1988 ФИЗИКА ТВЕРДОГО ТЕЛА Том 30, в. 8
1988 SOLID STATE PHYSICS Vol. 30, № 8

УДК 539.21 : 539.16.04

ВЛИЯНИЕ ДИСЛОКАЦИЙ НА ЛИНЕЙЧАТОЕ ИЗЛУЧЕНИЕ КАНАЛИРОВАННЫХ ЭЛЕКТРОНОВ В ЕСТЕСТВЕННЫХ МОНОКРИСТАЛЛАХ АЛМАЗА

В. А. Базылев, С. А. Михеев, А. В. Тулупов

Рассмотрено влияние дислокаций в естественных монокристаллах алмаза на линейчатый спектр излучения каналированных электронов. Развита теория возмущений, позволяющая описать изменение спектра излучения вследствие влияния дислокаций. По сравнению с совершенным кристаллом дислокации приводят к сдвигу и уширению уровней поперечной энергии электрона. Рассмотрена стационарная и нестационарная постановки задачи. Проведено сравнение с имеющимися экспериментальными данными. Продемонстрирована чувствительность линейчатых спектров излучения к плотности, размеру дислокаций и величине сдвига кристаллографических плоскостей. Обсуждается постановка эксперимента, позволяющая получать информацию о дислокациях из спектров излучения при каналировании.

Известно [1, 2], что более 98 % естественных монокристаллов алмаза принадлежат к типу Ia, характеризующемуся высокой концентрацией примеси атомов азота ($\sim 10^{25} \div 10^{27}$ м$^{-3}$). Значительная часть содержащегося в кристаллической решетке азота объединена в крупные формирования — диски, которые ответственны за пик в ИК спектре поглощения. Дислокации этого типа исследовались методами рентгеновской дифракции и электронной микроскопии [3-6]. Было установлено, что диски расположены в плоскостях {100} элементарной ячейки, имеют размер 40—1000 Å (гигантские диски достигают величины 50 мкм) и распределены в решетке хаотически. В работах [7, 8] были предложены две различные модели встраивания дисков в решетку алмаза, причем величина сдвига плоскостей (100) оказывается различной: $a_0/3$ [7] и $0.4a_0$ [8], где a_0 — постоянная решетки. Экспериментальные измерения обнаруживают сдвиг величиной 0.33—$0.362a_0$ [5, 6].

Однако существующие экспериментальные методы не дают исчерпывающей информации относительно плотности числа дислокаций, их размеров и величины сдвига. Разные методы могут приводить к отличающимся друг от друга величинам. Это стимулирует интерес к дальнейшим исследованиям дислокаций в монокристаллах алмаза.

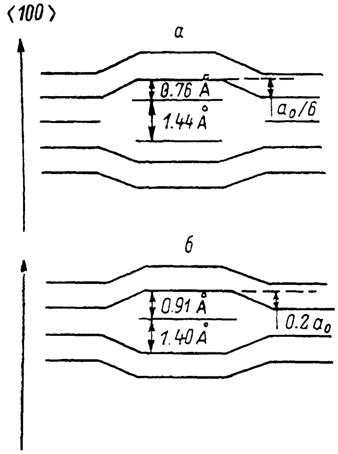
В работах [9, 10] было показано, что экспериментально регистрируемые линейчатые спектры излучения каналированных электронов в монокристаллах алмаза типа Ia и IIa имеют существенные различия в интенсивности, ширине и положении линий излучения. Следовательно, появляется принципиальная возможность исследования дислокаций по линейчатым спектрам. Подобная задача требует развития теории влияния дислокаций на спектр излучения.

В настоящей работе предложен метод учета влияния дислокаций на движение электронов вблизи осей и плоскостей монокристалла. В рамках теории возмущений показано, что дислокации приводят к сдвигу и уширению уровней поперечной энергии каналированных электронов и соответствующему изменению положения и ширины линий в спектре излучения. Проведены численные расчеты для плоскостного и осевого каналирования электронов при помощи методов, развитых в [11-14]. Показано, что из сравнения экспериментальных и рассчитанных величин можно получать информацию о размерах дисков, их площади, среднем расстоянии между ними и плотности числа дисков. Для этого необходимо одновременное измерение как положения, так и ширины линий излучения для плоскостного и осевого каналирования при двух-трех значениях энергии электронов.

1. Модель дислокации

В соответствии с моделями дислокаций [7, 8] появление диска приводит к сдвигу кристаллографических плоскостей на длине, равной размеру диска (см. рисунок). При этом в модели [7] дислокация представляет собой двойной диск, составленный из атомов азота, а в модели [8] — одиночный диск, составленный из атомов углерода. Поскольку плотность числа дисков, как правило, невелика (например, в монокристалле, используемом в [10], каналированный электрон сталкивается примерно с 25 дислокациями размером ~100 Å на длине 12 мкм, т. е. суммарная длина дислокаций составляет ~2 % от толщины кристалла), то естественно рассматривать дислокацию как возмущение, слегка изменяющее характер движения частицы в непрерывном потенциале атомных плоскостей или осей монокристалла [15].

Далее, так как количество дисков по сравнению с числом изломленных плоскостей (осей) невелико (один диск приводит к сдвигу всех плоскостей (n, k, l)), влияние самого диска можно не учитывать и рассматривать в качестве возмущения потенциал плоскости, сдвинутой на фиксированное расстояние.



Модели дискообразных дислокаций (из [10]).
а — модель [7], двойные диски состоят из атомов азота; *б* — модель [8], диск состоит из атомов углерода.

Наконец, поскольку дислокации рассматриваемого типа имеют макроскопические размеры (наименьший размер порядка 40—50 Å), т. е. значительно превосходят межатомное расстояние, аналогично постановке задачи о каналировании (см. [15]) можно ввести непрерывный потенциал дислокации, и возмущение тогда сводится к непрерывному потенциалу плоскости или оси, сдвинутому по сравнению с потенциалом, используемым при решении задачи в идеальном кристалле, на величину νa_0, где ν — величина сдвига. Для плоскости (100) и оси $\langle 100 \rangle$ $\nu=1/6$ в модели [7] и $\nu=0.2$ в модели [8], для плоскости (110) $\nu=\nu_{100}/\sqrt{2}$.

В результате имеем следующую постановку задачи. Движение релятивистского электрона с энергией E описывается уравнением Клейна—Гордона (рассматриваем стационарную задачу)

$$\left(\frac{\hbar^2\Delta}{2m} - U(\mathbf{r}) + \frac{E^2 - m_0^2c^4}{2E}\right)\psi(\mathbf{r}) = 0, \tag{1}$$

где $m=m_0\gamma$, $\gamma=E/m_0c^2$, $\mathbf{r}=\{x, y, z\}$, $\rho=\{x, y\}$ с потенциалом $U(\mathbf{r})=U_0(\rho)+$ $+\Delta U(\mathbf{r})$,

$$\Delta U(\mathbf{r}) = \Delta U_1(\rho)\sum_{z_d}[\eta(z-z_d) - \eta(z-z_0-z_d)], \tag{2}$$

$\Delta U_1(\rho)=U_1(\rho)-U_0(\rho)$, $\eta(z)=0$ при $z<0$ и $\eta(z)=1$ при $z\geqslant 0$; z_0 — размер диска; z_d — расстояние между дисками вдоль кристаллографической оси; суммирование в (2) ведется по всем дискам вдоль направления движения электрона. Непрерывные потенциалы $U_0(\rho)$ и $U_1(\rho)$ вводятся следующим образом:

$$U_{0,1}(\rho) = d^{-1}\left\langle \int V_{0,1}(\mathbf{r})\, dz \right\rangle_{\rm th}, \tag{3}$$

$V_0(\mathbf{r})$ — потенциал атома оси; $V_1(\mathbf{r})$ — потенциал атомов дислокации; $\langle\ldots\rangle_{\rm th}$ означает усреднение по тепловым колебаниям атомов кристалла (см. [15]).

Формулы (2), (3) записаны для случая осевого каналирования. Для плоскостного каналирования имеем

$$U(\mathbf{r}) = U_0(x) + \Delta U(\mathbf{r}),$$
$$\Delta U(\mathbf{r}) = \Delta U_1(x) \sum_{\rho_d} [\eta(|\rho - \rho_d|) - \eta(|\rho - \rho_d| - R_0)]. \tag{4}$$

Здесь $\Delta U_1(x) = U_1(x) - U_0(x)$, R_0 — радиус диска, $\rho = \{y, z\}$,

$$U_{0,1}(x) = n\left\langle \int V_{0,1}(\mathbf{r})\, dy dz \right\rangle_{\rm th},$$

n — плотность атомов плоскости (дислокации).

2. Сдвиг и уширение уровней

Представляя волновую функцию электрона как

$$\psi(\mathbf{r}) = L^{-1/2} \exp(ip_{\parallel} z/\hbar)\, \psi_{\perp}(\rho),$$

где $p_{\parallel}$ — продольный импульс электрона, приводим уравнение (1) к виду

$$\left[-\frac{\hbar^2\Delta_{\perp}}{2m} + U_0(\rho) + \Delta U(\rho)\right]\psi_{\perp}(\rho) = E_{\perp}\psi_{\perp}(\rho), \tag{5}$$

где $\Delta_{\perp} = \partial^2/\partial x^2 + \partial^2/\partial y^2$; $E_{\perp} = (E^2 - c^2p_{\parallel}^2 - m_0^2c^4)/2E$ — поперечная энергия электрона. Для возмущения $\Delta U(\rho)$ получаем

$$\Delta U(\rho) = \frac{1}{L}\Delta U_1(\rho) \int dz dz_d f(z_d) \sum_{z_d} [\eta(z - z_d) - \eta(z - z_0 - z_d)] = \frac{N_d z_0}{L}\Delta U_1(\rho). \tag{6}$$

Здесь $f(z_d)$ — функция распределения дисков по положениям вдоль оси, N_d — число дисков на данной оси, L — толщина кристалла. Вводя среднее расстояние между дислокациями $\bar{z}_d$, получаем

$$\Delta U(\rho) = \frac{z_0}{\bar{z}_d}\Delta U_1(\rho). \tag{7}$$

Аналогично в плоскостном случае имеем

$$\Delta U(x) = n_{dp} S_d \Delta U_1(x), \tag{8}$$

где n_{dp} — плотность числа дисков в плоскости каналирования, S_d — площадь диска.

1) Сдвиг положения уровней. Критерием применимости стационарной теории возмущений является условие $\Delta U/U_0 \ll 1$, которое выполнено даже при $\Delta U_1 \sim U_0$, поскольку всегда $z_0 \ll \bar{z}_d$ $(n_{dp}S_d \ll 1)$. Тогда для величины сдвига положения уровней поперечной энергии электрона $|i>$ получаем

$$\Delta E_{\perp}^i = (\Delta U)_{ii}, \tag{9}$$

где $(\ldots)_{ii} = \int \ldots |\psi_{\perp}^i|^2 d\rho\ (dx)$, а ΔU дается (7) или (8).

2) Уширение уровней поперечной энергии. Рассмотрим для определенности случай осевого каналирования. Будем считать, что дислокации распределены в кристалле хаотически, что подтверждается экспериментальными измерениями [1]. Тогда рассеяние электрона

на разных дислокациях является некогерентным и, следовательно, полную ширину уровня Γ_i можно выразить через сечение рассеяния на одной дислокации. В результате для ширины уровня имеем выражение

$$\Gamma_i = \frac{2\pi}{\hbar} n_l \sum_F |\langle I \mid \Delta U(\mathbf{r}) \mid F\rangle|^2 \delta(\Delta E_\perp^{if} + \Delta E_\parallel)\, d\nu_F. \tag{10}$$

Здесь $\sum\limits_F \ldots d\nu_F = \sum\limits_{f \neq i} \int \ldots dp_{\parallel 2}(L/2\pi\hbar)$; $\psi_\perp^i(\rho)$, $\psi_\perp^f(\rho)$ — начальное и конечное состояния поперечного движения электрона с энергией $E_\perp^i$ и $E_\perp^f$ ($\Delta E_\perp^{if} = E_\perp^f - E_\perp^i$); $p_{\parallel 1}$, $p_{\parallel 2}$ — начальный и конечный продольный импульсы электрона; $\Delta E_\parallel = \sqrt{c^2p_{\parallel 1}^2 - c^2p_{\parallel 2}^2}$; $n_l = n_d S_0$ — линейная плотность дислокаций; n_d — объемная плотность дислокаций; S_0 — площадь, приходящаяся на одну ось,

$$| I\rangle = \frac{1}{\sqrt{L}} \exp\left[i \frac{p_{\parallel 1}}{\hbar} z\right] \psi_\perp^i(\rho).$$

Подставляя волновые функции $|I\rangle$, $|F\rangle$ и возмущение $\Delta U(\mathbf{r})$ в (10), получаем

$$\Gamma_i = \frac{n_l}{c\hbar^2} \sum_{f \neq i} |(\Delta U_1)_{if}|^2 \frac{4\sin^2(\Delta E_\perp^{if} z_0/2\hbar c)}{(\Delta E_\perp^{if}/\hbar c)^2}. \tag{11}$$

Оценим величину $\Delta E_\perp^{if} z_0/\hbar c$. При $\Delta E_\perp^{if} \sim 5 \div 10$ эВ, что является типичной величиной для переходов между глубоколежащими уровнями в яме для осевого каналирования в диапазоне энергий электронов, в котором возможно наблюдение линейчатого излучения, получаем, что для дисков размером до 200 Å выполняется условие

$$\Delta E_\perp^{if} z_0/\hbar c \ll 1. \tag{12}$$

Тогда последний сомножитель в (11) равен z_0^2, и используя полноту набора поперечных волновых функций электрона, получаем формулу для ширины уровня

$$\Gamma_i = \frac{n_l z_0^2}{\hbar^2 c} [(\Delta U_1^2)_{ii} - (\Delta U_1)_{ii}^2]. \tag{13}$$

Для плоскостного каналирования имеем аналогичную формулу с заменами S_0 на d_p, $U(\rho)$ на $U(x)$, $\psi_\perp^i(\rho)$ на $\psi_\perp^i(x)$.

Для справедливости изложенной теории возмущений и, следовательно, формулы (13) необходимо, чтобы полная вероятность ухода с уровня в результате взаимодействия с одной дислокацией была существенно меньше единицы

$$\Gamma_i/n_l \sim \Delta U_1 z_0/\hbar c \ll 1. \tag{14}$$

В принципе можно освободиться от этого требования, ограничившись лишь условием (12). Это условие означает мгновенность действия возмущения. Соответствующую формулу для вероятности перехода, которая уже может быть сравнима с единицей, можно получить в рамках нестационарной теории возмущений. Действительно, уравнение для $\hat{S}$-матрицы

$$i\hbar \frac{d\hat{S}}{dt} = \hat{W}(t)\hat{S}, \tag{15}$$

где

$$\hat{W}(t) = \exp\left(\frac{i}{\hbar} H_0 t\right) \Delta U(\rho, t) \exp\left(-\frac{i}{\hbar} H_0 t\right), \quad H_0 = -\hbar^2\Delta_\perp/2m + U_0(\rho), \quad \Delta U(\rho, t) =$$

$$= (U_1(\rho) - U_0(\rho))\,(\eta(t) - \eta(t - t_0)),$$

легко интегрируется, если использовать мгновенность действия возмущения $\Delta U(\rho, t)$ (12)

$$\hat{S} = \exp\left[-\frac{i}{\hbar}\int \Delta U(\rho, t)\, dt\right]. \tag{16}$$

В результате полная вероятность ухода с уровня вследствие рассеяния на одной дислокации будет равна

$$W_i = 1 - \left[\exp\left(-\frac{i}{\hbar c}\Delta U_1 z_0\right)\right]^2_{ii}. \tag{17}$$

Полная ширина уровня тогда запишется в виде

$$\Gamma_i = n_l\left[1 - \left(\exp\left(-\frac{i}{\hbar c}\Delta U_1 z_0\right)\right)^2_{ii}\right]. \tag{18}$$

Если выполняется неравенство (14) и справедлива теория возмущений при взаимодействии с одной дислокацией, то из (18) следует (13). Выражение (18) можно использовать для относительно крупных дислокаций, но при относительно высоких энергиях электрона, когда расстояние между уровнями становится достаточно малым и во всяком случае выполняется неравенство $\Delta E_{\perp}^{if} \ll \Delta U_1$.

3. Результаты расчетов. Сравнение с экспериментом

Численные расчеты величины сдвига и уширения уровней были проведены для случаев осевого и плоскостного каналирования при помощи изложенных в [11–14] методов нахождения волновых функций и уровней энергии каналированного электрона. Отметим, что для бездефектных кристаллов методы [11–14] позволяют получить согласие с экспериментальными значениями положения линий излучения в пределах 1—3 %. В этих же пределах будет находиться точность расчетных значений сдвига и уширения уровней в кристаллах с дислокациями.

В нулевом приближении использовалась аппроксимация Дойля—Тернера потенциала Хартри—Фока. Дислокации считались составленными из атомов углерода; как выше отмечалось, это соответствует модели дисков [8]. Если же принять модель [7], то и в этом случае можно не учитывать вклад в потенциал U_1 от двойных дисков из атомов азота (см. раздел 1).

1) Сдвиг положения уровней. Для плоскостного каналирования электронов нахождение поперечных волновых функций сводится к решению матричной задачи на собственные значения [11]. При этом волновые функции представлены в виде Фурье-разложений

$$\psi_{\perp}^i(x) = d_p^{-1/2}\sum_m C_m^i \exp\left[i\left(k_{\perp} - mg\right)x\right], \tag{19}$$

где d_p — расстояние между плоскостями, g — вектор одномерной обратной решетки, $k_{\perp}$ — поперечный квазиимпульс электрона, i — номер уровня. Раскладывая тогда непрерывный потенциал сдвинутых вследствие наличия дислокаций плоскостей по векторам обратной решетки

$$U_1(x) = \sum_l U_l \cos lg\left(x \pm \nu a_0\right), \tag{20}$$

из (9) получаем выражение для величины сдвига уровней

$$\Delta E_{\perp}^i = n_{dp} S_d \sum_{m,\, n} C_m^i C_n^i U_{m-n}\left[\cos\left((m-n)\, g\nu a_0\right) - 1\right], \tag{21}$$

где U_{m-n} — коэффициент разложения потенциала в ряд Фурье

$$U_k = \frac{2\pi\hbar^2}{m_0} N f_e\left(\frac{kg}{4\pi}\right)\exp\left(-\frac{1}{2}\left(kgu_1\right)^2\right). \tag{22}$$

Здесь N — плотность атомов в кристалле, u_1 — амплитуда тепловых колебаний атомов. Амплитуды рассеяния $f_c(s)$ приведены в работе [16]. В случае значительного зонного уширения величину $\Delta E_{\perp}^{i}$ необходимо усреднить по квазиимпульсам. Отметим, что, естественно, (21) не зависит от направления сдвига плоскостей кристалла.

В работах [9, 10] были выполнены измерения сдвига в положении линий излучения электронов с энергией 30.5 и 54.5 МэВ, каналированных плоскостями (100) монокристаллов алмаза типа Ia и IIa. Эти результаты позволяют провести сравнение развитой теории с экспериментом. Однако в [9, 10] не приведено полных данных об использованном монокристалле алмаза типа Ia, а постановка эксперимента была методически незавершенной. Требуемая для исследования дислокаций в алмазе постановка будет обсуждаться ниже.

Таблица 1

Произведения плотности числа дисков в плоскости (100) на площадь диска

E, МэВ	Переход	$n_{dp}S_d$	
		$\nu=1/6$	$\nu=0.2$
30.5	1—0	$(3.48\pm1.43)\cdot10^{-2}$	$(5.46\pm2.51)\cdot10^{-2}$
54.5	1—0	$(7.08\pm0.75)\cdot10^{-2}$	$(8.80\pm0.92)\cdot10^{-2}$
54.5	2—1	$1.79\cdot10^{-2}$	$5.03\cdot10^{-2}$

В табл. 1 приведены величины произведения плотности числа дислокаций в плоскости (100) на площадь дислокации $n_{dp}S_d=(\Delta\hbar\omega)_{\text{exp}}/2\gamma^2\,(\Delta U_1)_{ii}$, рассчитанные для двух моделей дислокаций [7, 8]. Величина ошибки в определении $n_{dp}S_d$ обусловлена ошибкой эксперимента. Для линии излучения, отвечающей переходу 2—1 при энергии электронов 54.5 МэВ, приводится приближенное значение, поскольку положение этой линии для монокристалла алмаза типа Ia измерено в [10] также приближенно. Из табл. 1 видно, что величины $n_{dp}S_d$ в пределах ошибки для одного и того же перехода при разной энергии электрона совпадают в случае модели дислокаций [8]. Отсюда следует, что она ближе к реальной ситуации, чем модель [7]. Если использовать размеры дисков, приведенные в [10] 40—200 Å, то из табл. 1 для плотности числа дислокаций в плоскости имеем $n_{dp}=2.27\cdot10^{10}\div5.68\cdot10^{11}$ см$^{-2}$. В то же время, считая, что среднее расстояние между дисками $\bar{z}_d=500$ Å [10], для n_{dp} получаем $n_{dp}=2.78\cdot10^{10}$ см$^{-2}$. Сравнение двух значений n_{dp} показывает, что большинство дисков имеет диаметр ~200 Å. Более определенные выводы можно сделать при специальной постановке эксперимента.

Для электронов с энергией 30.5 МэВ, каналированных плоскостями (110) монокристалла алмаза типа Ia, отдельные линии излучения не наблюдались. Это объясняется двумя обстоятельствами. Во-первых, потенциальная яма каналирования для плоскостей (110) вдвое глубже, чем для плоскостей (100), и, следовательно, число уровней в яме при той же энергии электрона вдвое больше, а линий излучения втрое больше, чем для плоскостей (100). Сдвиг и уширение уровней приводят тогда к перекрыванию линий излучения и образованию общего широкого подъема в спектре излучения. Во-вторых, плотность числа дислокаций вдвое выше для плоскостей (110), поскольку к излому плоскостей приводят диски, расположенные как в плоскости (010), так и в плоскости (100). В результате вдвое возрастает сдвиг и уширение уровней, что также способствует размыванию линий. Таким образом, для наблюдения отдельных линий в спектре излучения электронов, каналированных плоскостями (110) алмаза типа Ia, необходимо использование меньшей энергии электронов $\sim10\div15$ МэВ.

Для расчета волновых функций при осевом каналировании электронов эффективным оказывается формализм псевдопотенциала [13, 14], в котором глубоколежащие уровни поперечной энергии не имеют зонного уширения. Поэтому при определении сдвига в положении уровней отсутствует необходимость в усреднении по поперечному квазиимпульсу электрона, которое может вносить некоторую расчетную неточность при нахождении центра линии излучения.

Измерений сдвига в положении линий излучения для осевого каналирования электронов в монокристаллах алмаза типа Ia и IIa не производилось. Поэтому здесь мы приведем лишь расчетные значения $\Delta E^i_\perp$ ($z_0=40$, $\bar{z}_d=500$ Å) для демонстрации возможности наблюдения влияния дислокаций на положение линий. В табл. 2 даны собственные значения поперечной энергии электрона $E^i_\perp$ и величины сдвига уровней для моделей дислокаций [7, 8] при движении частиц разной энергии вдоль оси ⟨100⟩. Как следует из табл. 2, модели [7, 8] приводят к отличающимся значениям сдвига уровней, что свидетельствует о чувствительности положения линий в спектре излучения к структуре дислокаций. Величина сдвига линии составляет, например, для линии $2p$—$1s$ при $E=30.5$ МэВ $\Delta\hbar\omega=3.02$ кэВ, т. е. легко регистрируется в эксперименте. В случае дисков большей величины, естественно, сдвиг уровней также будет больше.

Таблица 2

Сдвиг уровней поперечной энергии электронов при движении вдоль оси ⟨100⟩

E, МэВ	Уровень	$E^i_\perp$, эВ	$\Delta E^i_\perp$, эВ	
			$\nu=1/6$	$\nu=0.2$
5	$1s$	−41.4	−1.23	−1.30
	$2p$	−17.0	−0.47	−0.56
16.9	$1s$	−57.8	−1.63	−1.70
	$2p$	−34.6	−1.10	−1.17
	$2s$	−24.0	−0.69	−0.77
	$3d$	−19.5	−0.60	−0.68
	$3p$	−16.3	−0.41	−0.50
30.5	$1s$	−64.9	−1.78	−1.84
	$2p$	−44.4	−1.37	−1.44
	$2s$	−32.1	−0.96	−1.05
	$3d$	−28.6	−0.93	−1.01
	$3p$	−23.7	−0.67	−0.77

2) Уширение уровней. При плоскостном каналировании электронов наличие дислокаций приводит как к переходам между уровнями поперечной энергии, так и к расплыванию пучка в плоскости каналирования. Последний фактор также дает уширение линии излучения. Величину этого уширения для каждого уровня трудно точно рассчитать, а можно получить лишь среднюю по всем уровням величину (см. [12]). В связи с этим оказывается затруднительным извлекать информацию о дислокациях из сопоставления расчетных и наблюдаемых ширин линий излучения при плоскостном каналировании.

Напротив, в случае осевого каналирования электронов ширину уровня практически полностью определяет ядерное рассеяние, вклад которого может быть рассчитан с достаточно высокой точностью (порядка 2—3 %) [14]. При наличии дислокаций ширина уровня будет складываться из столкновительной и дислокационной ширины, тогда из сравнения ширин линий в монокристаллах алмаза типа Ia и IIa можно получить дислокационную ширину и, сопоставляя ее с расчетной величиной, извлекать информацию о плотности числа дисков и их размерах.

В табл. 3 приведены результаты расчета для ядерной Γ_n и дислокационной Γ_d ширины уровней при каналировании электронов вдоль оси ⟨100⟩ монокристалла алмаза (считалось, что все оси изломаны, а линейная плотность числа дислокаций $2.08 \cdot 10^4$ см$^{-1}$, $z_0 = 40$ Å [10]). Как видно из табл. 3, дислокационная ширина уровня составляет 30—50 % от ядерной и, следовательно, легко регистрируется в эксперименте. В то же время различия моделей дислокаций [7] и [8] приводят к незначительному отличию в значениях Γ_d, т. е. для их экспериментального обнаружения необходимо высокоточное выполнение измерений.

Таблица 3

Ядерная и дислокационная ширины уровней при осевом каналировании электронов

E, МэВ	Уровень	Γ_n, эВ	Γ_d, эВ	
			$\nu = 1/6$	$\nu = 0.2$
5	1*s*	0.41	0.24	0.24
	2*p*	0.25	0.061	0.064
16.9	1*s*	0.47	0.36	0.37
	2*p*	0.38	0.16	0.19
	2*s*	0.24	0.10	0.11
	3*d*	0.23	0.069	0.074
	3*p*	0.27	0.066	0.068
30.5	1*s*	0.45	0.41	0.42
	2*p*	0.47	0.27	0.27
	2*s*	0.28	0.16	0.17
	3*d*	0.32	0.14	0.14
	3*p*	0.25	0.10	0.11

Обсудим постановку эксперимента по наблюдению линейчатого излучения каналированных электронов, которая могла бы способствовать получению информации о дислокациях рассмотренного типа. Для этого необходимо регистрировать спектры излучения электронов на одном и том же монокристалле типа Ia с одновременным измерением ширины и положения линий излучения при двух-трех значениях энергии электрона из диапазона 5—50 МэВ. При больших энергиях частиц перестают выполняться условия устойчивого каналирования [14, 17]. Измерения следует осуществлять как в условиях плоскостного, так и осевого каналирования. Аналогичный эксперимент должен быть выполнен с монокристаллом алмаза типа IIa, причем в процессе замены кристалла необходимо не допускать изменения энергии электронов и положения спектрометра. В этом случае можно надеяться на получение дополнительной информации о дислокациях в алмазе по сравнению с другими методами.

Литература

[1] *Evans T.* Contemp. Phys., 1976, vol. 17, N 1, p. 45—70.
[2] *Evans T.*, *Maguire J.* J. Phys. C, 1981, vol. C14, N 12, p. L374—L384.
[3] *Evans T.*, *Phaal C.* Proc. Roy. Soc. London, 1962, vol. A270, N 1343, p. 106—124.
[4] *Fearick R. W.*, *Sellschop J. P. F.* Nucl. Instrum. Meth., 1980, vol. 168, N 1—3, p. 195—202.
[5] *Bursill L. A.*, *Hutchison J. L.*, *Sumida N.*, *Lang A. R.* Nature, 1981, vol. 292, N 5823, p. 518—520.
[6] *Barry J. C.*, *Bursill L. A.*, *Hutchison J. L.* Phyl. Magazine A, 1983, vol. 48, N 1, p. 109—121.
[7] *Lang A. R.* Proc. Phys. Soc. London, 1964, vol. 84, N 6, p. 871—876.
[8] *Humple P.* Proc. Roy. Soc. London, 1982, vol. A381, N 1780, p. 65—81.
[9] *Park H.*, *Pantell R. H.*, *Swent R. L.* et al. J. Appl. Phys., 1984, vol. 55, N 2, p. 358—364.

[10] *Park H., Kephart J. O., Klein R. K.* et al. J. Appl. Phys., 1985, vol. 57, N 5, p. 1661—1664.
[11] *Тулупов А. В.* ЖЭТФ, 1981, т. 81, № 5, с. 1639—1648.
[12] *Тулупов А. В.* ЖЭТФ, 1984, т. 86, № 4, с. 1365—1375.
[13] *Михеев С. А., Тулупов А. В.* ФТТ, 1985, т. 27, № 5, с. 1307—1313.
[14] *Михеев С. А., Тулупов А. В.* ФТТ, 1986, т. 28, № 8, с. 2447—2454.
[15] *Базылев В. А., Жеваго Н. К.* Излучение быстрых частиц в веществе и во внешних полях. М.: Наука, 1987, гл. 6.
[16] *Doyle P. A., Terner P. S.* Acta Cryst., 1968, vol. A24, N 3, p. 390—397.
[17] *Базылев В. А., Глебов В. И., Головизнин В. В.* ДАН СССР, 1986, т. 288, № 1, с. 105—107.

Поступило в Редакцию
15 марта 1988 г.