1991 ЖУРНАЛ ТЕХНИЧЕСКОЙ ФИЗИКИ Том 61, в. 2
1991 JOURNAL OF TECHNICAL PHYSICS Vol. 61, N 2

05

ДЕКАНАЛИРОВАНИЕ ЭЛЕКТРОНОВ ВЫСОКИХ ЭНЕРГИЙ НА ДИСЛОКАЦИЯХ

В. В. Белошицкий

Рассмотрено прохождение каналированных электронов через область, искаженную краевой или винтовой дислокацией. Показано, что этот процесс можно описать в приближении скачкообразного изменения положения атомных рядов и плоскостей, которое приводит к деканалированию в среднем около 30 % частиц, проходящих через искаженную область. Установлена максимальная длина деканалирования в дислокационном кристалле и пороговая энергия электронов, выше которой длина деканалирования уменьшается с ростом энергии. Получены приближенные оценки этих величин для кремния и вольфрама.

Исходя из проведенного анализа микроскопической картины прохождения каналированных частиц через дислокации, рассмотрен принцип детального равновесия и сформулировано общее уравнение переноса, описывающее кроме обычного многократного рассеяния также и деканалирование на дислокациях.

Дислокации создают в кристалле упругие деформации, которые распространяются на значительные расстояния. С ростом энергии E частиц возрастают требования к качеству кристалла, так как критический угол каналирования ψ_c уменьшается как $1/\sqrt{E}$. Квере определил [1] критический радиус изгиба атомных рядов и плоскостей, при котором возможно каналирование ионов, и исходя из этого нашел диаметр области в окрестности дислокации, где оно невозможно. Диаметр этих цилиндрических областей равен

$$\lambda_a = (abdE/(\beta Ze^2))^{1/2}$$

для аксиального и

$$\lambda_p = (Eb/(\alpha Ze^2 N_0 d_p))^{1/2}$$

для планарного каналирования соответственно, где $\beta = 15.8$, $\alpha = 1.45$ для краевой и $\beta = 5.6$ для винтовой дислокаций; b — вектор Бюргерса; N_0 — атомная плотность d; d_p — пространственный период атомов цепочки или плоскостей; a — радиус экранирования Томаса—Ферми. Этот диаметр в несколько раз меньше, чем длина пути $\lambda \approx 2\pi d/\psi_c$, на котором происходит отклонение частицы атомной цепочкой или плоскостью.

Поэтому возможны проскакивание некоторых частиц через эту искривленную область и их каналирование в последующих прямолинейных участках. Путем машинного моделирования в [2] определена вероятность такого проскакивания ионов, как возможность попасть в область прицельных параметров, где нет сильного рассеяния и происходит устойчивое каналирование, и введен эффективный диаметр дислокации

$$\lambda_{a(p)}^{ef} = W_{a(p)} \lambda_{a(p)},$$

где $W_{a(p)}$ — средняя вероятность деканалирования при прохождении поврежденного участка диаметром λ_a (или λ_p).

Однако для отрицательных частиц величина $W_{a(p)}$ будет другой, кроме того, необходимо исследовать влияние когерентного рассеяния на атомных плоскостях и осях. Это представляет интерес в связи с проведением в последнее время экспериментов по каналированию при высоких энергиях ($E > 100$ ГэВ).

Рассмотрим простую модель краевой дислокации (см. рисунок), которая заключается в том, что криволинейные участки заменены ломаной линией. Вероятность рассеяния на наклонных участках цепочек можно легко получить в приближении случайных столкновений с цепочками [3]. В приближении для непрерывного потенциала $U(r_\perp) = \alpha_1/r_\perp$ при $\alpha_1 = 2Ze^2a/3d$ рассеяние в поперечной (относительно атомной цепочки) плоскости на угол $\pi/2$ происходит с вероятностью $\omega = (4a)/(\pi^2 r_0^2)$ (где πr_0^2 — площадь поперечной плоскости, приходящаяся на одну атомную цепочку) на единице длины проекции пути в этой плоскости. Путь частицы в искривленной области, где каналирование нарушено, составляет величину порядка λ_a. Заметим, что при уменьшении угла φ между линией дислокации и импульсом частицы уменьшается эффективный размер области, где каналирование нарушено. Это происходит из-за уменьшения величины критического радиуса изгиба при косом падении на дислокацию. Однако длина пути в этой области остается постоянной. В поперечной плоскости проекция пути составит величину порядка $\lambda_a \psi_c$. Вероятность рассеяния на цепочке составит, таким образом, величину

$$W_s = 4a\lambda_a \psi_c / \pi^2 r_0^2 \ll 1.$$

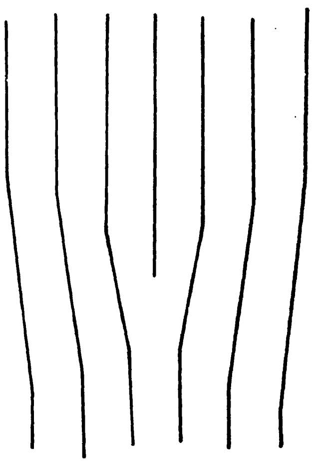

Схема модели краевой дислокации.

Мы видим, что в случае аксиального каналирования достаточно учесть сдвиг цепочек. Этот теоретический вывод подтверждает сформулированное эмпирически, исходя из машинного расчета, Ван Флитом [2] правило. Так как рассеянием на искривленных участках атомных цепочек можно пренебречь, то можно считать, что при переходе из одного регулярного участка в другой поперечный импульс сохраняется. Это эквивалентно переходу из одного кристалла в другой в случае сложной мишени, состоящей из двух кристаллов [4].

Ниже мы приводим простые формулы для вычисления вероятности деканалирования в приближении изолированной атомной цепочки.

Если частица выходит из режима каналирования в точке ρ и входит в точке $\rho' = |\rho + \mathbf{\Delta}|$, где $\mathbf{\Delta}$ — сдвиг цепочек, то ее поперечная энергия изменяется от $E_\perp = (p_\perp^2/2m) + U(\rho)$ к $E'_\perp = (p_\perp^2/2m) + U(\rho')$. Из условия захвата в связанное состояние $E'_\perp < 0$ имеем

$$U(\rho') - U(\rho) + U(\rho_{in}) \leqslant 0, \tag{1}$$

где ρ_{in} есть точка поворота, определяемая условием $E_\perp = U(\rho_{in})$.

Вероятность деканалирования частицы при прохождении дислокации с заданной поперечной энергией будет равна

$$C(\rho_{in}) = 1 - S'(\rho_{in})/S(\rho_{in}), \quad S(\rho_{in}) = \pi\rho_{in}^2,$$

$$S'(\rho_{in}) = \int\limits_0^{\rho_{\perp in}} \varphi_m \rho \, d\rho, \tag{2}$$

где φ_m определяется из условия

$$U\left(\sqrt{\rho^2 + \Delta^2 - 2\rho\Delta\cos\varphi_m}\right) = U(\rho) - U(\rho_{in})$$

и предполагается статистически равновесное (однородное) распределение в поперечной плоскости по ρ.

При условии, что распределение по ρ_{in} однородно в пределах от 0 до ρ_{in} (ρ_{in} определяет максимальное удаление от цепочки при связанном движении в пределах одной цепочки), получаем вероятность деканалирования

$$\chi = 1 - \frac{1}{\rho_{in}^2} \int_0^{\rho_m} C(\rho_{in}) \rho_{in} d\rho_{in}. \tag{3}$$

При наклонном падении пучка под углом ψ_{in} величина ρ_m находится из условия (начального захвата)

$$\frac{1}{2} E\psi_{in}^2 + U(\rho_{in}) = 0.$$

Рассмотрим планарное каналирование. В этом случае возможно отражение от искривленных плоскостей при малых углах изгиба.

Если ось x направлена вдоль плоскости скольжения (вектора Бюргерса $\mathbf{b}$), а ось y нормальна к ней, то смещение по оси x равно [5]

$$U_x(x, y) = \frac{b}{2\pi} \left\{ \operatorname{arctg} \frac{y}{x} + \frac{1}{2(1-\sigma)} \frac{xy}{x^2+y^2} \right\}, \tag{4}$$

где σ — коэффициент Пуассона.

Угол наклона плоскости в области искажения в нашей модели (см. рисунок) равен (на расстоянии λ_p)

$$\frac{\partial U_x(x=\lambda_p,\ y=0)}{\partial y} = \frac{(3-2\sigma)\, b\psi_{c,a}}{4\pi(1-\sigma)\sqrt{br_0}} \sqrt{\frac{a}{\pi} \frac{d_p}{r_0}} \approx \frac{3}{4} \frac{\psi_{c,a}}{\pi}, \tag{5}$$

где d_p — расстояние между плоскостями, $\psi_{c,a}$ — критический угол для некоторой оси, πr_0^2 — площадь этого осевого канала.

Этот угол оказывается примерно равен критическому углу плоскостного каналирования. Следовательно, при входе в искаженный участок частицы не будут отражаться, так как их поперечная энергия будет выше барьера. Поскольку изменения поперечного импульса при этом будут незначительны, то проблема опять сводится к перезахвату во втором прямолинейном участке.

Те же рассуждения, что и для аксиального случая, приводят к следующей формуле для вероятности деканалирования:

$$\chi = 1 - \frac{2}{d_p} \int_0^{d_p/2} \frac{2dx_{in}}{T(x_{in})} \int_{x_{in}}^{x_{\max}} \frac{dx}{\sqrt{2m(E_\perp - U(x))}}. \tag{6}$$

Для приближения планарного непрерывного потенциала параболой

$$U(x) = -kx^2, \quad -\frac{d}{2} \leqslant x \leqslant \frac{d_p}{2} \tag{7}$$

возможно дальнейшее упрощение

$$\chi = 1 - \frac{1}{d_p} \int_0^{d_p/2} \frac{2dx_{in}}{T(x_{in})\sqrt{2mk}} \ln \left| \frac{(x_1 + \sqrt{x_1^2 - x_{in}^2})(x_2 + \sqrt{x_2^2 - x_{in}^2})}{x_{in}^2} \right|,$$

$$T = \frac{4}{\sqrt{2mk}} \ln \left| \left(\frac{d_p}{2} + \sqrt{\left(\frac{d_p}{2}\right)^2 - (x_{in})^2} \right) \Big/ x_{in} \right|, \tag{8}$$

где

$$x_1 = \frac{x_{in}^2 + \Delta^2}{2\Delta}, \quad x_2 = \frac{x_{in}^2}{2(d_p - \Delta)} + \frac{d_p - \Delta}{2}.$$

В табл. 1 приведены величины вероятности деканалирования для Si $\langle 111 \rangle$ и Si (110) в зависимости от смещения цепочек или плоскостей. Последнее определяется углом наклона вектора b относительно направления каналирования, т. е. углом между $\mathbf{b}$ и $\mathbf{v}$: $\Delta = b \sin \varphi$.

Отметим, что если использовать относительные величины, то в (6) и (7) нет зависимости от величины d_p, т. е. этот результат является общим.

Таблица 1

Вероятность деканалирования χ электронов на дислокации в зависимости от смещения

ΔÅ	χ Ось ⟨111⟩ Si	χ Плоскость {110} Si	ΔÅ	χ Ось ⟨111⟩ Si	χ Плоскость {110} Si
0.1	0.11	0.16	0.6	0.46	0.47
0.2	0.20	0.24	0.7	0.51	0.48
0.3	0.28	0.31	0.8	0.55	
0.4	0.35	0.37	0.9	0.59	
0.5	0.41	0.42	1.0	0.63	

Кривизна каналов, а вместе с ней и поперечник $\lambda^{ef}_{a(p)}$ также зависят от φ. Это дает дополнительный весовой множитель $\sin\varphi$ при усреднении по φ вероятности деканалирования χ. После этого усреднения было получено $W_a=0.2$, $W_p=0.3$.

Вероятность деканалирования на дислокациях на единице пути равна $\gamma=N_d\lambda^{ef}$, где N_d — плотность дислокаций на единицу площади. Эта вероятность дает убыль каналированных частиц с толщиной кристалла по закону $e^{-\gamma t}$, соответственно модифицируется функция деканалирования $\chi_d(t)=1-e^{-\gamma t}(1-\chi(t))$. Используя функцию деканалирования для идеального кристалла, полученную ранее [6], и полагая концентрацию дислокаций равной типичной для кремния величине $N_d=10^2$ см, получили функцию деканалирования для нескольких значений энергии электрона в планарном случае (табл. 2).

Таблица 2

Функция деканалирования χ_d в зависимости от толщины кристалла Si (110) и энергии электрона при плотности краевых дислокаций $N_d=10^2$ см$^{-2}$

$E=100$ ГэВ		$E=1000$ ГэВ		$E=10\,000$ ГэВ	
t, мм	χ_d	t, мм	χ_d	t, мм	χ_d
0.5	0.49	5	0.63	5	0.65
1.0	0.61	10	0.79	10	0.88
1.5	0.66	15	0.86	15	0.96
2.0	0.69	20	0.91	20	0.98
2.5	0.72	25	0.94	25	0.99
3.0	0.78	30	0.96	30	1.00
3.5	0.80	35	0.97	35	1.00
4.0	0.82	40	0.98	40	1.00

Для средних толщин можно аппроксимировать функцию деканалирования идеального кристалла экспонентой $\chi=1-\exp(-t/x_e)$. Очевидно, в этом приближении длина деканалирования с учетом дислокаций равна

$$x_d^{-1}=\gamma+x_e^{-1}. \tag{9}$$

Величины γ^{-1}, x_e приближенно изменяются с энергией частицы согласно законам

$$\gamma^{-1}=k_d/\sqrt{E}, \quad x_e=k_{th}E. \tag{10}$$

Из (9) и (10) следует, что длина деканалирования достигает при некоторой энергии

$$E_m=(2k_d/k_{th})^{2/3} \tag{11}$$

максимального значения $x_m \approx 0.3 x_e$ (E_m), а при дальнейшем увеличении энергии спадает.

Более точно деканалирование на дислокациях можно учитывать в кинетическом уравнении с помощью интегральных столкновительных членов. Например, в планарном случае

$$\frac{\partial F(E_\perp, t)}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial E_\perp} DT \frac{\partial (F/T)}{\partial E_\perp} + \int \gamma(E'_\perp, E)\left[\frac{T(E'_\perp)}{T(E_\perp)} F(E'_\perp, t - F(E_\perp, t)\right], \quad (12)$$

где $\gamma(E'_\perp, E_\perp)$ — вероятность изменения поперечной энергии при прохождении дислокации от $E_\perp$ к $E'_\perp$; T — период поперечных колебаний каналированной частицы; D — коэффициент диффузии из-за рассеяния на тепловых колебаниях и электронах.

В уравнении (12) мы воспользовались соотношением

$$\gamma(E'_\perp, E) T(E_\perp) = T(E'_1) \gamma(E_\perp, E'_\perp), \quad (13)$$

которое является соотношением детального баланса для нашего случая. Действительно, как показано выше, при переходе через дислокацию сохраняется распределение по поперечным импульсам, так что для планарного случая, например, имеем

$$\frac{d^2N}{dx dp_\perp} = \frac{d^2N}{dx' dp'_\perp}, \quad p_\perp = p'_\perp, \quad x' = x + \Delta.$$

Отсюда для распределения по $E'_\perp$ и координате x' имеем

$$v_\perp f(E_\perp, x) = v'_\perp f'(E'_\perp, x'). \quad (14)$$

При статистическом равновесии полное число частиц с данной поперечной энергией на один канал равно $F(E_\perp) = T v_\perp f(E_\perp, x)$.

Тогда из (14) следует равенство $F(E_\perp)/T(E_\perp) = F(E'_\perp)/T(E'_\perp)$,

эквивалентное (13). В аксиальном случае при азимутальной симметрии задача является одномерной. Разница лишь в том, что радиальное движение определяется не одним параметром $E_\perp$, а двумя $E_\perp$ и M_z, где M_z — момент количества движения относительно атомной цепочки. В аксиальном случае, таким образом, добавится одна переменная — проекция момента импульса. Величины $\gamma(E'_\perp, E_\perp)$ могут быть получены численно. Заметим, что границы между зернами в мозаичном кристалле образуются совокупностями дислокации и их можно рассматривать аналогичным образом.

Практический интерес представляет измерение величины максимальной длины деканалирования. Согласно соотношениям (11), она должна убывать с ростом концентрации дислокаций как $N_d^{-1/3}$. По такому же закону должна убывать и энергия E_m, при которой она должна наблюдаться. Произведем оценку этих величин для кремния и вольфрама. Величина $k_{th} \approx 20$ мкм/ГэВ для Si и 4 мкм/ГэВ для W (деканалирование на тепловых колебаниях), а $k_d = 3 \cdot 10^5$ и 10^3 мкм/ГэВ$^{1/3}$ при $N_d = 10^2$ и 10^5 см$^{-2}$ для Si и W соответственно.

Отсюда получаем, что $E_m = 600$ и 20 ГэВ для Si и W, а $x_m = 1.2$ см и 80 мкм. Более реалистично для металлов $N_d \sim 10^8$ см$^{-2}$, тогда E_m падает до 200 МэВ.

Список литературы

[1] *Quere Y.* // Phys. Lett. A. 1968. Vol. 26. P. 578—581.
[2] *Van Vliet D.* // Phys. Stat. Sol. (a). 1970. Vol. 2. № 1. P. 521—529.
[3] *Белошицкий В. В., Кумахов М. А.* // ФТТ. 1973. Т. 15. Вып. 5. С. 1588—1592.
[4] *Белошицкий В. В., Хоконов А. Х.* // Тез. докл. III Всесоюз. конф. по излучению релятивистских частиц в кристаллах. Нальчик, 1988. С. 83.
[5] *Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М.* Теория упругости. М.: Наука, 1965. 202 с.
[6] *Beloshitsky V. V., Trikalinos Ch.* // Rad. Eff. 1981. Vol. 56. N 1. P. 71—76.

Институт атомной энергии
им. И. В. Курчатова
Москва

Поступило в Редакцию
4 января 1990 г.