

## ПРЯМОЙ МЕТОД РАСЧЕТА ЭВОЛЮЦИИ ВОЛНОВОЙ ФУНКЦИИ КАНАЛИРОВАННЫХ МэВ-х ЭЛЕКТРОНОВ

С. Б. Дабагов, Л. И. Огнев

Предложен метод расчета волновой функции каналированных электронов в идеальном монокристалле методом численного интегрирования нестационарного уравнения Шредингера. Рассмотрены начальная эволюция волновой функции при влете электрона в монокристалл, угловые распределения электронов после вылета из тонкого кристалла кремния. Показана возможность определения модовой структуры волновой функции без решения задачи на собственные значения.

Каналирование релятивистских электронов и позитронов с энергией 1—50 МэВ в монокристаллах изучалось экспериментально и теоретически [1–4]. При этом основное внимание уделялось исследованию углового распределения электронов после их вылета из кристалла. После выхода работы [5] и разработки квантовой теории излучения релятивистских электронов в кристаллах [6] структуру энергетических зон каналированных частиц стали связывать со спектрами спонтанного излучения при движении вдоль главных кристаллических осей и плоскостей (соответствующие ссылки могут быть найдены в обзоре [7]). Для определения волновой функции каналированной частицы обычно использовалось стационарное решение уравнения Шредингера, для которого находились собственные значения и собственные волновые функции. При этом задача сводилась либо к системе линейных алгебраических уравнений [4, 8–11], либо решалась вариационная задача (например, [12]), либо использовались другие методы [3]. Для всех перечисленных методов характерны как необходимость использования большого объема оперативной памяти ЭВМ, так и значительная трудоемкость создания вычислительных алгоритмов. Еще большие трудности возникают при решении задачи кинетики каналированных частиц с использованием модового разложения волновой функции [13, 14]. Развиваемая в настоящей работе методика позволяет в ряде задач обойти отмеченные трудности, что делает ее доступной для применения на ЭВМ средней мощности.

Прямое интегрирование нестационарного уравнения Шредингера для нахождения волновой функции каналированного электрона ранее использовалось в работе [15] в иллюстративных целях. Всестороннее же исследование задачи о каналировании электронов в реальном периодическом потенциале с учетом некогерентного рассеяния на ядрах проводится указанным методом впервые.

### 1. Теория метода

Движение МэВ-го электрона в режиме каналирования описывается уравнением Дирака [6]. Поскольку кинетическая энергия  $E$  релятивистского электрона значительно превосходит потенциальную энергию  $V$  взаимодействия электрона с решеткой кристалла, то с точностью  $\sim V/E$  уравнение Дирака сводится к уравнению Шредингера. В общем случае уравнение Шредингера нестационарное, т. е. должно учитывать зависимость решения от глубины проникновения в кристалл.

Рассмотрим стационарное уравнение Шредингера для заряженной частицы массой  $M$ , движущейся в кристаллическом поле  $V(\mathbf{R})$

$$\left[ -\frac{\hbar^2}{2M} \Delta_{\mathbf{R}} + V(\mathbf{R}) \right] \Psi(\mathbf{R}) = E \Psi(\mathbf{R}), \quad (1)$$

где  $\mathbf{R} \equiv (\mathbf{r}, z) \equiv (x, y, z)$ ;  $V(\mathbf{R}) \equiv V(x, y, z)$  — усредненный по тепловым колебаниям потенциал плоскости или цепочки;<sup>1</sup>  $\Delta_{\mathbf{R}}$  — трехмерный лапласиан ( $\equiv \partial^2/\partial x^2 + \partial^2/\partial y^2 + \partial^2/\partial z^2$ ). Пусть на мишень падает из бесконечности почти плоская волна под малым углом к оси

$$\Psi_0 = A(\mathbf{r}) e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}}, \quad E = \frac{\hbar^2 k^2}{2M}, \quad \mathbf{k} \equiv (\mathbf{k}_{\perp}, k_z), \quad (2)$$

причем надо отметить, что компонента волнового вектора в направлении вперед почти сохраняется, т. е.  $k_z \simeq k$ .

Это позволяет выделить в волновой функции частицы быстроосциллирующую часть

$$\Psi(z, \mathbf{r}) = e^{ik_z z} u(z, \mathbf{r}). \quad (3)$$

С учетом (3) уравнение (1) переписывается в виде [16]

$$i\hbar v \frac{\partial}{\partial z} u(z, \mathbf{r}) + \frac{\hbar^2}{2M} \left( \Delta_{\perp} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) u(z, \mathbf{r}) = V(z, \mathbf{r}) u(z, \mathbf{r}), \quad (4)$$

где  $\Delta_{\perp} \equiv \partial^2/\partial x^2 + \partial^2/\partial y^2$ ,  $v = \hbar k/M$  — начальная скорость частицы. Обычно дальнейшее преобразование этого уравнения учитывает малоугловое приближение, т. е. приближение, в котором полагается малость рассеяния на большие углы, что эквивалентно утверждению малости члена  $\partial^2/\partial z^2$ :  $|2k(\partial u/\partial z)| \gg |\partial^2 u/\partial z^2|$ .

В режиме плоскостного каналирования трехмерное уравнение (4) переходит в двумерное

$$i\hbar v \frac{\partial}{\partial z} u(z, x) + \frac{\hbar^2}{2M} \left( \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) u(z, x) = V(z, x) u(z, x). \quad (4a)$$

Первый член в (4a) есть не что иное, как оператор энергии  $\hat{E}$ . В операторном виде это уравнение подобно уравнению Гельмгольца

$$\frac{\partial^2 u}{\partial z^2} = -\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} - k^2 n^2 u, \quad (5)$$

где

$$k^2 n^2 = (2M/\hbar^2) (\hat{E} - V).$$

Решение этого уравнения должно удовлетворять граничному условию

$$u(z, x)|_{z=0} = A(x) \exp\{ik_x x + (k_z - k)z\}|_{z=0} = A(x) \exp(ik_x x), \quad (6)$$

где

$$k_x = k \sin \varphi \simeq k\varphi.$$

В случае моноэнергетического пучка задача легко может быть решена численно.

Предположим, что нам известно значение волновой функции на границе кристалла в точке  $z=0$ . Тогда решение уравнения (5) при  $z=\Delta z$  может быть формально выражено следующим образом:

$$u_1(x, \Delta z) = \exp[\pm i\Delta z (\nabla_x^2 + k^2 n^2)^{1/2}] u_1(x, 0), \quad (7)$$

где  $\nabla_x^2 \equiv \partial^2/\partial x^2$ . Выражение под квадратным корнем может быть преобразовано, если ввести значение  $n_0$ , равное значению  $n$  в вершине потенциальной ямы, т. е.  $n_0 = n(d_p/2)$ , где  $d_p$  — межплоскостное расстояние

$$(\nabla_x^2 + k^2 n^2)^{1/2} \simeq \frac{\nabla_x^2}{(\nabla_x^2 + k^2)^{1/2} + k} + k + k[(n/n_0) - 1]. \quad (8)$$

<sup>1</sup> Здесь потенциал  $V(\mathbf{R})$  является функцией не только поперечных координат, но и продольной координаты  $z$ . Это позволяет при необходимости рассчитывать волновые функции при движении в реальной решетке с дефектами, а также в поликристаллах.

Если временная зависимость функции  $u_1(x, z)$  экспоненциальная  $\exp(ikz)$ , то эта функция представима в виде

$$u_1(x, z) = u(x, z) \exp(-ikz). \quad (9)$$

Подставляя соотношение (9) в (7) и выбирая в (7) знак «минус», получим

$$u(x, \Delta z) = \exp\left\{-i\Delta z \left[ \frac{\sqrt{x^2}}{(\sqrt{x^2} + k^2)^{1/2} + k} + \chi(x) \right]\right\} u(x, 0). \quad (10)$$

Здесь введена функция  $\chi(x) = k[(n(x)/n_0) - 1]$ . Соотношение (10) с точностью до членов  $\sim (\Delta z)^2$  можно переписать в симметризованном виде [17]

$$u(x, \Delta z) = \exp\left\{-\frac{i\Delta z}{2} \left[ \frac{\sqrt{x^2}}{(\sqrt{x^2} + k^2)^{1/2} + k} \right]\right\} \exp(-i\Delta z \chi) \times \\ \times \exp\left\{-\frac{i\Delta z}{2} \left[ \frac{\sqrt{x^2}}{(\sqrt{x^2} + k^2)^{1/2} + k} \right]\right\} u(x, 0) + O[(\Delta z)^3]. \quad (11)$$

Это выражение позволяет численно решить поставленную задачу. Применение алгоритма (11) равносильно, с физической точки зрения, прохождению пучка через систему периодически расположенных линз на расстоянии  $\Delta z$  друг от друга, причем первая линза располагается на расстоянии  $\Delta z/2$  от поверхности кристалла.

Численное представление волновой функции можно получить, разложив  $u(z, x)$  в ограниченный ряд Фурье

$$u(x, z) = \sum_{m=-N/2+1}^{N/2} u_m(z) \exp\left(\frac{2\pi i}{L} m x\right), \quad (12)$$

где  $L$  характеризует поперечный размер ячейки, по которой ведется суммирование.

Последовательное применение формулы (11) с использованием разложения (12) дает решение уравнения (5) с граничным условием (6).

Энергетический спектр частицы, движущейся в потенциале кристаллической решетки, может быть получен из фурье-преобразования по координате  $z$  волновой функции  $u'(x, z)$  при фиксированной поперечной координате  $x$ . При этом волновая функция частицы выражается через волновые функции отдельных стационарных состояний  $v_n(x)$

$$u'(x, z) = \sum_n C_n v_n(x) \exp(i\kappa_n z). \quad (13)$$

Производя преобразование по различным интервалам  $z$ , можно наблюдать за перераспределением потока между различными стационарными состояниями. Для численных расчетов разложения (12) применялся алгоритм быстрого преобразования Фурье [18].

## 2. Результаты и их обсуждение

Рассматривалось каналирование электронов с энергией  $E=4$  МэВ в кристалле кремния вдоль плоскости (110). Как и следовало ожидать, формирование стационарной (без учета некогерентного рассеяния!) картины для плотности вероятности локализации происходит на определенных глубинах (рис. 1). За счет когерентного взаимодействия происходит постепенное формирование различных квантовых состояний. Эти расчеты позволяют определить глубину, на которой происходит трансформация падающей на кристалл волны в волновые функции связанных и надбарьерных состояний каналированного движения.

Расстояние, на котором происходит «сшивание» волновой функции вне кристалла с волновой функцией в кристалле, можно оценить и из расчета энергетического спектра связанных состояний каналированного электрона для различных глубин проникновения в кристалл. Результаты такого анализа приве-

дены на рис. 2. Положения пиков соответствующим уровням энергии дискретного спектра каналированной частицы. Фурье-преобразование проводилось для поперечной координаты  $x=0$ , т. е. в центре канала, и для различных интервалов  $z$ ; менялись и размеры окна, по которому велось преобразование, и глубина расположения окна. Расчеты показывают, что положение и интенсивность сильно-связанных состояний с глубиной мало изменяются. Однако для слабосвязанных и надбарьерных состояний интенсивности с глубиной резко уменьшаются и стремятся к некоторым постоянным величинам. Положения пиков для таких состояний тоже смещаются. Начиная с определенной глубины, картина становится стационарной. Для электронов с  $E=4$  МэВ, каналированных в кремнии (110), эта глубина равна  $z_0 \approx 0.35$  мкм. Этот результат соответствует эволюционному анализу плотности вероятности локализации электронов (рис. 1).

Аналогичные расчеты энергетического спектра были проделаны для различных значений поперечной координаты  $x$ .

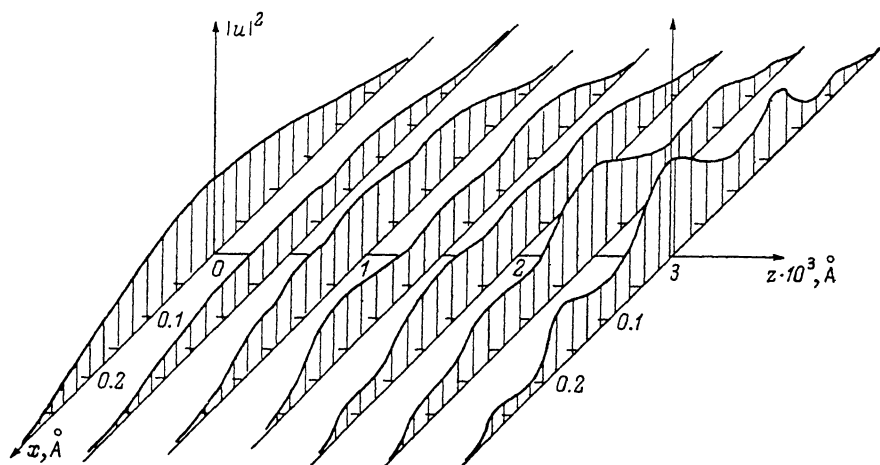


Рис. 1. Эволюция плотности вероятности локализации электронов с энергией 4 МэВ, проникающих в кристалл кремния параллельно плоскости (110).

Начальная расходимость пучка соответствует  $\Delta\varphi=0.5\varphi_{бр}$ . Максимумы электронной плотности лежат в плоскости (110) кристалла.

На рис. 3 показаны результаты для глубин проникновения  $z > z_0$ , т. е. когда квантовые состояния уже сформировались. Такое представление спектра удобно для анализа пространственного распределения потока частицы в отдельных квантовых состояниях, что позволяет прогнозировать интенсивность некогерентного рассеяния электронов на ядрах решетки.

Для угла падения  $\varphi=0$  и начальной расходимости пучка, равной половине критического угла каналирования,  $\Delta\varphi=0.5\varphi_{бр}$ , основное невозбужденное состояние оказывается локализованным в области  $\pm 0.01 \div 0.01$  нм, что составляет около 11 % от поперечного размера канала, т. е. лежит в области наибольшей ядерной плотности. Плотность локализации первого возбужденного состояния имеет максимум на расстоянии  $\sim 0.015$  нм от центра канала.

Для второго возбужденного состояния пространственное распределение оказывается более «размазанным» по сечению канала. Отсюда следует, что наиболее сильно ядерному некогерентному рассеянию подвержены электроны, заселяющие основное состояние.

Энергетические спектры каналированной частицы для различных углов падения на плоскость каналирования показаны на рис. 4. Особенностью такого спектра является то, что он несет информацию о заселенности каждого состояния энергетического спектра. Штриховая линия отражает картину заселения различных состояний в зависимости от ориентации между пучком электронов и кристаллом. Такие спектры рассчитывались и для начальных углов  $\varphi$ , больших угла Брэгга  $\varphi_{бр}$ .

Получающиеся результаты дают хорошее качественное и количественное согласие с модовыми расчетами [9, 10].

Все вышеописанные характеристики каналированных электронов были получены в усредненном по тепловым колебаниям атомов плоскостном потенциале. Очевидно, что такое рассмотрение учитывает лишь когерентное взаимодействие

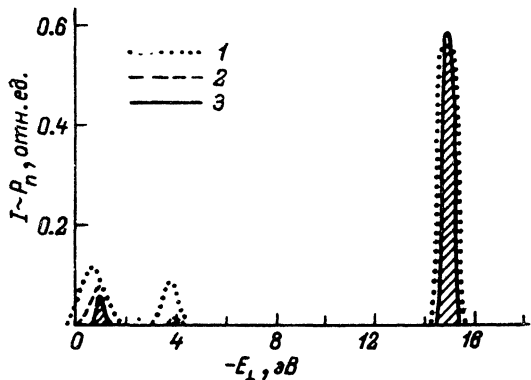


Рис. 2. Формирование энергетического спектра связанных состояний каналированного электрона с энергией 4 МэВ, падающего на кристалл параллельно плоскости (110) Si.

Начальная расходимость отсутствует. Спектры поперечного движения, соответствующие  $0 < z < 0.32$  мкм (1),  $0.32 < z < 0.64$  мкм (2),  $1.0 < z < 1.64$  мкм (3).

между налетающей частицей и атомами решетки. Некогерентное же рассеяние на колебаниях ядер можно учесть введением мнимой части в потенциал плоскости [2, 11]. Это равносильно следующей замене в уравнении Шредингера:

$$V \rightarrow V + iW.$$

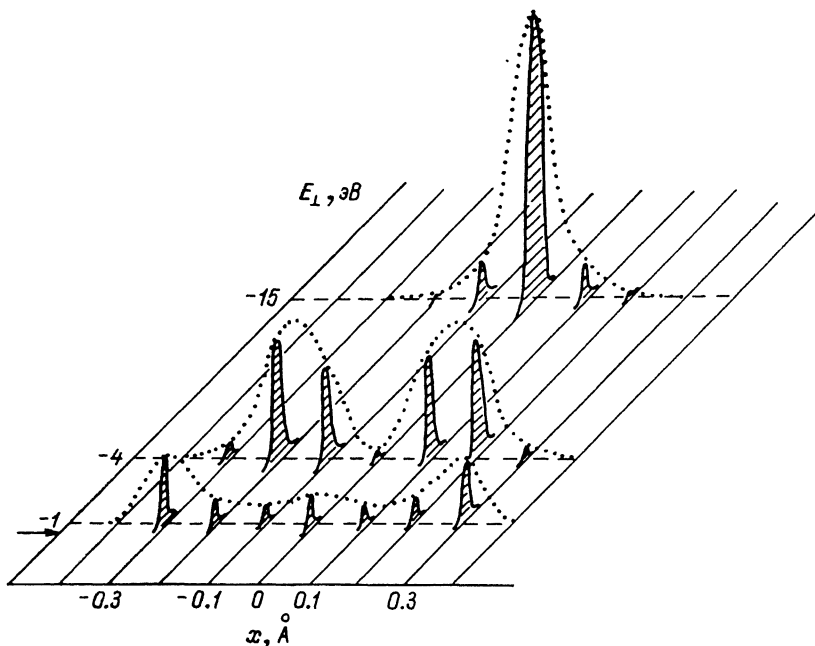


Рис. 3. Энергетический спектр связанных состояний каналированных электронов с энергией 4 МэВ как функция от поперечной координаты  $x$ .

Пучок ориентирован параллельно (110) Si, начальная расходимость пучка  $\Delta\varphi = 0.5\varphi_{кр}$ ,  $1.0 < z < 1.64$  мкм.

Положим

$$W(x) = W_0 \exp(-x^2/2\rho_{\perp}^2),$$

где  $\rho_{\perp}$  — среднеквадратичная амплитуда поперечных тепловых колебаний атомов плоскости. Величину  $W_0$  находим, следуя работе [19]

$$W_0 = \frac{Nd_p}{(\hbar v)^2} \left[ \int d^2k V_a^2(k) (1 - \exp(-k^2\rho_{\perp}^2)) \right], \quad (14)$$

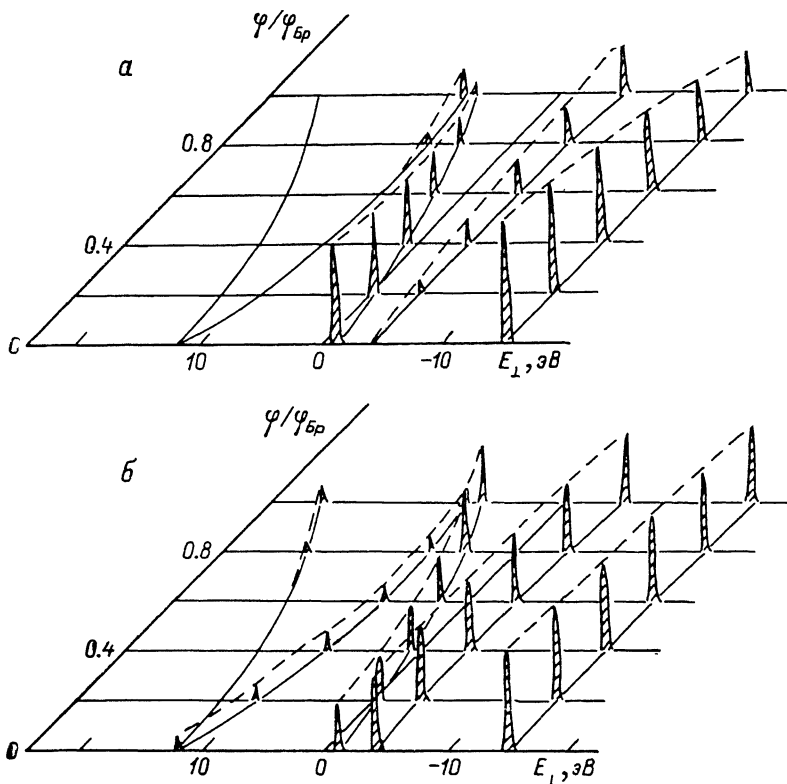


Рис. 4. Энергетический спектр каналированных электронов с энергией 4 МэВ как функция от угла падения  $\varphi$  на плоскость (110) Si. Расходимость пучка  $\Delta\varphi=0$  (а) и  $\Delta\varphi=0.5\varphi_{кр}$  (б).

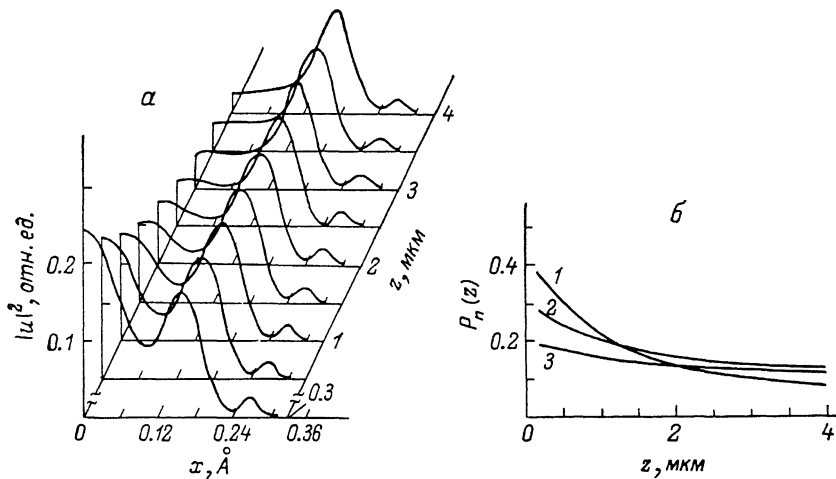


Рис. 5. Влияние учета некогерентного рассеяния электронов на эволюцию плотности вероятности  $|u|^2$  (а), энергия электронов  $E=4$  МэВ, плоскость каналирования (110) Si. Кинетика заселенностей различных квантовых состояний (б).

где  $N$  — плотность атомов в веществе,

$$V_a(\mathbf{k})' = \int d^3R V_a(\mathbf{R}) \exp(-i\mathbf{k}\mathbf{R})$$

— фурье-компонента атомного потенциала  $V_a(\mathbf{R})$ .

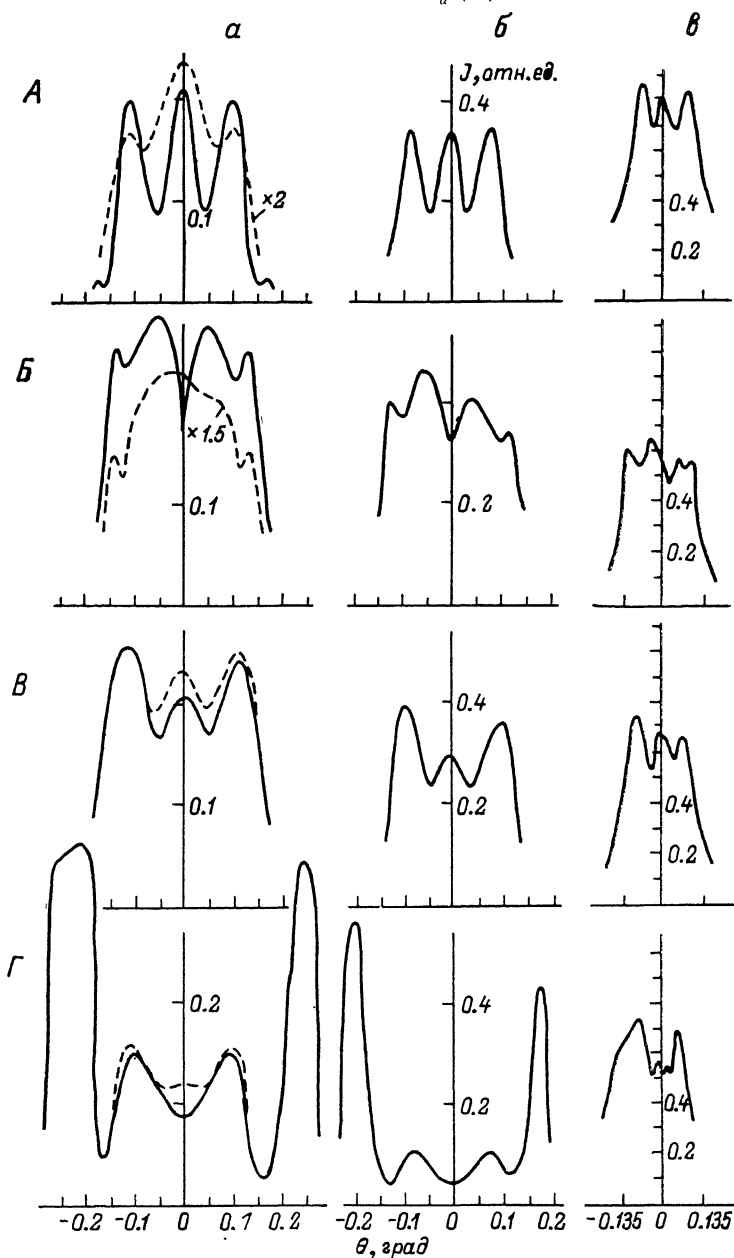


Рис. 6. Угловые распределения электронов на выходе из кристалла (110) Si при  $\varphi=0$  (А),  $0.05$  (Б),  $0.12$  (В) и  $0.18^\circ$  (Г).

Такая процедура позволяет получить эволюцию с глубиной  $z$  плотности вероятности локализации электрона возле плоскости каналирования с учетом деканалирования на ядрах решетки (рис. 5, а). Результаты расчетов заселенностей различных квантовых состояний с глубиной проникновения в кристалл представлены на рис. 5, б.

Поскольку плотность локализации электрона в основном состоянии имеет максимум в центре канала, то деканалирование из этого состояния происходит

быстрее (рис. 3, кривая 1). И наоборот, максимумы плотностей для возбужденных состояний находятся между плоскостями каналирования, т. е. большую часть времени электрон в этих состояниях проводит в области с малой ядерной плотностью, поэтому деканалирование из этих состояний происходит медленнее (кривые 2, 3).

В задачах прохождения частиц через вещество одной из основных характеристик является угловое распределение частиц, прошедших через толщу вещества. С помощью предложенной в настоящей работе методики рассчитаны угловые распределения каналированных электронов на выходе из кристалла при различных начальных углах влета  $\varphi$ . На рис. 6 приводятся рассчитанные угловые распределения электронов с энергией  $E=5.1$  МэВ на выходе из кристалла кремния толщиной 2 (а) и 0.5 мкм (б). Энергия электронов, толщина и углы ориентации кристалла, а также начальная расходимость пучка электронов выбирались в соответствии с экспериментом [3]. В расчетах учитывалось некогерентное рассеяние на ядрах решетки в приближении комплексного потенциала (14). Угловые распределения электронов, рассчитанные без учета деканалирования, приведены на рис. 6, а штриховыми линиями. На рис. 6, в приведены угловые распределения электронов, полученные в эксперименте [3].

Из рис. 6 видно, что рассчитанные и полученные в эксперименте угловые распределения электронов качественно хорошо согласуются. При малых углах влета  $\varphi \leq 0.05^\circ$ , когда велика населенность подбарьерных состояний, происходит симметризация угловых распределений для кристаллов толщиной 2 мкм. При меньшей толщине кристалла 0.5 мкм для угла влета  $\varphi=0.05^\circ$  наблюдается выраженная асимметрия (рис. 6, б). Как показывают расчеты, квантовые состояния в режиме каналирования устанавливаются на глубинах того же порядка.

Следует отметить, что при малых углах влета учет деканалирования (рис. 6, а) является весьма существенным и позволяет значительно улучшить согласие расчетных угловых зависимостей каналированных электронов с наблюдавшимися в эксперименте (рис. 6, в). Напротив, при больших углах влета электронов в кристалл ( $\varphi \geq 0.12^\circ$ ) влияние деканалирования невелико — в этом случае заселяются уровни, для которых характерна малая плотность вероятности нахождения электронов вблизи атомной плоскости. Несимметричность углового распределения электронов в этом случае связана прежде всего с малым начальным захватом электронов в режим каналирования; ширина угла захвата может быть оценена из двухволнового приближения динамической теории дифракции [8]. Характерно, что два центральных пика в угловом распределении при  $-0.15^\circ < \theta < 0.15^\circ$  симметричны относительно направления плоскости (110) Si. Появление этих пиков обусловлено захватом части электронов в режим подбарьерного каналирования.

Симметризация распределения каналированных частиц по поперечному импульсу отмечалась ранее в работе [20], где были выполнены расчеты эволюции матрицы плотности частицы с использованием модового приближения для потенциала Кронига—Пенни. При этом предполагалось, что некогерентное рассеяние приводит к затуханию лишь недиагональных матричных элементов, т. е. к потере взаимной когерентности различных состояний поперечного движения частицы. В настоящей работе симметризация распределения каналированных частиц по поперечному импульсу имеет другую природу и вызвана дисперсионным затуханием «ядерного эха» [20] за счет чисто когерентного рассеяния.

Отметим в заключение, что предложенный метод расчета эволюции волновой функции может быть аналогичным образом использован в случае осевого каналирования электронов.

### Литература

- [1] Pedersen M. J., Andersen J. U., Augustyniak W. M. *Radiation Effects*, 1972, v. 12, p. 47—52.
- [2] Andersen S. K., Bell F., Frandsen F., Uggerhoj E. *Phys. Rev.*, 1973, v. B8, N 11, p. 4913—4925.
- [3] Воробьев С. А., Нурмагамбетов С. Б., Каплин В. В., Розум Е. И. *ЖТФ*, 1985, т. 55, № 2, с. 359—367.
- [4] Andersen J. U., Andersen S. K., Augustyniak W. M. *K. Dansk. Vid. Selsk. Mat. Fys. Medd.*, 1977, v. 39, N 10, p. 1—77.



- [5] *Кумахов М. А.* ДАН СССР, 1976, т. 230, № 5, с. 1077—1080.
- [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] *Хурш П., Хоюи А., Николсон Р.* и др. М.: Мир, 1968. 367 с.
- [9] *Andersen J. U., Eriksen R. R., Laegsgaard E.* Physica Scripta, 1981, v. 24, N 3, p. 588—600.
- [10] *Тулупов А. В.* ЖЭТФ, 1981, т. 81, № 5, с. 1639—1648.
- [11] *Klein R. K., Kephart J. O., Pantell R. H.* et al. Phys. Rev. B, 1985, v. 31, N 1, p. 68—92.
- [12] *Yamamura Y., Horihata K.* Rad. Eff. Lett., 1985, v. 85, N 3, p. 231—236.
- [13] *Andersen J. U., Bonderup E., Laegsgaard E., Sorensen A. H.* Physica Scripta, 1983, v. 28, N 3, p. 308—330.
- [14] *Буренков А. Ф., Дудчик Ю. И., Комаров Ф. Ф.* ЖТФ, 1985, т. 55, № 11, с. 2184—2190.
- [15] *Андреев А. В., Ахманов С. А., Выслоух В. А., Кузнецов В. Л.* ЖЭТФ, 1983, т. 84, № 5, с. 1743—1755.
- [16] *Lervig P., Lindhard J., Nielsen V.* Nucl. Physics, 1967, v. a96, N 3, p. 481—504.
- [17] *Fleck J. A., Jr., Morris J. R., Fett M. D.* Appl. Physics, 1976, v. 10, N 1, p. 129—160.
- [18] *Brigham E. O.* The fast Fourier transform. Prentice—Hall, Englewood Cliffs. N. J., 1974. 377 p.
- [19] *Andersen J. U., Bonderup E., Laegsgaard E.* et al. Nucl. Instr. Methods, 1982, v. 194, N 1—3, p. 203—224.
- [20] *Каган Ю., Кононец Ю. В.* ЖЭТФ, 1973, т. 64, № 3, с. 1042—1064.

Поступило в Редакцию  
3 сентября 1986 г.

В окончательной редакции  
6 августа 1987 г.