{1/2}} e^{-x^2/4d_0^2},$$

$$|1\rangle = \psi_1 = \frac{3^{3/4}}{(2\pi)^{1/4} (d_1)^{3/2}} e^{-3x^2/4d_1^2} \quad (15)$$

( $x$  — поперечная координата). Здесь  $d_i$  — среднеквадратичные расстояния состояний поперечного движения до оси или плоскости, причем их величины брались из точных расчетов с помощью методов, развитых в [13, 14]. Очевидно, что точный вид волновых функций при  $r_{\perp} \rightarrow \infty$  не важен, а в области тепловых колебаний формулы (14), (15) достаточно хорошо их описывают.

При вычислениях в качестве потенциала использовалась аппроксимация Дойля—Тернера расчетов по модели Хартри—Фока [15], модифицированная для малых расстояний от ядра ( $r_{\min} \ll \max \{d_i, u_{a,a}\}$ ) (см. подробнее [16]). Для матричных элементов  $\langle i | U_{0,a}^T | i \rangle$  получим следующие формулы:

$$\langle 1s | U^T | 1s \rangle = \sum_j C_j^0 (\chi_j^2 d_{1s}^2 + 1)^{-1}, \quad \langle 2p | U^T | 2p \rangle = \sum_j C_j^0 (\chi_j^2 d_{2p}^2/2 + 1)^{-2},$$

$$\langle 0 | U^T | 0 \rangle = \sum_j C_j^n (2\chi_j^2 d_0^2 + 1)^{-1/2}, \quad \langle 1 | U^T | 1 \rangle = \sum_j C_j^n (2\chi_j^2 d_1^2/3 + 1)^{-3/2},$$

$$C_j^0 = 2e^2 a_j (2u^2 b_j^2 + 1)/d_j, \quad C_j^n = 2e^2 n a_j (\pi)^{1/2} / b_j^2 (2u^2 b_j^2 + 1)^{1/2},$$

$$\chi_j = b_j^2 / (2u^2 b_j^2 + 1), \quad (16)$$

где  $a_j, b_j$  выражаются через коэффициенты аппроксимации Дойля—Тернера для электронных факторов рассеяния  $\alpha_j$  и  $\beta_j$

$$b_j^2 = (2\pi)^2 / \beta_j, \quad a_j = a_0 \alpha_j b_j^2, \quad (17)$$

$a_0$  — боровский радиус.

Направление	Энергия, МэВ	Переход	$u, \text{ \AA}$	$E_{if}^0$	$E_{if}^p$		$E_{if}^n$	
					1%	5%	1%	5%
<100>	3.5	2p-1s	0.078	3.25	3.23	3.14	3.29	3.44
					3.23	3.15	3.30	3.50
					3.23	3.13	3.28	3.39
(110)	54.0	1-0	0.078	125.2	124.7	122.7	126.2	130.0
					124.7	122.3	126.7	132.5
					124.7	122.9	125.8	128.3
					0.100			

В табл. 1 приведены результаты расчетов положений линий излучения для кристалла кремния без примесей ( $q < 10^{-3}$ )  $E_{if}^q$  и для полупроводников  $p$ - и  $n$ -типов  $E_{if}^p$  и  $E_{if}^n$  (кремний, легированный бором и мышьяком, концентрация 1 и 5 %). Довольно заметно отличие в положении линий излучения даже при 1%-ной концентрации примесей ( $\sim 1$  кэВ для  $n$ -типа). Интересным также представляется вопрос о чувствительности положения линии к  $u_d$ . В табл. 1 приведены расчетные положения линий при  $u_d = 0.1$  и  $0.05 \text{ \AA}$  ( $u_0 = 0.078 \text{ \AA}$ ). Видно, что при 5%-ной концентрации положение линий также довольно заметно меняется.

Таблица 2

Ширины нижнего уровня поперечной энергии (значения  $\Gamma$  — в эВ)

Направление	Энергия, МэВ	$\Gamma_0$	$\Gamma_p$		$\Gamma_n$	
			1%	5%	1%	5%
<100>	3.5	1.79	1.77	1.68	1.89	2.29
(110)	54.0	0.467	0.450	0.434	0.488	0.573

Выражения для ширин весьма громоздки, поэтому приведем только значения ширин нижнего уровня поперечной энергии, на которые наличие дефектов сказывается наибольшим образом (табл. 2). Как и для положения линий излучения, видно, что ширины могут быть меньше (для примесей бора) и больше (для мышьяка), чем для чистого кремния. Различие при этом может достигать  $\sim 25\%$  (для 5%-ной концентрации мышьяка).

Проведенные расчеты позволяют сделать следующие выводы. Изоморфные точечные дефекты при концентрациях  $\leq 10^{-3}$  практически не оказывают влияния на характеристики излучения и движения каналированных электронов. В то же время при увеличении концентраций до  $\sim 10^{-2} - 10^{-1}$  изменяются как положение линий излучения, так и их ширины по сравнению с чистым кремнием. Это изменение особенно сказывается на ширинах линий излучения в кремнии, легированном атомами с большим зарядом ядра. Разработанная теория позволяет рассчитывать изменения, которые необходимо учитывать при проведении спектроскопических экспериментов в полупроводниках с большой проводимостью, и в то же время с помощью каналирования можно исследовать некоторые характеристики примесей.

#### Список литературы

- [1] Datz S., Berman B. L., Dahling B. A. et al. // Nucl. Instrum. Meth. 1986. V. B13. P. 19-22.
- [2] Park H., Kephart J. O., Klein R. K. et al. // Phys. Rev. B. 1987. V. 35. N 1. P. 13-17.

- [3] Михеев С. А., Тулупов А. В. // Тез. докл. XIX Всес. совещ. по физике взаимодействия заряженных частиц с кристаллами. М., 1989. С. 85.
- [4] Михеев С. А., Тулупов А. В. // ФТТ. 1987. Т. 29. № 2. С. 449—455.
- [5] Михеев С. А., Тулупов А. В. // ЖТФ. 1987. Т. 57. № 11. С. 2244—2246.
- [6] Park H., Kerhart J. O., Klein R. K. et al. // J. Appl. Phys. 1985. V. 57. N 5. P. 1661—1664.
- [7] Базылев В. А., Михеев С. А., Тулупов А. В. // ФТТ. 1988. Т. 30. № 8. С. 2445—2453.
- [8] Базылев В. А., Головизнин В. В. // ЖЭТФ. 1982. Т. 82. № 4. С. 1204—1220.
- [9] Базылев В. А., Головизнин В. В. // ДАН СССР. 1982. Т. 266. № 5. С. 1112—1114.
- [10] Базылев В. А., Жеваго Н. К. Излучение быстрых частиц в веществе и во внешних полях. М., 1987. 269 с.
- [11] Lervig P., Lindhard I., Nielsen V. // Nucl. Phys. 1967. V. 96A. N 2. P. 481—504.
- [12] Тер-Микаэлян М. Л. Влияние среды на электромагнитные процессы при высоких энергиях. Ереван, 1969. 457 с.
- [13] Тулупов А. В. // ФТТ. 1981. Т. 23. № 1. С. 46—50.
- [14] Михеев С. А., Тулупов А. В. // ФТТ. 1985. Т. 27. № 8. С. 1307—1313.
- [15] Doyle P. A., Turner P. S. // Acta Cryst. 1968. V. 24A. N 3. P. 390—397.
- [16] Михеев С. А. // Тез. докл. XX Всес. совещ. по физике взаимодействия заряженных частиц с кристаллами. М., 1990. С. 72.

Институт атомной энергии  
им. И. В. Курчатова  
Москва

Поступило в Редакцию  
25 июня 1990 г.