

КИНЕТИКА НАСЕЛЕННОСТЕЙ ЗОН ПОПЕРЕЧНОЙ ЭНЕРГИИ И СПЕКТРЫ ИЗЛУЧЕНИЯ ЭЛЕКТРОНОВ В КРИСТАЛЛАХ ПРИ ОСЕВОМ КАНАЛИРОВАНИИ

С. А. Михеев, А. В. Тулунов

Исследована кинетика эволюции населенностей зон поперечной энергии электронов при движении в осевых каналах монокристалла с учетом всех факторов, изменяющих населенность. Показано, что на относительно малой глубине (~ 3 мкм) почти все электроны покидают канал. Решение кинетической задачи позволило рассчитать линейчатый спектр излучения электронов. Исследована форма излучаемой линии в различных случаях. Показано, что аппаратная функция детектора может заметно искажать форму линии. Проведено сравнение расчетных и экспериментальных спектров излучения и достигнуто хорошее согласие. Обсуждается возможность получения информации о кристалле из линейчатых спектров излучения каналированных электронов.

Экспериментальные исследования линейчатых спектров излучения релятивистских электронов умеренных энергий (≤ 50 МэВ) в кристаллах при каналировании первоначально имели своей целью изучение самого явления [1]. Увеличение точности измерений привело к обнаружению расхождений в экспериментальном положении линий излучения электронов и теоретически рассчитанном на основе имеющихся данных о монокристаллах. Это позволило предположить, что некоторые параметры кристаллов, полученные в основном из экспериментов по дифракции рентгеновских лучей, являются недостаточно точными; по отношению к ним линейчатое излучение при каналировании оказывается более чувствительным, чем рентгеновская дифракция. Таким образом, были уточнены значения факторов рассеяния электронов в монокристалле алмаза [2], скорректированы величины амплитуды тепловых колебаний атомов F в кристалле LiF [3], исследована изотопическая зависимость тепловых колебаний атомов в монокристаллах LiH, LiD [4]. В [4] продемонстрирована чувствительность линейчатых спектров к примесям и структурным дефектам; данные работы [5] позволили уточнить значение температуры Дебая для монокристалла кремния.

Перечисленные работы базируются на сравнении расчетного и измеренного положения линий в спектре излучения. Однако интересная информация может быть получена и из величины ширины линии, например данные о корреляциях тепловых колебаний атомов кристалла [6].

Все эти результаты указывают на возможность развития нового метода диагностики монокристаллов, дополняющего уже существующие. Для этого, помимо новых экспериментов, необходимы также теоретические методы, позволяющие рассчитать спектр «до конца», т. е. определить не только положение и ширину линий, но и их интенсивность. Это требует в первую очередь решения задачи о кинетике населенностей зон поперечной энергии каналированного электрона. Для плоскостного каналирования электронов умеренных энергий кинетика населенностей зон и спектры излучения исследовались в [7]. Случаю осевого каналирования посвящена настоящая работа.

Следует отметить, что кроме нахождения спектра излучения электронов представляет интерес и исследование деканализирования, позволяющее выяснить вопрос о времени жизни электронов в осевом канале.

1. Кинетика населенностей зон поперечной энергии

Изменение населенностей состояний поперечного движения каналированных электронов описывается кинетическими уравнениями (они являются следствием сохранения числа частиц)

$$\frac{dP_i^k}{dt} = \sum_f \sum_{k' \neq k} W_{if}^{kk'} (P_f^{k'} - P_i^k). \quad (1)$$

Здесь $P_{i(f)}^k$ — населенности состояний, отвечающих поперечному квазиимпульсу электрона k и расположенных в зоне с номером i (f); $W_{if}^{kk'}$ — вероятности переходов между состояниями с волновыми функциями поперечного движения ψ_i^k и $\psi_f^{k'}$. Волновые функции электрона ψ_i^k , $\psi_f^{k'}$ могут быть найдены на основе метода полностью ортогонализированных плоских волн (ПОПВ) [8, 9], при этом их набор будет полным и ортонормированным.

В представленном виде решить систему (1) невозможно, необходимо ограничить ее разумным образом. Представляется целесообразным использовать следующие приближения.

1) Введем некоторую граничную поперечную энергию $E_{\perp b}$. Для состояний с поперечной энергией $E_{\perp} < E_{\perp b}$ (сюда войдут связанные уровни, околобарьерные и несколько надбарьерных зон) будем рассматривать как переходы из « i » в « f », так и обратно. Если же в результате рассеяния электрон приобретает $E_{\perp} > E_{\perp b}$, то для него вероятность вернуться в состояния с $E_{\perp} < E_{\perp b}$ будем приравнивать нулю. Начальный поток частиц из состояний с $E_{\perp} > E_{\perp b}$ также полагаем равным нулю (начальная населенность этих состояний должна быть малой, что справедливо для достаточно малых углов влета электронов в кристалл). Точность этого приближения зависит от выбора $E_{\perp b}$ — чем больше $E_{\perp b}$, тем приближение точнее. Практически $E_{\perp b}$ определяется из условия малости изменения населенностей связанных уровней и околобарьерных зон (они определяют спектр излучения) при увеличении $E_{\perp b}$.

2) Поскольку спектр излучения электрона формируется за счет межзонных переходов, то детальное распределение электронов по квазиимпульсам внутри зон несущественно. Поэтому введем усредненные по зонам вероятности переходов W_{if} , а населенности состояний с различными квазиимпульсами внутри зоны будем считать равными.

3) Так как надбарьерные зоны, расположенные вблизи $E_{\perp b}$, являются очень широкими [8], то усреднение по квазиимпульсам здесь лучше проводить не по всей зоне, энергия в которой может меняться в широких пределах, а разбить зоны на несколько частей, и в пределах этих частей ввести средние вероятности и населенности.

В результате получим следующие кинетические уравнения

$$\frac{dP_i}{dt} = \sum_{f \neq i} W_{if} (P_f - P_i) - \Gamma_i^* P_i, \quad (2)$$

где P_i , P_f соответствуют состояниям с $E_{\perp i}$, $E_{\perp f} < E_{\perp b}$; Γ_i^* — вероятность ухода частицы с уровня i в состояния с $E_{\perp} > E_{\perp b}$.

Вероятности переходов между связанными состояниями поперечного движения электрона W_{if} за счет рассеяния на тепловых колебаниях атомов кристалла были получены в [10], а за счет возбуждения электронных оболочек атомов — в [11]. Конкретные выражения для W_{if} в методе ПОПВ для потенциала Дойля—Тёрнера и приближения свободных элек-

тронов приведены в [9]. Поскольку, согласно [6], корреляции тепловых колебаний атомов кристалла вносят заметный вклад в ширину уровня (по крайней мере больший, чем дает рассеяние на электронах кристалла), то они здесь также учитывались; выражения для W_{if} аналогичны работе [6]. Величины коэффициентов корреляции брались из работы [12] (из модели Дебая следуют завышенные значения коэффициентов корреляции для кремния).

Для надбарьерных состояний необходимо вычисление $W_{if}^{kk'}$ и последующее усреднение по квазимпульсам. Обобщение результатов [10, 11]

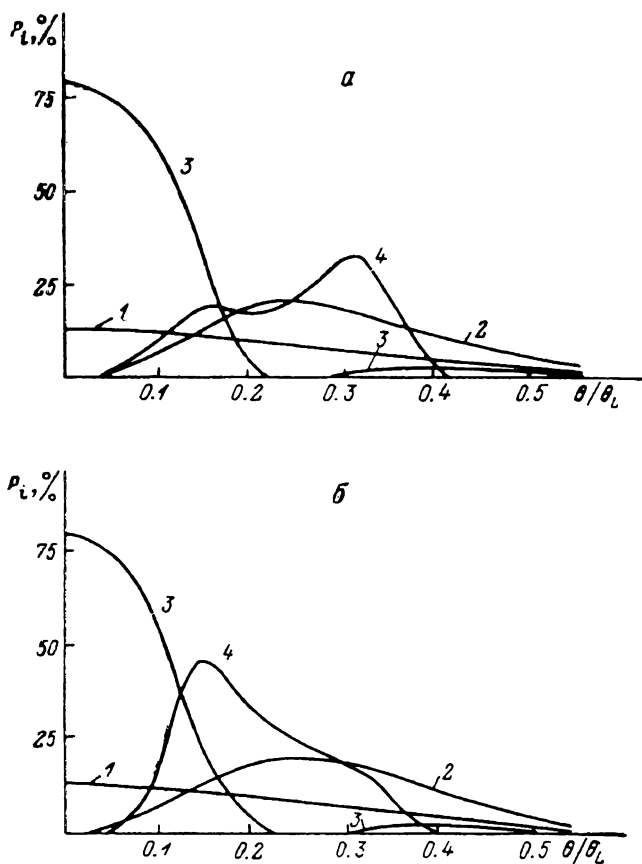


Рис. 1. Начальные населенности состояний поперечного движения.

а — $\theta_x = \theta_y$, б — $\theta_y = 0$; 1 — уровень 1s, 2 — уровень 2p, 3 — зона 2s, 4 — зона 3d.

на случай надбарьерных зон не составляет затруднений; общие выражения при этом практически идентичны [10, 11], необходимо лишь выполнить суммирование по всем кристаллографическим осям с данным набором индексов.

Следует отметить, что уравнения (1) справедливы при не слишком больших возмущениях. Как показано в [9, 11], с ростом энергии электронов (≥ 50 МэВ) возмущение (неупругое рассеяние) сильно возрастает, и при этих энергиях проводимое здесь рассмотрение несправедливо.¹ Отметим также, что вероятности радиационных переходов пренебрежимо малы по сравнению с вероятностями рассеяния, поэтому при решении кинетической задачи их можно не учитывать.

¹ Однако для таких энергий электронов подобное рассмотрение не имеет смысла — спектр излучения утрачивает линейчатый характер [9].

Начальные населенности состояний поперечного движения зависят от угла влета θ_0 электронов в кристалл по отношению к направлению кристаллографической оси и определяются выражением

$$P_i(\theta_0) = \left| \frac{1}{\sqrt{N S_0}} \int \psi_i^*(\rho) \exp(-i p_{\perp} \rho / \hbar) d\rho \right|^2 \quad (3)$$

где интегрирование ведется по поперечной координате, $p_{\perp} = p \theta_0$ — поперечный импульс влетающего в кристалл электрона.

Кинетические уравнения (2) решались для случая каналирования электронов с энергией 3.5 МэВ в направлении $\langle 100 \rangle$ монокристалла кремния. Выбор кристалла и энергии электронов связан с возможностью сравнить полученные результаты с экспериментальными данными [13]. Зонная структура поперечной энергии для этого случая приведена в [9]. На рис. 1 изображены начальные населенности связанных уровней ($1s$, $2p$) и околобарьерных зон ($2s$, $3d$) (критический угол каналирования

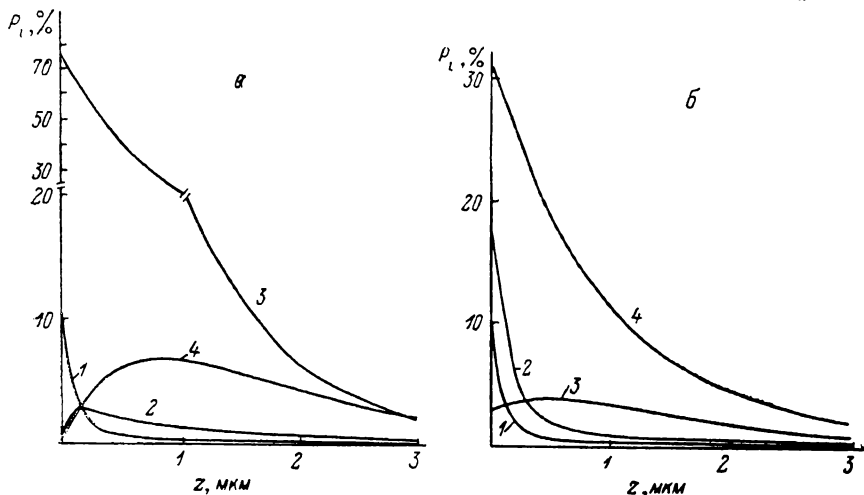


Рис. 2. Изменение населенности состояний в зависимости от глубины проникновения электронов в кристалл.

$a - \theta_0 = 0$, $b - \theta_0 = 0.2\theta_L$; 1 — уровень $1s$, 2 — уровень $2p$, 3 — зона $2s$, 4 — зона $3d$.

$\theta_L = 0.37^\circ$). Элементарная ячейка двумерной решетки осей $\langle 100 \rangle$ представляет собой квадрат, рис. 1, a соответствует влету электронов вдоль стороны квадрата ($\theta_y = 0$), а рис. 1, b — вдоль диагонали ($\theta_x = \theta_y$). Из рис. 1 следует, что максимальной населенности каждого состояния соответствует определенный угол θ_0 ; отметим также, что в пределах рассматриваемого диапазона углов влета почти все электроны ($\geq 90\%$) захватываются в состояния с $E_{\perp} \leq U_0/10$.

Из рис. 2 приведены зависимости населенности этих же состояний от глубины проникновения электронов в кристалл для двух значений углов влета: 0 и $0.2\theta_L$. В расчетах использовалось $E_{\perp b} \sim U_0$, U_0 — глубина потенциальной ямы для осевого канала. Отличие в результатах при уменьшении $E_{\perp b}$ до величины $\sim U_0/2$ на глубине 2 мкм было менее 1% для населенности уровня $2p$ и зоны $3d$. Из рис. 2 видно, что наиболее интенсивно опустошается глубоколежащий уровень $1s$, что является вполне естественным, поскольку распределение электронной плотности $|\psi_{1s}(\rho)|^2$ имеет максимум на оси и достаточно узкое. В результате уже на глубине ~ 0.3 мкм это состояние практически не населено. Почти столь же быстро опустошается уровень $2p$, если в начальный момент он населен (рис. 2, b). Несколько медленнее электроны покидают околобарьерные зоны $2s$ и $3d$. Это связано с тем, что квадрат их поперечной волновой функции размазан по двумерной элементарной ячейке. Тем не

менее на глубине ~ 3 мкм населенность связанных и околобарьерных состояний становится малой — $< 10\%$ несмотря на почти стопроцентный начальный захват.

Отметим также, что в случае, когда начальная населенность уровня (зоны) равна нулю (рис. 2, а), то за счет подпитки из других состояний населенность на глубине < 1 мкм достигает максимума, а затем падает. Величина максимальной населенности оказывается небольшой ($< 10\%$).

На основании полученных зависимостей населенностей уровней (зон) от глубины можно рассчитать ориентационные зависимости интенсивностей отдельных линий и спектр излучения электронов.

2. Спектры излучения электронов при осевом каналировании

В рассматриваемом диапазоне энергий электронов их излучение дипольно [1], матричный элемент радиационного перехода d_{if} вычисляется при помощи волновых функций базиса ПОПВ [8, 9]. Для связанных состояний поперечного движения каналированного электрона спектральная линия излучения, регистрируемого в направлении его движения, при достаточно большой толщине кристалла имеет лоренцову форму [1]

$$\frac{d^2N}{dE_\gamma d\Omega} = \frac{d_{if}^2 E_{if}^3}{2\pi\hbar^4 c^4} \frac{1}{2\gamma^2} \frac{\Gamma_{if}/2\pi}{(E_\gamma - E_{if})^2 + \Gamma_{if}^2/4} \int_0^l P_i(z) dz, \quad (4)$$

где N — число квантов, E_γ — энергия квантов; $\gamma = E/mc^2$, E — энергия электронов; E_{if} — энергия перехода между уровнями i и f в лабораторной системе ($E_{if} = 2\gamma^2 E_{\perp if}$); $\Gamma_{if} = (\Gamma_i + \Gamma_f)/2$; Γ_i , Γ_f — ширина уровней i и f в лабораторной системе; $d\Omega$ — элемент телесного угла.

Выражение (4) справедливо при $l \geq 2\gamma^2 \hbar c / \Gamma_{if}$ (l — толщина кристалла). При выполнении обратного условия в формуле для спектрально-угловой плотности излучения необходимо учесть конечность времени пролета электрона через кристалл. Тогда (4) следует домножить на фактор

$$\frac{2\pi\hbar c}{l\Gamma_{if}} |1 - \exp\{-l/2\gamma^2 \hbar c [\Gamma_{if}/2 + i(E_\gamma - E_{if})]\}|^2,$$

при этом форма линии становится нелоренцовой.

Для переходов между надбарьерными зонами и из надбарьерных состояний в связанные дипольный матричный элемент и энергия перехода зависят от поперечного квазиимпульса электрона k . Вследствие этого выражение (4) необходимо усреднить по k

$$\frac{d^2N}{dE_\gamma d\Omega} = \frac{1}{2\pi\hbar^4 c^4} \frac{\Gamma_{if}}{2\pi} \int_0^l P_i(z) dz \frac{1}{S_k} \int dk \frac{E_{if}^3}{2\gamma^2} d_{if}^2 \frac{1}{(E_\gamma - E_{if})^2 + \Gamma_{if}^2/4}. \quad (5)$$

Здесь Γ_{if} и $P_i(z)$ — усредненные по k столкновительная ширина и населенность надбарьерного состояния; интегрирование по k проводится по первой зоне Бриллюэна с площадью S_k . Форма линии в этом случае также отличается от лоренцовой, поскольку зонная и столкновительная ширины комбинируются довольно сложным образом.

В реальном эксперименте на выходе детектора вследствие конечности его разрешения наблюдается сигнал, описываемый сверткой профиля излучаемой линии $f_0(E)$ с функцией отклика детектора $f_D(E)$

$$f(E) = \int_{-\infty}^{\infty} f_D(y) f_0(E - y) dy. \quad (6)$$

Для гауссовой функции отклика детектора с полной шириной на полувысоте Γ_D , свернутой с лоренцовой формой линии (4), получим функцию Фойгта [14]

$$f(E_\gamma) = \frac{d_{if}^2}{2\pi\hbar^4 c^4} Q_D \frac{E_{if}^3}{2\gamma^2} \int_0^l P_i(z) dz \times$$

$$\times \frac{2\Gamma_{if} \ln 2}{\pi \sqrt{\pi} \Gamma_D^2} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{-y^2} dy}{\frac{\Gamma_{if}^2 \ln 2}{\Gamma_D^2} + \left(\frac{E_\gamma - E_{if}}{\Gamma_D} 2\sqrt{\ln 2} - y \right)^2}, \quad (7)$$

где Q_D — эффективность детектора. Аналогичное выражение получается и для формы линии (5).

В проведенных расчетах полагалось, что пучок электронов обладает угловой расходимостью, имеющей гауссово распределение с полной шириной на полувысоте $\Delta\theta = 0.03^\circ$, что соответствует экспериментальным условиям [13]. Разрешение детектора равнялось $\Gamma_D = 280$ эВ. На рис. 3 показана ориентационная зависимость выхода излучения на линии $2p-1s$

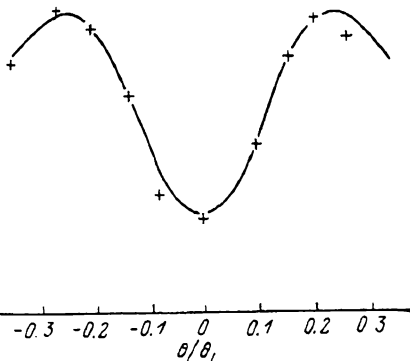


Рис. 3. Ориентационная зависимость числа излучаемых квантов в линии $2p-1s$.

Сплошная линия — теория, кресты — эксперимент [13].

при толщине кристалла 0.3 мкм от угла влета относительно оси θ_0 и результаты измерений [13]. К сожалению, из данных [13] не удается извлечь информацию об абсолютных значениях числа испускаемых квантов. Поэтому на рис. 3 приводится сравнение относительных величин, нормированных на максимум выхода излучения. Спектры излучения каналированных электронов с энергией 3.5 МэВ для толщины кристалла Si 2 мкм и угла влета $\theta_0 = 0.075^\circ$ ($0.2\theta_L$) приведены на рис. 4. В этом случае толщина монокристалла оказывается достаточной, чтобы пренебречь искажением формы линий за счет конечности времени пролета электрона через кристалл. На рис. 4, а показан спектр излучения каналированных электронов (4), (5) без учета функции отклика детектора, а на рис. 4, б — с учетом реального разрешения детектора в эксперименте [13]. При сравнении теоретических (сплошная линия) и экспериментальных (кресты) спектров, мы нормировались на максимум линии $2p-1s$ (на рисунке приведена рассчитанная интенсивность). В [13] не приведены данные об угле влета электронов в кристалл относительно плоскостей (011), лежащих вдоль направления каналирования. Дело в том, что околосбарьерные состояния не обладают осевой симметрией, и их начальная населенность зависит от угла влета электронов относительно этих плоскостей (рис. 5). Соответственно и интегральная населенность, определяющая интенсивность линии, также будет изменяться при изменении этого угла. Для линии $2p-1s$ угол влета относительно плоскостей значительно менее существен, и интенсивность практически не меняется. На рис. 5 показана ориентационная зависимость отношения интенсивностей линий излучения $3d-2p$ и $2p-1s$ от полярного угла φ между направлением поперечного импульса влетающих в кристалл электронов и пересечением плоскостей (011) и (100). Из соотношения интенсивностей этих двух линий излучения и был выбран угол $\varphi = 25^\circ$, примерно соответствующий максимуму вы-

хода излучения линии $3d-2p$ при постоянном угле влета относительно оси ($\theta_0=0.2\theta_L$).

Из сопоставления результатов расчетов и эксперимента [13], представленных на рис. 3, 4, следует, что теория достаточно хорошо описывает наблюдаемое излучение — как положение и ширину спектральных линий, так и зависимость от угла влета электронов в кристалл относи-

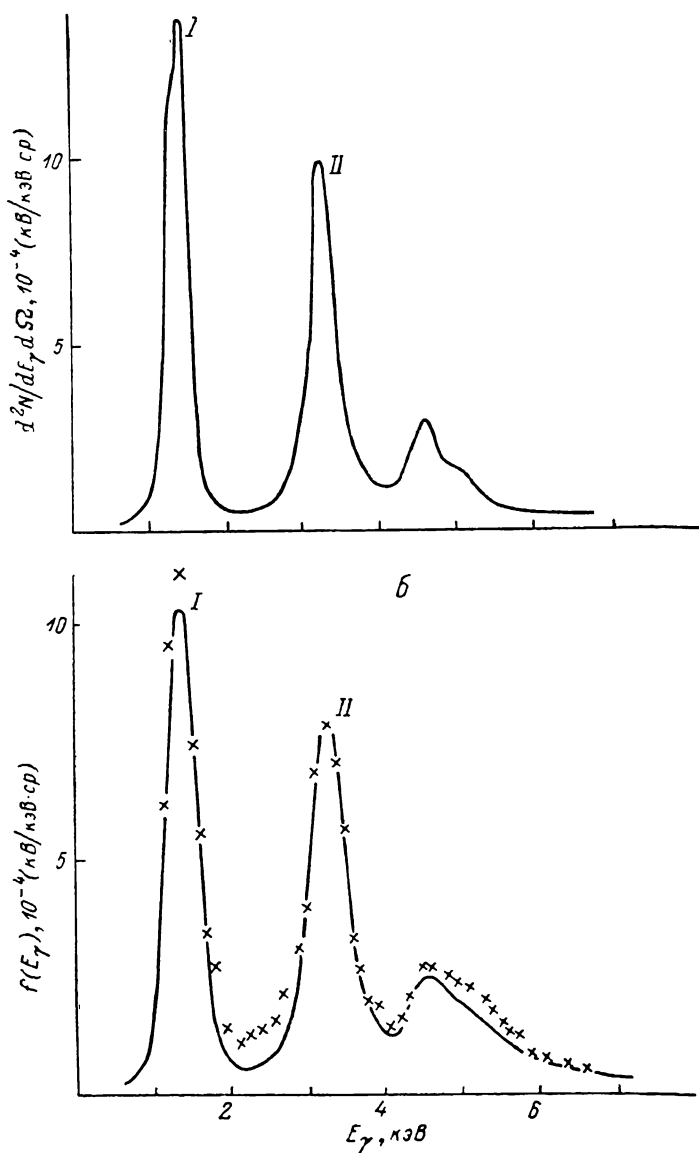


Рис. 4. Спектры излучения каналированных электронов.

a — без учета разрешения детектора, *б* — с учетом конечности разрешения детектора; *I* — линия $3d-2p$, *II* — линия $2p-1s$.

тельно оси. Несколько худшее соответствие в интенсивности линий $2p-1s$ и $3d-2p$ может быть объяснено отсутствием полной определенности экспериментальных условий (расходимость пучка электронов, эффективность детектора и др.). Возможно также, что расхождения обусловлены недостаточной точностью принятых нами приближений. Для выявления причин расхождений необходимы в первую очередь более детальные эксперименты.

Однако имеющиеся данные позволяют сделать ряд выводов. Как следует из сравнения рис. 4, *a* и *б*, существенный вклад в измеренные ши-

рины линий вносит разрешение детектора: на рис. 4, а линии уже и форма их несколько иная, чем на рис. 4, б. Например, ширина линий $3d-2p$ и $2p-1s$ без учета функции отклика детектора (назовем ее естественной) практически одинакова — 382 и 392 эВ соответственно. Измерения же дают ~ 460 и ~ 560 эВ, т. е. заметное различие. Это различие связано с тем, что основной вклад в ширину линии $3d-2p$ вносит зонная ширина, а в ширину линии $2p-1s$ столкновительная. За счет этого естественная форма линий оказывается разной, а свертка (6) с функцией отклика детектора усугубляет это отличие.

Для очень тонких кристаллов (в [13] использовался в частности, монокристалл Si толщиной 0.3 мкм) форма линий и ширина определяются малостью времени пролета электронов через мишень. Эти данные, таким образом, не несут в себе информацию о взаимодействии каналированных электронов с кристаллом. Оптимальной в рассматриваемом диапазоне энергий является толщина $\sim 3 \div 5$ мкм, а для энергии электронов ~ 20 МэВ — $10 \div 20$ мкм.

Отметим также хорошее согласие между теоретическим и экспериментальным значениями ширины линии $2p-1s$ (рис. 4, б). Основной вклад

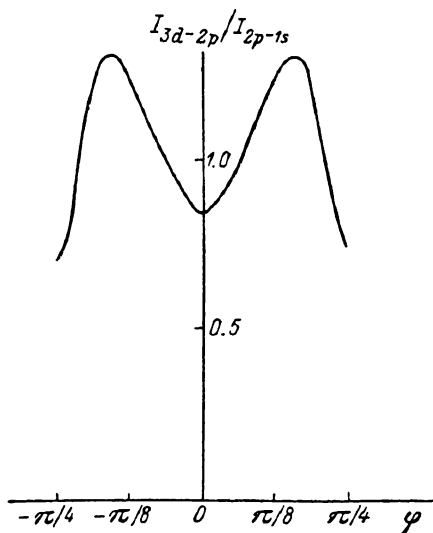


Рис. 5. Ориентационная зависимость отношения интенсивностей излучения линий $3d-2p$ и $2p-1s$ от полярного угла.

в ширину этой линии вносит рассеяние на тепловых колебаниях атомов кристалла, и, следовательно, здесь наибольшим образом может сказаться на результате наличие корреляций в колебаниях атомов. Выше отмечалось, что в проведенных расчетах использовались коэффициенты корреляции, вычисленные в [12], и достигнутое совпадение теории с экспериментом служит подтверждением результатов [12]. Использование коэффициентов корреляции в модели Дебая в нашем случае приводит к заметному расхождению расчетной и измеренной ширины линии $2p-1s$.

Полученные в работе результаты показывают, что развитая к настоящему времени теория прохождения релятивистских электронов умеренных энергий через кристалл под малыми углами к кристаллографической оси [6-11] позволяет полностью описать наблюдаемые спектры излучения электрона. Эти спектры содержат информацию о взаимодействии каналированных электронов с кристаллом и о самом кристалле. Дальнейшее развитие работ по диагностике кристаллов [2-5] требует проведения более детальных экспериментов с четкой фиксацией всех экспериментальных условий. Основой теоретических расчетов с имеющимися данными о кристаллах и последующего сравнения с измеренными величинами может служить теория [6-11] и результаты, полученные в настоящей работе.

Л и т е р а т у р а

- [1] Базылев В. А., Жеваго Н. К. Излучение быстрых частиц в веществе и во внешних полях. М.: Наука, 1987. 270 с.
- [2] Klein R. K., Kephart J. O., Pantell R. H. et al. Phys. Rev., 1985, vol. 31B, N 1, p. 68-91.
- [3] Swent R. L., Pantell R. H., Park H. et al. Phys. Rev., 1984, vol. 29B, N 1, p. 52-61.
- [4] Park H., Kephart J. O., Klein R. K. et al. J. Appl. Phys., 1985, vol. 57, N 5, p. 1661-1665.

- [5] *Datz S., Berman B. L., Dahling B. A. et al. Nucl. Instrum. Meth.*, 1986, vol. 13B, N 1—3, p. 19—22.
- [6] *Михеев С. А., Тулунов А. В. ФТТ*, 1987, т. 29, № 2, с. 449—455.
- [7] *Тулунов А. В. ЖЭТФ*, 1984, т. 86, № 4, с. 1365—1375.
- [8] *Михеев С. А., Тулунов А. В. ФТТ*, 1985, т. 27, № 5, с. 1307—1313.
- [9] *Михеев С. А., Тулунов А. В. ФТТ*, 1986, т. 28, № 8, с. 2447—2454.
- [10] *Базылев В. А., Головизнин В. В. ДАН СССР*, 1982, т. 266, № 5, с. 1112—1114.
- [11] *Базылев В. А., Глебов В. И., Головизнин В. В. ЖЭТФ*, 1986, т. 91, № 1, с. 25—36.
- [12] *Nielsen O. H., Weber W. J. J. Phys. C*, 1980, vol. 13, N 10, p. 2449—2460.
- [13] *Andersen J. U., Bonderup E., Loegsgaard E. et al. Nucl. Instrum. Meth.*, 1982, vol. 194, N 1, p. 209—224.
- [14] *Спектроскопия газоразрядной плазмы. Сб. статей, ред. С. Э. Фриш. М.: Наука*, 1970.

Институт атомной энергии
им. И. В. Курчатова
Москва

Поступило в Редакцию
12 августа 1987 г.