УДК 539.171

КИНЕТИЧЕСКИЕ КОЭФФИЦИЕНТЫ ДЛЯ ЭЛЕКТРОНОВ В ПЛОСКОСТНОМ КАНАЛЕ

В. А. Рябов

Рассматривается рассеяние каналированных электронов на тепловых колебаниях атомов в кристалле. В координатном представлении рассчитаны вероятности перехода и диффузионные коэффициенты квантового кинетического уравнения для функции распределения каналированных частиц. Показано, что классический подход на основе модели ряда цепочек для атомной плоскости дает эквивалентный результат с квантовой теорией в квазиклассическом пределе.

Рассеяние каналированных частиц на тепловых колебаниях атомов приводит к температурной зависимости параметров процесса деканалирования. Многочисленные попытки теоретически описать эту зависимость отличались и по результатам, и по постановке задачи. В классическом подходе результаты машинного моделирования [1-3] показали наличие рассеяния даже в отсутствие тепловых колебаний атомов — на идеальной решетке. Это привело к использованию в расчетах эффекта плоскостного каналирования [4-6] модели аморфной плоскости. Вклад в рассеяние, обусловленный хаотическим расположением атомов в плоскости (вклад дискретности), оказался большим вклада тепловых колебаний в перпендикулярном плоскости направлении. Согласно квантовой теории, не использовавшей модельные представления [7-9], вклад дискретности практически отсутствовал. Эксперименты по деканалированию тяжелых заряженных частиц прояснить этот вопрос не могли, поскольку ядерное рассеяние у ионов происходит на фоне доминирующего электронного.

Ситуация коренным образом изменилась с появлением γ-спектроскопии уровней каналированных релятивистских электронов, у которых для значительной доли уровней преобладает ядерный механизм рассеяния. Сопоставление расчетных и экспериментальных ширин уровней [9, 10] указывало на отсутствие вклада дискретности. Исключение составляют электроны небольших энергий с $E \sim 1$ МэВ, у которых не мала вероятность непосредственного перехода из связанных в надбарьерные состояния [11].

Следует отметить, что выражения для вероятностей перехода, полученные в работах [7-10], по виду отличались между собой, что, казалось бы, обусловлено различием типа возмущения, вызывающего переходы. Выполненные ниже расчеты свидетельствуют, однако, что все эти результаты по существу одинаковы. Оказалось возможным также привести в соответствие с квантовыми и результаты классической теории, использовав для описания многократного рассеяния на атомной плоскости известную модель ряда цепочки [12], предложенную Линдхардом.

В пренебрежении энергетическими потерями частиц за счет рассеяния на фононах можно отказаться от квантовомеханического описания состояний кристалла и рассматривать его как совокупность замороженных и смещенных из положений равновесия центров [7, 13]. Тогда кинетическое уравнение для матрицы плотности в представлении собственных волновых функций Ψ_α частицы при заданном гауссовском пространственном распределении рассеивателей было получено в [13] обобщением уравнения Мигдала для аморфной среды [14]

$$\frac{\partial\rho_{\alpha_1\alpha_2}}{\partial t}+i(E_{\alpha_1}-E_{\alpha_2})\rho_{\alpha_1\alpha_2}=\pi\sum_{\alpha'\alpha''}\langle\Delta V_{\alpha_1\alpha'}\Delta V_{\alpha''\alpha_2}\rangle\rho_{\alpha'\alpha''}[\delta(E_{\alpha''}-E_{\alpha_1})+\delta(E_{\alpha_2}-E_{\alpha_1})]-$$
$$-[\langle\Delta V_{\alpha'\alpha''}\Delta V_{\alpha''\alpha_2}\rangle\rho_{\alpha_1\alpha'}+\langle\Delta V_{\alpha\alpha''}\Delta V_{\alpha''\alpha'}\rangle\rho_{\alpha'\alpha_2}]\delta(E_{\alpha'}-E_{\alpha''}). \tag{1}$$

Скобки $\langle\,\rangle$ обозначают усреднение по тепловым смещениям атомов $\mathbf{u}$, E_α — полная энергия частицы в кристалле, $z=v_\parallel t$ — его толщина.

Переходы вызывают отличие потенциала решетки $V(R)$ от потенциала $Y(x)$, на котором определяются базисные волновые функции Ψ_α

$$\Delta V(\mathbf{R})=V(\mathbf{R})-Y(x)=\sum_a V^0(\mathbf{R}-\mathbf{R}_a-\mathbf{u}_a)-Y(x). \tag{2}$$

Для плоскостного каналирования электронов суммирование в (2) ведется по узлам одной атомной плоскости; u_a — тепловые смещения атомов; $Y(x)$ — непрерывный потенциал плоскости, усредненный по тепловым колебаниям.

Уравнение (1) совпадает с уравнением, полученным в работе Кагана и Кононца [7], которое точно учитывает взаимодействие частицы с фононами.[1] Для диагональных элементов матрицы плотности, которые представляют интерес в задаче деканалирования, уравнение (1) переходит в

$$\frac{\partial\rho_\alpha}{\partial t}=2\pi\sum_{s',\,\mathbf{q}}\langle|\Delta V_{\mathbf{q}}^{ss'}|^2\rangle(\rho_{s',\,\mathbf{p+q}}-\rho_{s,\,p})\delta(E_{s',\,p+q}-E_{s,\,p}), \tag{3}$$
$$\alpha=s,\ \mathbf{p},\ s=n,\ q_x.$$

Здесь $\mathbf{q}=\mathbf{p}'-\mathbf{p}$ — изменение проекции импульса в плоскости YZ, n — номер зоны, q_x — квазиимпульс.

Вероятности перехода после усреднения величины $\Delta V_{\mathbf{q}}^{ss'}$ по тепловым смещениям, распределенным по Гауссу со средним квадратичным отклонением u_2, равны [9] [2]

$$\langle|\Delta V_q^{ss'}|^2\rangle=nd_p(\langle|V_q^{0\,ss'}|^2\rangle-\exp(-q^2u^2)\langle V_q^{0\,ss'}\rangle^2+$$
$$+(2\pi)^2\sum_{\mathbf{K}}\delta(\mathbf{q}-\mathbf{K})\langle V_{\mathbf{K}}^0\rangle^2\exp(-q^2u^2), \tag{4}$$

где n — плотность атомов в 1 см^3, d_p — расстояние между плоскостями, а суммирование ведется по двумерным векторам обратной решетки. Здесь и далее $\langle\,\rangle$ обозначают усреднение только по тепловым смещениям в направлении X. Вклад второго слагаемого в (4) с учетом закона сохранения энергии пренебрежимо мал [9]. Нетрудно убедиться, что выражение в скобках — вклад некогерентного рассеяния — совпадает с полученным в [7], несмотря на различие базисных функций и вида возмущения.

Если интересоваться только эволюцией одномерных поперечных состояний, то следует проинтегрировать уравнение (3) по импульсу в плоскости YZ—$\mathbf{p}$ и произвести суммирование по $\mathbf{q}$. В результате получим

$$\frac{\partial\rho_s}{\partial z}=\sum_{s'}W_{ss'}(\rho_{s'}-\rho_s), \tag{5}$$

где

$$W_{ss'}=\frac{2\pi nd_p}{c}\int dq_y\left(\langle U_{q_y}^{nn'2}\rangle-\exp(-q_y^2u^2)\langle U_{q_y}^{nn'}\rangle^2\right),$$

$$U_{q_y}=V_{q_y,\,q_z=0},\quad U=\frac{Ze^2}{d}f(r),\quad r=x,\ y. \tag{6}$$

[1] Чтобы в этом убедиться, необходимо в конечных формулах [7] произвести усреднение вероятностей перехода по фононным состояниям, которое оказывается эквивалентным пространственному усреднению по фиксированным тепловым смещениям атомов.

[2] В работе [13], где использовалась модель аморфной плоскости, в результате усреднения по $\mathbf{R}_a$ оставался только первый член разности (4).

С учетом соотношения

$$\int dq_y \,|\, V^0_{q_y,\, q_z=0} \,|^2 = \int d\mathbf{q} \,|\, V^0_{\mathbf{q}} \,|^2 \tag{7}$$

выражение для вероятности перехода (6) совпадает с полученным в [9], где интегрирование ведется по q. Интегрирование по q_y дает

$$W_{nn'} = nd_p \left(\frac{Z}{137}\right)^2 \int\limits_{-\infty}^{\infty} dy \left(\langle\langle f^{nn'2}\rangle\rangle - \langle\langle f^{nn'}\rangle\rangle^2\right). \tag{8}$$

Двойные скобки в (8) означают дополнительное усреднение координаты y по тепловым смещениям.[3] В отличие от выражения, полученного в рамках модели «аморфной» атомной плоскости [13, 15], которое содержит только первый член разности в квадратных скобках (8), $W_{nn'}$ при $u \to 0$ пропорционально u^2.

Обратимся теперь к квазиклассическому пределу в кинетическом уравнении (5), которое для простоты рассмотрим только для ультрарелятивистских каналированных электронов, т. е. в пренебрежении зонным уширением. Детально эта процедура изложена в работах [13, 15], поэтому сразу выпишем результат

$$\frac{\partial \rho}{\partial z} = -\frac{\partial A_1 \rho}{\partial \varepsilon} + 2\,\frac{\partial^2 A_2 \rho}{\partial \varepsilon^2} = 2\,\frac{\partial}{\partial \varepsilon}\, T A_2\, \frac{\partial}{\partial \varepsilon}\, \rho / T,$$

$$A_2 = \overline{(\varepsilon - Y)\,\frac{\delta\varepsilon}{\delta z}}, \quad A_1 = \frac{\overline{\delta\varepsilon}}{sz} = \sum_{n'} W_{nn'}\,(\varepsilon_{n'} - \varepsilon_n), \tag{9}$$

где черта обозначает среднее по периоду колебания частицы в канале $T(\varepsilon)$, а скорость возрастания поперечной энергии электрона, находящегося на расстоянии x от центра канала, оказывается равной

$$\frac{\delta\varepsilon}{\delta z}(x) = \frac{1}{2}\, nd_p E \int\limits_{-\infty}^{\infty} dy \left(\langle\langle \Theta_x^2 \rangle\rangle - \langle\langle \Theta_x \rangle\rangle^2\right), \tag{10}$$

где

$$\Theta_x = \frac{Ze^2}{E}\,\frac{\partial f}{\partial x}$$

— проекция угла рассеяния в бинарном соударении.

Полученный результат можно воспроизвести и в классическом подходе. Для этого воспользуемся диффузионным уравнением для осевого случая [16, 17]

$$\frac{\partial \rho}{\partial z} + \Theta\,\frac{\partial \rho}{\partial \mathbf{r}} - \frac{Ze^2}{E}\,\frac{\partial \langle\langle f \rangle\rangle}{\partial \mathbf{r}}\,\frac{\partial \rho}{\partial \Theta} = \frac{1}{2d}\,\langle\langle \Delta_i \Delta_k \rangle\rangle\,\frac{\partial^2 \rho}{\partial \Theta_i \partial \Theta_k}, \tag{11}$$

$$\Theta_i = p_i / p_z, \quad i,\ k = x,\ y,$$

где d — расстояние между атомами в цепочке, а флюктуация угла рассеяния равна

$$\Delta_i = \Theta_i(\mathbf{r} - \mathbf{u}) - \langle\langle \Theta_i(\mathbf{r} - \mathbf{u}) \rangle\rangle. \tag{12}$$

В режиме плоскостного каналирования Θ_y в несколько раз превышает критический угол каналирования для некоторого плотноупакованного направления плоскости, так что проекция траектории в плоскости YZ в своем движении последовательно пересекает совокупность цепочек. Это означает, что по крайней мере для одной цепочки, находящейся в заданной атомной плоскости, можно приближенно считать координату x неизменной, а координату y равной $y = \Theta_y z$.

---

[3] Во втором слагаемом (8) интегрирование по y делает дополнительное усреднение несущественным, и скобки здесь поставлены из соображений удобства.

При этом результат усреднения уравнения (11) по поперечной координате в пределах одной цепочки — $d_1/2 < y < d_1/y$ (d_1 — расстояние между цепочками) и углу Θ_y дает искомое кинетическое уравнение для плоскостного каналирования

$$\frac{\partial\rho}{\partial z} + \Theta_x \frac{\partial\rho}{\partial x} - \frac{1}{E}\frac{\partial Y}{\partial x}\frac{\partial\rho}{\partial\Theta_x} = \frac{1}{2} D_{xx}(x) \frac{\partial^2\rho}{\partial\Theta_x^2}, \tag{13}$$

где

$$D_{xx} = \frac{1}{d_0 d_1} \int dy \langle\langle\Delta_x^2\rangle\rangle. \tag{14}$$

Как и следовало ожидать, классическое выражение для скорости возрастания поперечной энергии $\partial\varepsilon/\partial z = ED_{xx}$ с учетом (14) совпадает с квантовым (10) ($1/dd_1 = nd_p$).

Отличительная особенность полученных формул для кинетических коэффициентов (8) и (10) состоит в том, что они выражаются через координатные функции экранирования $f(r)$ и ее тепловые средние, которые имеют простые и широко используемые аналитические аппроксимации. Поэтому в координатном представлении полный расчет кинетических коэффициентов выглядит наиболее просто. Для первого члена разности (10) (с логарифмической расходимостью на малых прицельных параметрах) такой расчет был уже сделан [15]. Смешанное координатно-импульсное представление [9] (координатное по оси x и Фурье-преобразование по остальным), а также импульсное [7, 8] предполагают дополнительное интегрирование функцией экранирования, что вносит дополнительные математические сложности при расчете кинетических коэффициентов, которые удалось обойти лишь в пределе малой амплитуды тепловых колебаний [9] и малых прицельных параметров [8, 18].

Литература

[1] *Ryabov V. A.* Phys. St. Sol., 1972, v. 49b, N 3, p. 467—473.
[2] *Pabst H. J.* Proc. V Intern. Conf. on atomic collisions in solids. Gatlinburg, 1973, v. 2, p. 717—733.
[3] *Кадменский А. Г., Тулинов А. Ф.* Тр. IV Всес. совещ. по физике взаимодействия заряженных частиц с кристаллами, ВСФВЗЧМ. М.: Изд-во МГУ, 1973, с. 46—70.
[4] *Рябов В. А.* ЖЭТФ, 1972, т. 63, № 9, с. 1096—1106.
[5] *Похил Г. П., Тулинов А. Ф.* ФТТ, 1972, т. 14, № 11, с. 1927—1932.
[6] *Белошицкий В. В., Кумахов М. А.* ДАН СССР, 1973, т. 272, № 6, с. 846—849.
[7] *Каган Ю. М., Кононец Ю. В.* ЖЭТФ, 1973, т. 64, № 9, с. 1042—1064.
[8] *Waho T., Ohtsunki Y. H.* Rad. Eff., 1976, v. 27, N 1, p. 151—160.
[9] *Базылев В. А., Головизнин В. В.* ЖЭТФ, 1982, т. 82, № 9, с. 1198—1210.
[10] *Andersen J. U., Bouderup E., Lagsgard E.* et al. J. Rad. Eff., 1981, v. 57, N 1, p. 234—258.
[11] *Kimura K., Mannami M.* Phys. Lett., 1982, v. 89A, N 3, p. 299—302.
[12] *Lindhard.* Fys. Medd., 1965, v. 34, p. 3—54; УФН, 1969, т. 99, № 2, с. 249—296.
[13] *Рябов В. А.* ЖЭТФ, 1974, т. 67, № 1, с. 150—160.
[14] *Мигдал А.* ДАН СССР, 1955, т. 105, № 1, с. 77—79.
[15] *Рябов В. А.* ФТТ, 1982, т. 24, № 7, с. 2141—2148.
[16] *Рябов В. А.* Тр. VIII ВСФВЗЧМ. М.: Изд-во МГУ, 1977, с. 10—14.
[17] *Кумахов М. А., Белошицкий В. В., Рябов В. А.* ЖЭТФ, 1984, т. 90, № 6, с. 878—889.
[18] *Kitagava M., Ohtsuki Y. H.* Phys. Rev., 1973, v. B8, N 12, p. 3117—3124.

Поступило в Редакцию
10 августа 1987 г.