

УДК 539.21 : 539.16 : 04

© 1991

О СТОЛКНОВИТЕЛЬНЫХ ШИРИНАХ ЛИНИЙ ИЗЛУЧЕНИЯ ПРИ КАНАЛИРОВАНИИ ЭЛЕКТРОНОВ

С. А. Михеев

В рамках исследования характеристик излучения релятивистских электронов при плоскостном каналировании получены выражения для столкновительных ширин уровней поперечной энергии. Обращено внимание на необходимость суммирования по конечным состояниям (включая квазимпульс) и усреднения по начальным. Показана необходимость модификации потенциала при использовании аппроксимации Дойля—Тернера для малых γ при проведении расчетов. Проведены численные расчеты и сравнение с экспериментом. Приведены данные о ширинах линий излучения при осевом каналировании с учетом влияния корреляций тепловых смещений атомов кристалла и функции отклика детектора. Получено хорошее согласие с экспериментом для модели корреляций.

1. Плоскостное каналирование

Несмотря на довольно большое число работ, посвященных теории и расчетам уширения линий излучения при плоскостном каналировании релятивистских электронов [1-7], до сих пор, по нашему мнению, нет полной ясности в количественном аспекте этого вопроса. Так, в работе [5] было показано, что основные конечные выражения для ширин линий излучения, полученные в [2], неверны. Это особенно ясно из того, что выражения для этих ширин не представляют собой сумму ширин уровней поперечной энергии начального и конечного состояний, они включают члены типа $\langle f | A | i \rangle \langle i | A' | f \rangle$, что физически совершенно необъяснимо. В ширину уровня (вероятность перехода в другие состояния, просуммированная по всем конечным состояниям) входят только характеристики данного уровня (см. подробнее [1, 3, 4]). Таким образом, численные данные работ [6, 7], основанные на теории [2], также, по-видимому, неверны, во всяком случае в части, относящейся к рассеянию на тепловых колебаниях атомов кристалла. Наиболее последовательная теория рассеяния каналированных частиц на тепловых колебаниях была разработана в работе [1]. Она основана на теории возмущений; возмущением является разница между кристаллическим потенциалом и потенциалом нулевого приближения — непрерывным потенциалом плоскостей кристалла, усредненным по тепловым колебаниям атомов; продольное движение частиц при этом является свободным. Были получены выражения для столкновительных ширин уровней поперечной энергии в приближении одной плоскости. В работе [5] в рамках приближения почти свободных электронов для описания поперечного движения электронов в нулевом приближении были получены формулы для вероятностей переходов между состояниями поперечного движения $|i^k\rangle$ и $|f^q\rangle$ с поперечными квазимпульсами k и q — W_{if}^{kq} . Ширины вычислялись суммированием этих вероятностей по зонам поперечного движения (по квазимпульсам суммирование не проводилось); в качестве потенциала кристалла использовалась сумма потенциалов атомов в аппроксимации Дойля—Тернера расчетов по модели Хартри—Фока [8]. Столкновительные ширины уровней поперечной энергии, однако, характеризуются просуммированными по

конечными состояниями поперечного движения вероятностями переходов, усредненными по приведенным квазиимпульсам начального состояния

$$\Gamma_i = \sum_{j \neq i} \sum_q \overline{W_{ij}^{kqk}}. \quad (1)$$

Поскольку подобная операция в [5] не проводилась, результаты расчетов в этой работе, по-видимому, неверны. Кроме того, существует другая особенность, связанная с использованием аппроксимации Дойля—Тернера.

Действительно, лишь для вида потенциала типа e^{-ar^2} выражения для ширин принимают относительно простой вид, иначе приходится вычислять многократные несобственные интегралы. Однако при использовании аппроксимации типа Дойля—Тернера необходимо принимать во внимание следующее обстоятельство. Поскольку эта аппроксимация потенциала атома не имеет кулоновского вида при $r \rightarrow 0$, она должна быть достаточно точной при $r \ll \max\{d_i, u\}$, где d_i , u — среднеквадратичное расстояние электрона до плоскости и одномерная амплитуда тепловых колебаний атомов кристалла соответственно. В дальнейшем мы покажем, каким образом можно модифицировать аппроксимацию Дойля—Тернера для точных расчетов ширин.

Выражения для ширин уровней поперечной энергии с использованием аппроксимации потенциала типа Дойля—Тернера имеют вид

$$\begin{aligned} \Gamma_i^{j \rightarrow n} = & \frac{4e^4 (\pi)^{1/2} n}{\hbar c} \sum_j \sum_i a_j a_i \left\{ ((b_j + b_i)(2u^2(b_j + b_i) + 1))^{-1/2} \times \right. \\ & \times \left[\frac{1}{w} \int dk \langle i^k(x) | \exp[-x^2(b_j + b_i)/(2u^2(b_j + b_i) + 1)] | i^k(x) \rangle - \right. \\ & - \frac{1}{w^2} \int dk dq \langle i^q(x) | \exp[-x^2 b_j (2u^2 b_i + 1)/(2u^2(b_j + b_i) + 1)] \times \\ & \times \langle i^k(y) | \exp[(-y^2 b_i (2u^2 b_j + 1) + 4u^2 b_j b_i xy)/(2u^2(b_j + b_i) + 1)] | i^q(y) \rangle | \times \\ & \left. \left. \times | i^k(x) \rangle \right] - ((4u^2 b_j b_i + b_j + b_i)(2u^2 b_j + 1)(2u^2 b_i + 1))^{-1/2} \times \right. \\ & \times \left[\frac{1}{w} \int dk \langle i^k(x) | \exp[-x^2(4u^2 b_j b_i + b_j + b_i)/(2u^2 b_j + 1)/(2u^2 b_i + 1)] | i^k(x) \rangle - \right. \\ & - \frac{1}{w^2} \int dk dq \langle i^q(x) | \exp[-x^2 b_j/(2u^2 b_j + 1)] \langle i^k(y) | \exp[-y^2 b_i/(2u^2 b_i + 1)] \times \\ & \left. \left. \times | i^q(y) \rangle | i^k(x) \rangle \right] \right\}, \quad (2) \end{aligned}$$

n — плотность атомов в плоскости; $w = 2\pi/d_p$ — длина зоны Бриллюэна (d_p — межплоскостное расстояние); u — амплитуда тепловых колебаний атомов кристалла; a_j и b_j выражаются через коэффициенты аппроксимации Дойля—Тернера

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

(a_0 — боровский радиус). Для подбарьерных состояний поперечного движения, у которых квадраты модулей волновых функций не зависят от квазиимпульса, интегрирование по нему в (2) проводится тривиально, что легко видеть, используя для этих состояний приближение изолированной плоскости или разложение волновых функций по плоским волнам.

Покажем теперь, как на значения вычисленных ширин влияет используемая аппроксимация потенциала. На рис. 1 приведена зависимость ширин двух нижних состояний поперечного движения от энергии электронов при каналировании вдоль плоскости (110) в монокристалле алмаза. Использовались три разных аппроксимации потенциала: а) 4-членная

Дойля—Тернера [8] для электронных факторов рассеяния ($0 < s < < 2 \text{ \AA}^{-1}$), б) 6-членная аппроксимация расчетов по модели Хартри—Фока для $0 < s < 6 \text{ \AA}^{-1}$, в) 8-членная аппроксимация, совпадающая с предыдущей в тех же пределах, а при $0.001 < r < 0.017 \text{ \AA}$ — с потенциалом Мольера. Видна существенная зависимость значений ширин от точности аппроксимации для малых r вплоть до изменения качественного поведения (отметим при этом, что при переходе от 6-членной аппроксимации к 8-членной расчетное положение линий излучения практически не меняется). В дальнейших расчетах использовалась 8-членная аппроксимация. Значения параметров аппроксимации a_j и b_j для атомов углерода следующие.

a_j	0.4125	2.1968	2.7675	2.9637	4.0288	8.4152	7.6316	8.9338
b_j	1.0671	3.4947	12.7623	47.8387	179.89	1174.8	19044.0	284540

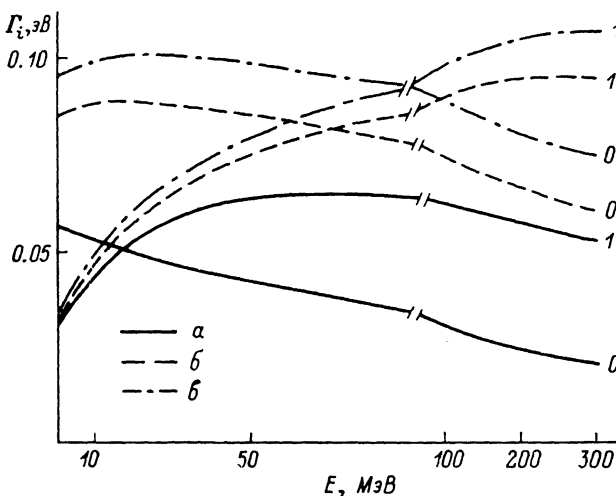


Рис. 1. Зависимость ширин двух нижних состояний поперечного движения от энергии электронов при каналировании вдоль плоскости (110) в монокристалле алмаза.

Электронные факторы рассеяния при этом имеют вид

$$f_e(s) = \sum_j a_j e^{-\beta_j s^2}. \quad (3)$$

Уширение уровней поперечной энергии вследствие возбуждения электронной подсистемы кристалла рассматривалось в работах [3, 4], в приближении газа свободных электронов — в [2]. В приближении газа свободных электронов выражения для вероятностей переходов в принципе совпадают и имеют вид [2]

$$W_{ij}^{kq} = \frac{8\pi n_e e^4}{\hbar c q_0^2} \int_0^\infty dp [1/p - 1/(p^2 + q_0^2)^{1/2}] |\langle f^q | e^{-i p x} | i^k \rangle|^2. \quad (4)$$

Чтобы получить выражения для ширин уровней, вероятности необходимо просуммировать по конечным состояниям, включая квазиимпульсы, и усреднить по начальным квазиимпульсам. Суммирование по зонам при этом проводится аналитически [1, 3, 4]. В результате получим

$$\Gamma_i^{q_i} = \frac{8\pi n_e e^4}{\hbar c q_0^2} \int_0^\infty dp [1/p - 1/(p^2 + q_0^2)^{1/2}] \left[1 - \frac{1}{w^2} \int dk dq \langle i^q(x) | e^{-i p x} | i^k(x) \rangle \times \right. \\ \left. \times \langle i^k(y) | e^{i p y} | i^q(y) \rangle \right], \quad (5)$$

$\hbar^2 q_0^2 / 2m = \hbar \omega_p$, ω_p — плазменная частота.

Полученное в [2] выражение для ширины линии излучения $1 \rightarrow 0$, в которое входит матричный элемент вида $\langle 1 | e^{i p x} | 1 \rangle \langle 0 | e^{-i p x} | 0 \rangle$, является неверным, поскольку не получается из (4) суммированием по конечным состояниям.

Раскладывая волновые функции поперечного движения по плоским волнам, можно записать

$$\Gamma_i^{el} = \frac{8\pi n_e e^4}{\hbar c q_0^3} \left\{ \frac{1}{2} \ln \frac{q_0^2 (\sqrt{1 + q_0^2/w^2} + 1)}{4w^2 (\sqrt{1 + q_0^2/w^2} - 1)} + 1 + q_0/w - \sqrt{1 + q_0^2/w^2} - \right. \\ \left. - \frac{1}{2w} \sum_{j, m} \sum_{s \neq p} \int dk dq c_j^k c_m^l c_s^k c_p^l \delta_{j-m, s-p} [|G_j - G_m + k - q|^{-1} - \right. \\ \left. [(G_j - G_m + k - q)^2 + q_0^2]^{-1/2}] \right\}, \quad (6)$$

где G_j — векторы обратной решетки, c_j^k — коэффициенты разложения волновой функции поперечного движения по плоским волнам.

Таблица 1

Ширины уровней поперечной энергии при плоскостном каналировании электронов в алмазе

Энергия электронов, МэВ	Уровень	$\Gamma_{фон}$, эВ	$\Gamma_{эд}$, эВ	$\Gamma_{зон}$, эВ
Направление каналирования (100)				
53.2	0	0.070	0.018	0
	1	0.036	0.052	0.090
80.23	0	0.071	0.016	0
	1	0.044	0.041	0.012
110.2	0	0.070	0.014	0
	1	0.050	0.025	0.001
	2	0.031	0.060	0.046
53.2	0	0.100	0.018	0
	1	0.063	0.049	0
	2	0.040	0.085	0.005
	3	0.024	0.104	0.026
80.23	0	0.100	0.016	0
	1	0.074	0.040	0
	2	0.050	0.068	0
	3	0.040	0.098	0
	4	0.018	0.130	0.020

На основании формул (2), (5) были проведены расчеты ширины уровней поперечной энергии связанных и околобарьерных состояний (табл. 1). Ширины приведены в лабораторной системе координат. В табл. 2 представлены рассчитанные ширины линий излучения при каналировании электронов разных энергий в алмазе. Для переходов, в которых участвуют состояния с заметной зонной шириной, столкновительные ширины просуммированы с зонными, хотя, конечно, при более точных расчетах необходимо проводить усреднение по зоне с учетом изменения дипольных матричных элементов и энергий излучения [9]. Для алмаза представлены измеренные ширины линий $\Gamma_{эсл}$, полученные в [10], причем авторам этой работы удалось выделить однородные ширины, связанные в основном с процессами некогерентного рассеяния.

Видно довольно хорошее, с нашей точки зрения, совпадение результатов расчетов и измерений; некоторое различие может объясняться как неточностью измерений (особенно при больших энергиях, когда значительно уменьшается отношение интенсивностей отдельных линий к не-

Ширины линий излучения при плоскостном каналировании электронов в алмазе

Энергия электрона, МэВ	Переход	Γ_{if} , кэВ	$\Gamma_{\text{эксч}}$, кэВ
Направление каналирования (100)			
53.2	1—0	5.83	4.92
80.23	1—0	9.19	13.5
110.2	1—0	15.02	29.2
	2—1	20.9	25.2
(110)			
53.2	1—0	5.08	7.2
	2—1	5.35	5.2
	3—2	6.28	5.4
80.23	1—0	11.48	15.8
	2—1	11.58	15.6
	3—2	12.78	12.8
	4—3	15.28	15.0

прерывному фону), так и трудностями с точными расчетами влияния рассеяния на электронах кристалла. Отметим также важность учета всех процессов уширения уровней, поскольку для разных состояний разные процессы могут играть определяющую роль.

2. Осевое каналирование

В работах [11, 12] исследовалось влияние корреляций тепловых смещений атомов кристалла на ширины линий излучения при осевом каналировании электронов и приводились результаты расчетов ширины для эксперимента [13]. Однако, как указывалось в [9], в работах [11, 12] не учитывалось влияние функции отклика детектора на наблюдаемые ши-

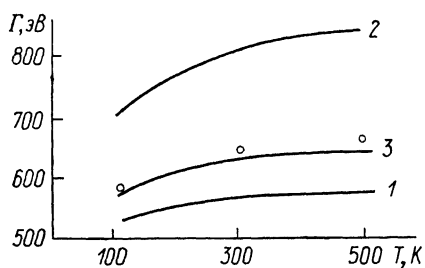


Рис. 2. Ширины линий излучения $2p-1s$ в Si в зависимости от T для разных моделей корреляций.

рины, что является в данном случае необходимым, поскольку разрешение детектора (~ 300 эВ) того же порядка, что и ширины (~ 500 эВ). На рис. 2 показаны результаты расчетов ширины линии излучения $2p-1s$ в зависимости от температуры кристалла кремния для разных моделей корреляций. Видно, что величины корреляций, рассчитанные в [14], приводят к весьма хорошему согласию расчетов и измерений (кривая 3). В то же время модель Дебая (кривая 2) дает для кремния завышенные значения ширины линии. Таким образом, можно считать, что спектроскопические данные по излучению электронов при каналировании подтверждают теоретические выкладки [14].

В заключение автор выражает свою благодарность В. А. Базылеву и А. В. Тулупову за полезные обсуждения.

Список литературы

- [1] Базылев В. А., Головизнин В. В. // ЖЭТФ. 1980. Т. 82. № 4. С. 1204—1220.
- [2] Andersen J. U., Bonderup E., Laegsgaard E., Sorensen A. H. // Phys. Scripta. 1983. V. 28. N 2. P. 308—358.
- [3] Базылев В. А., Головизнин В. В. // Препринт ИАЭ-3808/1ю. 1983. 23 с.
- [4] Базылев В. А., Глебов В. И., Головизнин В. В. // ЖЭТФ. 1986. Т. 88. № 1. С. 25—36.

- [5] Тулулов А. В. // ЖЭТФ. 1984. Т. 86. № 4. С. 1365—1375.
[6] Bugenkov F. F., Dudchik Yu. I., Komarov F. F. // Rad. Eff. 1984. V. 83. N 3—4. P. 241—249.
[7] Буренков А. Ф., Дудчик Ю. И., Комаров Ф. Ф. // ЖТФ. 1988. Т. 58. № 1. С. 195—197.
[8] Doyle P. A., Turner P. S. // Acta Cryst. 1968. V. 24. N 3. P. 390—397.
[9] Михеев С. А., Тулулов А. В. // ФТТ. 1988. Т. 30. № 2. С. 490—498.
[10] Gouanere M., Sillou D., Spighel A. H. // Nucl. Instrum. Meth. 1988. V. 38. N 7. P. 4352—4371.
[11] Михеев С. А., Тулулов А. В. // ФТТ. 1987. Т. 29. № 2. С. 449—455.
[12] Михеев С. А., Тулулов А. В. // ЖТФ. 1987. Т. 57. № 11. С. 2244—2246.
[13] Andersen J. U., Laegsgaard E., Sorensen A. H. // Nucl. Instrum. Meth. 1984. V. B2. P. 63—66.
[14] Nielsen O. H., Weber W. J. // J. Phys. C. 1980. V. 13. N 12. P. 2449—2460.

Институт атомной энергии
им. И. В. Курчатова
Москва

Поступило в Редакцию
25 июня 1990 г.
В окончательной редакции
22 августа 1990 г.

