

01;05;10

## Полная перестройка модовой структуры волновой функции каналированного электрона в кристалле со сверхрешеткой

© Т.А. Боброва, Л.И. Огнев

Российский научный центр "Курчатовский институт",  
123182, Москва, Россия

(Поступило в Редакцию 17 июля 1997 г.)

С помощью численного пошагового интегрирования уравнения Шредингера исследована динамика релятивистских электронов при плоскостном каналировании в искаженных кристаллах. Показано, что периодическое искажение плоскостного канала ("сверхрешетка") может вызвать полную перестройку модовой структуры волновой функции. В пределе слабых возмущений кристаллической решетки результаты моделирования согласуются с аналитическими результатами теории возмущений. Положение линии спектра спонтанного излучения в случае резонансных искажений зависит от длины периода сверхрешетки.

### Введение

Явление каналирования релятивистских заряженных частиц в монокристаллах, которому посвящено большое число теоретических и экспериментальных работ, обзор которых можно найти в [1–3], продолжает вызывать интерес исследователей [4–6]. Ряд экспериментальных результатов на поддается интерпретации в рамках существующих теорий каналирования релятивистских электронов и излучения при каналировании [1–3]. К таким явлениям относятся слабая ориентационная зависимость тормозного излучения и наведенной радиоактивности в монокристаллических мишенях, подвергшихся облучению узконаправленным пучком релятивистских электронов [7]. Каналирование должно приводить к увеличению выхода ядерных реакций и тормозного излучения, в экспериментах же по осевому каналированию электронов с энергией 50 MeV [7] и плоскостному каналированию электронов с энергиями 28–104 MeV [8], ориентационная зависимость этих эффектов не зарегистрирована. С другой стороны, генерация излучения при каналировании регистрируется [8], что указывает на наличие каналирования электронов. В экспериментах с монокристаллом кремния, легированного 1% хрома, отмечено появление неидентифицированной сильной линии рентгеновского излучения при осевом каналировании, тогда как линии с большей энергией пропадают [4]. Эффекты могут быть вызваны как нестабильностью движения каналированных электронов в реальных кристаллах, так и начальной эволюцией электронного пучка в приповерхностной области, где модовая структура волновой функции электрона еще не сформирована. Как следует из результатов исследования влияния дефектов типа сдвига кристаллических плоскостей [9], такого рода дефекты могут приводить к существенному искажению начальной заселенности состояний поперечного движения электронов. Заслуживает внимания также рассмотрение каналирования и излучения при каналировании в кристаллах с периодическими деформациями типа напряженных многослойных "сверхрешеток". Появление таких деформаций часто наблюдается при изготовлении различных полупровод-

никовых многослойных кристаллических структур методами молекулярной эпитаксии (см., например, [10]). Ранее излучение электронов при осевом каналировании в кристаллах со "сверхрешеткой" было теоретически рассмотрено в работе [11] для малых возмущений кристалла. При теоретическом рассмотрении каналирования электронов [11] использовано двухволновое приближение и показано, что в резонансном случае, когда разность энергий двух уровней поперечного движения кратна величине  $2\pi\hbar c/T$  ( $T$  — период сверхподрешетки), происходит расщепление спектра полной энергии электрона. При этом происходит снятие вырождения по продольному импульсу электрона.

Основной целью этой работы явилось изучение влияние периодической деформации канала, моделирующей напряженную "сверхрешетку" на динамику связанных состояний электронов энергией 5 MeV при плоскостном каналировании в кристалле кремния Si(110) без явного использования в расчетах модового приближения для волновой функции и таких упрощений (неизбежно присущих аналитическим методам), как двухволновое приближение, пренебрежение изменением формы усредненного потенциала, ограничение рассматриваемого интервала параметров и тому подобное.

### Теория

Движение релятивистской частицы в потенциале  $V(z, r)$  может быть описано уравнением типа уравнения Шредингера [12]. Для амплитуды  $\psi(z, r)$  волновой функции электрона

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

движущегося под малым углом к оси  $Oz$  так, что  $k_z \approx |k|$ , это уравнение имеет вид

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

где  $k$  — волновой вектор электрона;  $r = (x, y)$  — поперечные координаты, где  $V'(z, \mathbf{r}) = V(z, \mathbf{r}) 2\gamma m_0 / (\hbar^2 k_z^2)$ ;  $m_0$  — масса покоя электрона,  $\gamma$  — Лоренц-фактор.

При выводе (1) предполагалось, что

$$|\partial^2\psi/\partial z^2| \ll k_z|\partial\psi/\partial z|.$$

Далее будем предполагать, что флуктуации потенциала  $\delta V$  имеют гауссово распределение и  $\delta$ -коррелированы вдоль направления движения электрона. Тогда после усреднения (1) по статистике флуктуаций для амплитуды  $\langle\psi\rangle$  имеем уравнение (Дайсона)

$$2ik_z\partial\langle\psi\rangle/\partial z + \Delta_\perp\langle\psi\rangle - k_z^2\langle V'(z, \mathbf{r})\rangle\langle\psi\rangle - ik_z^2V''(\mathbf{r})\langle\psi\rangle = 0, \\ \psi(r, z=0) = \psi_0(r), \quad (2)$$

где

$$V''(r) = \frac{k_z}{4} \int_{-\infty}^{+\infty} \langle\delta V'(0, \mathbf{r})\delta V'(z, \mathbf{r})\rangle dz.$$

Уравнение (2) описывает когерентную составляющую волновой функции без учета ядерной отдачи. Подробное обсуждение физических аспектов сделанных приближений, а также расчет мнимой части потенциала  $V''(\mathbf{r})$  можно найти в работе [13].

Пусть электрон налетает на монокристалл под малым углом к некоторым кристаллическим плоскостям. Тогда комплексный потенциал  $V' + iV''$  может быть усреднен вдоль плоскостей кристалла. При этом зависимость от поперечной координаты  $y$  в уравнении (2) исчезает, а его численное решение существенно упрощается.

Численный метод решения уравнения (2), который ранее был применен для изучения движения каналированных электронов в идеальных монокристаллах [14,15] и отражения позитронов от косога среза монокристалла [16], предполагает пошаговый расчет поперечной волновой функции  $\psi(x, z)$  исходя из ее начального значения при  $z = 0$ .

При распространении электронной волны вдоль оси  $z$  поперечная волновая функция  $\psi(x, z)$  испытывает колебания при фиксированном  $x$ , причем

$$\psi(x, z) \sim \exp(iE_n z/(\hbar c)),$$

где  $\{E_n\}$  — собственные значения поперечной энергии движения электрона.

Отсюда видно, что спектр поперечных энергий можно получить, взяв преобразование Фурье от  $\psi(x, z)$  по координате  $z$ , а затем интегрируя спектр по ширине канала.

## Результаты расчетов

Сверхрешетка кристалла моделировалась в виде серии сдвигов кристаллических плоскостей (каждый из которых не превышал  $1/32$  межплоскостного расстояния) в соответствии с формулой  $U(x, z) = U_0(x + a \sin(2\pi z/T))$ . Здесь  $T$  — период сверхрешетки,  $a$  — амплитуда колебаний, причем  $a$  принималась равной от  $1/32$  до  $5/32$  межплоскостного расстояния, таким образом, на периоде сверхрешетки располагались от 2 до 10 дефектов типа

сдвига кристаллических плоскостей. Был рассмотрен случай плоской электронной волны без расходимости с энергией  $4.5 \text{ MeV}$ , падающей на поверхность кристалла под нулевым углом к плоскости каналирования.

В плоскостном потенциале кристалла Si(110) каналированные электроны с энергией  $4.5 \text{ MeV}$  имеют два связанных состояния с поперечными энергиями  $E_0 = 8.41 \text{ eV}$ ,  $E_1 = 19.2 \text{ eV}$ , третий (надбарьерный) уровень имеет энергию  $E_2 = 21.6 \text{ eV}$ . Глубина потенциальной ямы  $U_0 = 21.22 \text{ eV}$ . В качестве характерной длины фазовых колебаний может быть взята величина  $z_0 = 2\pi\hbar c/(E_1 - E_0) \simeq 1160 \text{ \AA}$ . Значения параметров  $a$  и  $T$  выбирались таким образом, чтобы максимальный угол наклона изогнутого канала к оси  $Z$  не превышал угла Линдхарда. На рис. 1–3 приведены спектры для трех различных периодов  $T$ : в первом случае  $T \gg z_0$ , во втором  $T \sim z_0$ , в третьем  $T < z_0$ . Амплитуда деформации принималась равной  $a = 3/32$ . На рис. 4 представлены собственные волновые функции, соответствующие рис. 2. Зависимость положения спектральных линий от периода сверхрешетки представлена на рис. 5.

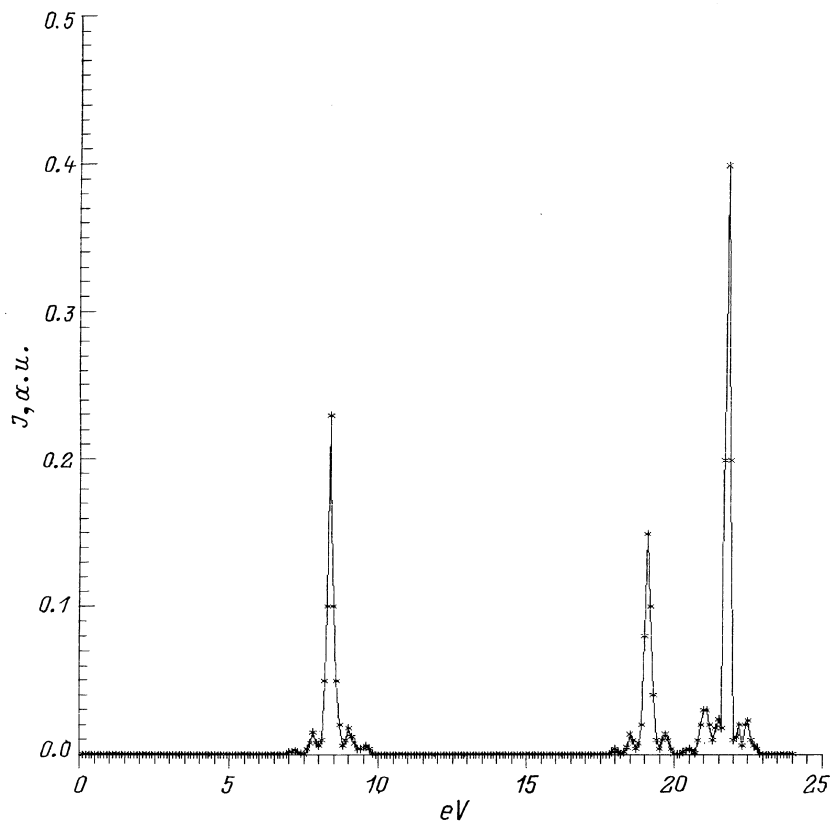
Как показали расчеты в интервале  $T = 20\,000 - 30\,000 \text{ \AA}$ , отвечающем случаю  $T \gg z_0$ , спектр поперечных энергий состоит из двух уровней (3-й — надбарьерный), соответствующих уровням неискаженного канала. Так же как и для результатов, полученных с помощью теории возмущений [11], каждый уровень имеет два небольших сателлита, причем разность энергий между основным уровнем и сателлитом в точности соответствует периоду деформации канала

$$|E - E_s| = 2\pi\hbar c/T. \quad (3)$$

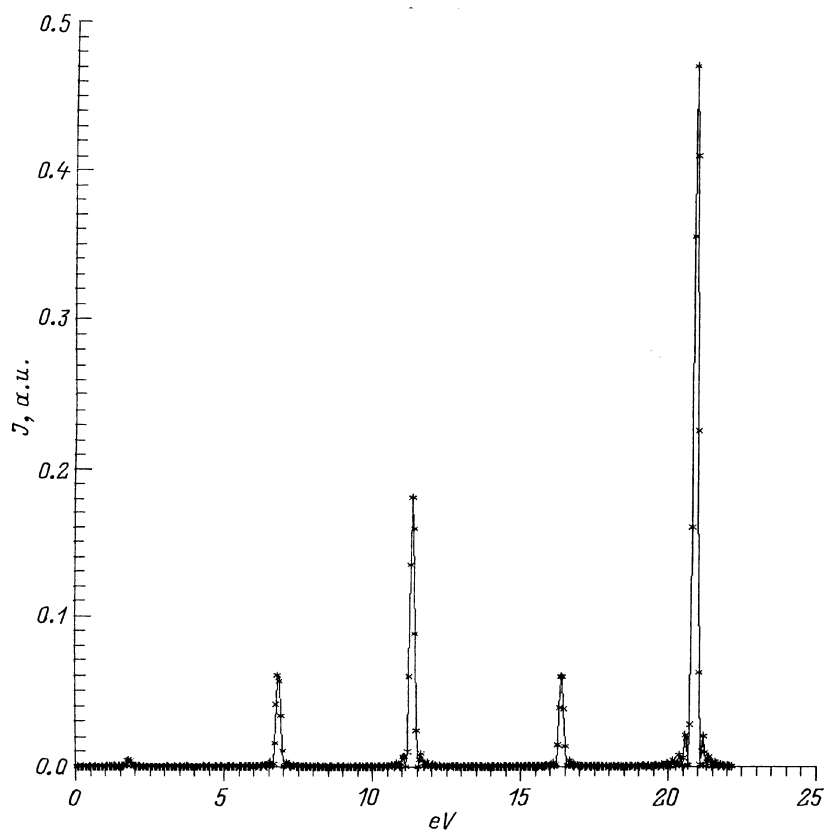
В случае больших периодов ( $T > 30\,000 \text{ \AA}$ ) 1-й основной уровень постепенно исчезает (вследствие четности волновой функции), сателлиты приближаются к основным линиям и становятся меньше. Таким образом, спектр стремится к спектру неискаженного канала.

С уменьшением периода ( $T = 2000 - 20\,000 \text{ \AA}$ ) сателлиты в соответствии с (3) удаляются от основных линий, их величина растет. Сближение сателлитов 1-го и 2-го основных уровней приводит к многочисленным расщеплениям как основных линий, так и сателлитов, к возникновению новых линий в спектре. В результате для линий вблизи потенциального барьера при  $T < 5000 \text{ \AA}$  уже невозможно указать основную линию и сателлиты. Однако для каждой спектральной линии всегда найдется парная, такая что будет выполнено соотношение (3).

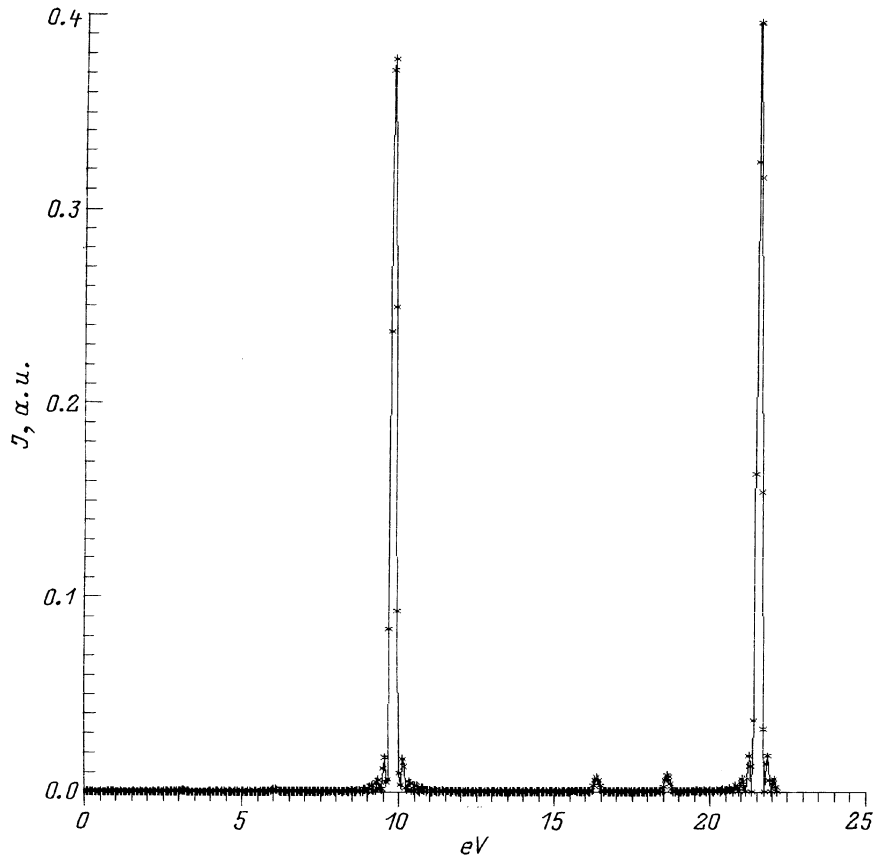
Интервал периодов  $T = 800 - 2000 \text{ \AA}$  (рис. 5) можно считать резонансным, так как здесь  $T \sim z_0$ . В этом случае все линии спектра сравнимы по своей величине. Штрихпунктиром приведена зависимость  $2\pi\hbar c/T$ , отображающая зависимость эффективной энергии, соответствующей периодическим деформациям. Очевидно, с уменьшением амплитуды изгиба канала, спектр энергий должен приближаться к спектру прямого канала. Анализ зависимости поперечного спектра от амплитуды  $a$  при



**Рис. 1.** Спектр поперечных энергий электронов для периода колебания плоскостного канала  $T = 22\,000 \text{ \AA}$ . Амплитуда изгиба  $a = 3/32d_0$ , глубина потенциальной ямы неискаженного канала  $U_0 = 21.22 \text{ eV}$ .



**Рис. 2.** Спектр поперечных энергий электронов для периода колебания плоскостного канала  $T = 1300 \text{ \AA}$ ,  $a = 3/32d_0$ .



**Рис. 3.** Спектр поперечных энергий электронов для периода колебания плоскостного канала  $T = 800 \text{ \AA}$ ,  $a = 3/32d_0$ ,  $U_0 = 21.22 \text{ eV}$ .

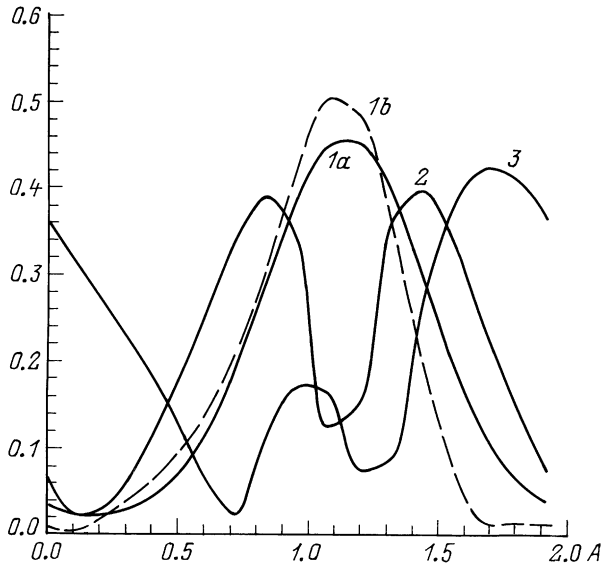
$T = 1160 \text{ \AA}$  показывает, что с ростом амплитуды изгиба уровни 0, 1 и 2 опускаются в глубь потенциальной ямы вследствие снижения потенциального барьера при усреднении потенциала изогнутого канала вдоль  $z$  [17]. Для усредненного потенциала наличие изгиба канала равнозначно увеличению эффективной амплитуды колебаний атомов и можно показать, что при  $T \sim z_0$  снижение потенциального барьера

$$U_0 - U \sim a^2, \quad T \sim z_0. \quad (4)$$

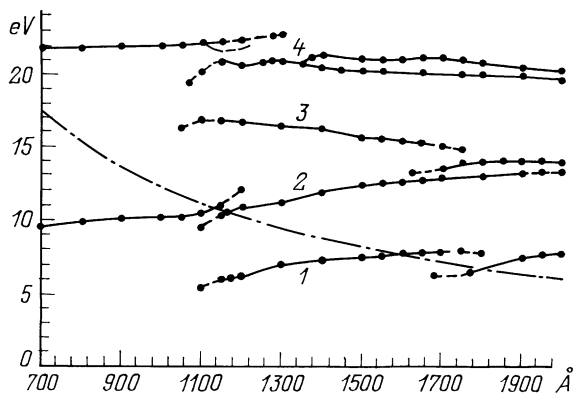
В то же время увеличение амплитуды периодического воздействия сверхрешетки приводит к поднятию спутного уровня  $0b$  [17]. В области  $T < z_0$  (период сверхподрешетки ограничен снизу условием каналирования  $T \geq 2\pi a/\alpha_l$ ) в спектре наблюдается только один подбарьерный уровень. Это может быть связано как с тем, что для данного интервала  $T$  максимальный угол наклона канала  $2\pi a/T \sim \alpha_l$ , и эффект каналирования слабо выражен, так и с тем, что глубина потенциальной ямы уменьшается. Вообще, если амплитуда изгиба не слишком мала ( $2\pi a/T \leq \alpha_l$ ), а период  $T \geq 2\pi\hbar c/U$ , где  $U$  — глубина потенциальной ямы, то колебательные движения электронов с большим периодом могут вообще не формироваться из-за постоянного сбоя фазы.

Таким образом, зависимость спектра от периода сверхрешетки можно разделить на три области: *A* — область больших периодов  $T$ , когда линии спектра совпадают с линиями неискаженного кристалла и имеют спутники; *B* — область резонансного взаимодействия, характеризующаяся несколькими связанными состояниями, существенно отличающимися от спектра неискаженного кристалла; *C* — область малых периодов  $T$ , характеризующаяся одним подбарьерным уровнем. Границы этих областей условны и зависят, в частности, от параметра  $a$ , характеризующего амплитуду отклонений канала. Так, при  $T = 1160 \text{ \AA}$  (рис. 5) с увеличением амплитуды область *B* переходит в область *A* [17], что связано с увеличением угла наклона канала вплоть до угла  $\alpha_l$  при  $a = 6/32$ .

Поперечная модовая структура волновой функции каналированного электрона в периодически искаженном канале приведена на рис. 4 для случая  $T \sim z_0$ . В этом случае основной уровень распадается на два уровня  $0a$  и  $0b$ . Для сравнения отметим, что при  $T < z_0$  существует всего один уровень 0 связанного движения. Из вида собственных функций, приведенных на рис. 4, следует, что дипольные моменты для переходов  $1 \rightarrow 0a$  и  $1 \rightarrow 0b$  будут оба отличны от нуля и, как видно из рис. 5, энергия кванта спонтанного излучения становится зависимой от периода деформации кристалла.



**Рис. 4.** Модовая структура волновой функции, соответствующая спектру, приведенному на рис. 2 (зависимость плотности вероятности от поперечной координаты): кривые *1a*, *1b* — основные состояния при энергиях 6.8 и 12.3 eV; 2, 3 — при 16.3 и 20.8 eV.



**Рис. 5.** Зависимость спектра поперечных энергий электронов от периода изгиба плоскостного канала:  $a = 3/32d_0$ ,  $U_0 = 21.2$  eV; 1–4 при периоде деформации 1300 Å соответствуют модам, представленным на рис. 4 кривыми *1a*, *1b*, 2, 3; штрихпунктир — зависимость для эквивалентной энергии деформации канала  $2\pi\hbar c/T$ ; штриховые кривые — состояния малой интенсивности.

Качественное объяснение полученным результатам может быть дано с учетом снятия вырождения по продольному импульсу вследствие деформации канала. Появление деформаций приводит к возникновению продольного масштаба порядка периода деформации, с которым период колебаний электрона в канале, жестко связанный с поперечной энергией, должен соотноситься. Это является аналогом квантования по Бору. На примере рис. 5, где штрихпунктиром представлена эквивалентная энергия, соответствующая колебаниям с периодом  $T$ , видно, что при малых периодах деформации  $T = 800$  Å

уровню 1 соответствуют колебания с периодом, значительно превышающим  $T$ . При этом величина энергии осциллирующий состояния отсчитывается вниз от вершины канала. Поэтому на характерном периоде волновая функция не совершает законченного колебания и состояние не формируется. При увеличении  $T$  и соответственном уменьшении эквивалентной энергии  $2\pi\hbar c/T$  наблюдается уменьшение частоты осциллирующий состояний  $0a$  и  $0b$  приблизительно на двукратной и однократной частотах деформации.

Ширина линий спонтанного излучения может быть определена с помощью комплексного потенциала  $V''(\mathbf{r})$  в уравнении (2) по методике, предложенной в работе [18]

$$\Gamma_{ij} = \frac{1}{\hbar c} \sum_{n=i,j} \langle n | \int \langle \delta V(0, \mathbf{r}_\perp) \delta V(z', \mathbf{r}_\perp) \rangle dz' | n \rangle$$

с учетом усреднения выражения  $\Gamma_{ij}$  по периоду изгиба канала

$$\bar{\Gamma}_{ij} = \frac{1}{T} \int \Gamma_{ij} dz.$$

Поскольку значения потенциала рассеяния существенно отличаются от нуля лишь вблизи атомной плоскости, то деформация изгиба будет лишь приводить к незначительному уменьшению ширины для четных собственных состояний каналированных частиц и незначительному увеличению ширины нечетных состояний, мало влияя на суммарную величину  $\bar{\Gamma}_{ij}$ , которая определяет ширину наблюдаемых линий излучения при каналировании.

Из проведенных исследований следует, что при выбранных параметрах сверхрешетки имеет место полная перестройка волновой функции каналированного электрона в кристалле. Слабое влияние деформаций канала на уширение спектральной линии и зависимость частоты излучения от периода деформации позволяют надеяться на экспериментальное обнаружение эффекта излучения каналированных релятивистских электронов в сверхрешетках монокристаллов. При этом изменение ориентации кристалла со "сверхрешеткой" по отношению к электронному пучку при неизменном угле падения по отношению плоскостям каналирования, что эквивалентно изменению периода сверхрешетки, будет приводить к трансформации наблюдаемого спектра излучения.

## Список литературы

- [1] *Wedell R.* // Phys. Stat. Sol. (b). 1980. Vol. 99. P. 11.
- [2] *Базылев В.А., Жеваго Н.К.* // УФН. 1990. Т. 160. № 12. С. 47–90.
- [3] *Hau L.V., Andersen J.U.* // Phys. Rev. 1993. Vol. A47. P. 4007.
- [4] *Richter A.* // Materials Sci. and Eng. 1992. Vol. B11. P. 139.
- [5] *Лазарь А.П.* // ЖТФ. 1996. Т. 66. Вып. 10. С. 102–108.
- [6] *Freundenberger J., Genz H., Groenig L. et al.* // NIM(B). 1996. Vol. 119. N 1–2. P. 123–130.
- [7] *Мещеров Б.Р., Туманов В.И.* // Письма в ЖЭТФ. 1990. Т. 51. Вып. 10. С. 506–508.
- [8] *Gouanere M., Sillou D., Spighele M.* // Phys. Rev. 1988. Vol. B38. P. 4352.

- [9] Боброва Т.А., Огнев Л.И. // Тез. Докл. XXVII Междунар. конф. по физике взаимодействия заряженных частиц с кристаллами. М., 1997. С. 77.
- [10] Kriechbaum M., Ambrosch K.E., Fanter E.J. et al. // Phys. Rev. B. 1984. Vol. B30. N 6. P. 3394–3405.
- [11] Рудько В.Н. // ЖЭТФ. 1985. Т. 89. Вып. 5(11). С. 1676–1684.
- [12] Lervig Ph., Lindhard J., Nielsen V. // Nucl. Phys. 1967. Vol. A96. N 3. P. 489–504.
- [13] Ognev L.I. // Radiation Effects and Defects in Solids. 1993. Vol. 25. P. 81–87.
- [14] Андреев А.В., Ахманов С.А., Выслоух В.А., Кузнецов В.Л. // ЖЭТФ. 1983. Т. 84. Вып. 5. С. 1743–1755.
- [15] Bobrova T.A., Ognev L.I. // Radiation Effects and Defects in Solids. 1993. Vol. 25. P. 97–101.
- [16] Боброва Т.А., Огнев Л.И. // Письма в ЖТФ. 1994. Т. 20. Вып. 19. С. 19.
- [17] Боброва Т.А., Огнев Л.И. // Тез. Докл. XXVII Междунар. конф. по физике взаимодействия заряженных частиц с кристаллами. М., 1997. С. 78.
- [18] Огнев Л.И. // ЖТФ. 1994. Т. 64. Вып. 5. С. 78.