

## ОСОБАЯ РОЛЬ НАДБАРЬЕРНЫХ СОСТОЯНИЙ В КАРТИНЕ КАНАЛИРОВАНИЯ ЭЛЕКТРОНОВ В КРИСТАЛЛАХ

*Ю.Калан, Э.А.Бабахян, Ю.В.Копонец*

Показано, что существенная часть релятивистских электронов при каналировании распространяется по кристаллу, находясь в низколежащих надбарьерных состояниях и испытывая аномально слабое неупругое взаимодействие с ядрами и многократное рассеяние, а также малые энергетические потери.

1. Переход от каналирования положительно заряженных частиц в кристалле к каналированию электронов характеризуется не просто изменением знака потенциального рельефа (см. рис.1), а фактически "обращением" всей физической картины явления. Особенно ясно это видно на примере надбарьерных (НБ) состояний.

Действительно, для электронов, энергия поперечного движения которых лежит непосредственно над потенциальным барьером на рис.1, б, характерен быстрый пролет над ямами, расположенными вблизи ядер кристалла, и длительное "зависание" в областях между кристаллографическими плоскостями. Нетрудно понять, что благодаря этому будет

происходить резкое уменьшение (по сравнению с ситуацией в аморфной среде) вероятностей всех процессов взаимодействия с атомами, требующих малых прицельных параметров (в случае положительно заряженных частиц имеет место обратная картина – зависание над ядрами и быстрый пролет в областях между ними приводят к увеличению соответствующих сечений – см. [1]). Существенно, что в случае электронов заселенность НБ-состояний, как это следует из геометрии потенциального рельефа, будет велика даже при углах падения  $\theta$ , много меньших критического угла  $\theta_c$ .

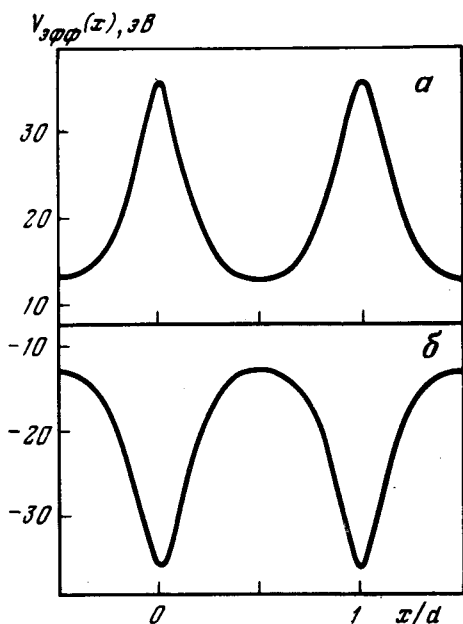


Рис.1. Эффективный периодический потенциал (в приближении Мольера) для  $\{110\}$ -плоскостного каналирования в кремнии при комнатной температуре: *а* – случай позитронов, *б* – случай электронов.

Наличие потенциальных ям вблизи ядер кристалла неизбежно предопределяет появление связанных уровней для поперечного движения частицы (точнее узких подбарьерных (ПБ) зон), количество которых определяется фактически величиной релятивистской массы электрона. Локализация соответствующих волновых функций вблизи ядер кристалла приводит к существенному увеличению сечений всех процессов, требующих "близких" столкновений, по крайней мере в случае  $s$ -состояний (см., например, [2] и цитируемую там литературу). Таким образом, возникает ситуация, во всех аспектах противоположная той, которая имеет место при каналировании положительно заряженных частиц.

После прохождения ограниченной толщины кристалла  $L_{coh}$ , на которой затухают недиагональные элементы матрицы плотности (см. подробнее [3, 4]), электронный пучок разбивается на две фракции – ПБ и НБ, и результирующая картина взаимодействия с кристаллом при  $\theta < \theta_c$  представляет собой суперпозицию двух совершенно разных картин, характерных для ПБ- и НБ-частиц. Для НБ-фракции будут подавлены рассеяние на большие углы, возбуждения атомных К-оболочек

и т.п., а также все неупругие процессы, приводящие к многократному рассеянию и потерям энергии. Фактически для этой фракции реализуется эффект каналирования в исходном смысле этого слова, и выражен он тем сильнее, чем больше энергия электронов. ПБ-фракция, наоборот, будет характеризоваться усилением интенсивности неупругих процессов, и в этом смысле эти частицы будут испытывать "антиканалирование".

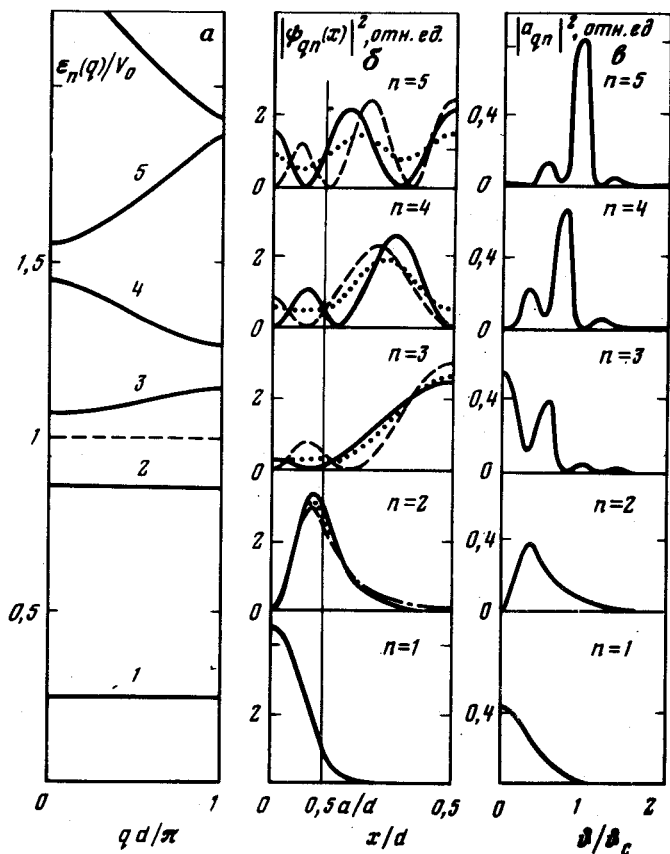


Рис.2. Плоскостное каналирование электронов в модели Кронига — Пенни с указанными в тексте параметрами: *a* — структура энергетических зон поперечного движения, *б* — зависимость  $|\psi_{qn}(x)|^2$  от *x* в разных зонах для ряда значений квазиимпульса *q* (—  $q = 0$ , .....  $q = \pi/2d$ , - - -  $q = \pi/d$ ; стрелками отмечены значения тепловых средних  $\langle |\psi_{qn}(x_{nuc})|^2 \rangle_T$  на ядрах кристалла), *в* — заселенность зон, как функция угла падения  $\theta$ .

2. С целью иллюстрации развитых выше представлений мы рассмотрели задачу плоскостного каналирования электронов с энергией  $E = 5$  МэВ в модели Кронига — Пенни [5] с параметрами, характерными для {110}-плоскостного канала в кремнии: глубина потенциала  $V_0 = 23$  эВ и период  $d = 1,92$  Å. Ширина  $a = 0,55$  Å ямы Кронига — Пенни бы-

ла выбрана из условия совпадения положения второй ПБ-зоны ( см. рис.2, а) с положением соответствующей зоны в мольтеровском потенциале  $\{110\}$ -плоскостей кремния.

На рис.2, б показано поведение  $|\psi_{qn}(x)|^2$  для первых пяти зон, а на рис.2, в – вероятности  $|a_{qn}|^2$  заселения этих зон в зависимости от угла  $\theta$  между импульсом  $p_0$  падающих электронов и плоскостью канала ( $q = p_0 \sin \theta$  – см. подробнее [1]): Из рисунков видно, что при  $\theta < \theta_c = (2E\tilde{V}_0)^{1/2}/c\rho_0$  волновая функция вблизи ядер кристалла в решающей степени формируется ПБ-зонами, тогда как НБ-зоны вносят определяющий вклад в плотность частиц в пространстве между ядрами. Суммарное относительное число частиц в НБ-состояниях при  $\theta = 0$  составляет 0,554.

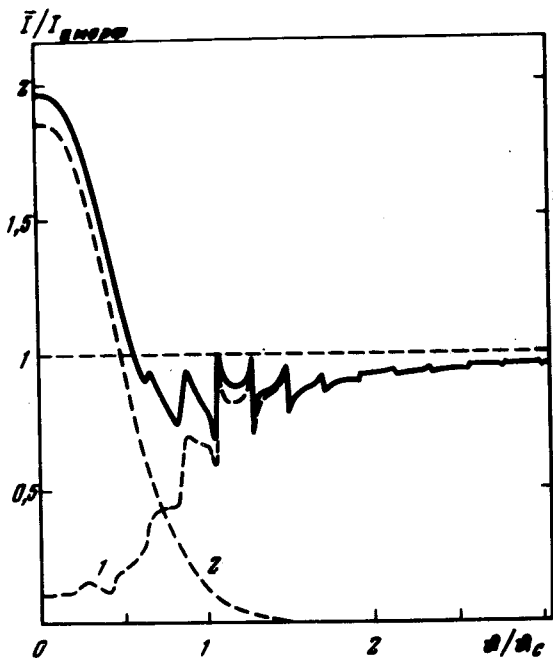


Рис.3. Интегральный по толщине выход неупругих процессов с малым прицельным параметром на ядрах кристалла при плоскостном каналировании электронов: 1 – вклад надбарьерных состояний, 2 – вклад подбарьерных состояний. Модель каналирования та же, что и в случае рис.2

На рис.3 представлена зависимость от  $\theta$  интегрального по толщине выхода неупругих процессов с малым прицельным параметром на ядрах кристалла (см. [1])

$$I/I_{amorph} = \sum_n |a_{qn}|^2 < |\psi_{qn}(x_{nucl})|^2 >_T,$$

где  $< \dots >_T$  означает усреднение по тепловым колебаниям (в нашем расчете  $\sqrt{u_1^2} = 0,077 \text{ \AA}$ ), суммирование производится по всем зонам поперечного движения. Приведенные результаты справедливы вплоть до заметных толщин  $L > L_{coh}$ , ограниченных сверху условием выбывания частиц из ПБ-состояний за счет неупругого рассеяния.

Проведенные расчеты полностью подтверждают высказанные выше соображения о картине каналирования электронов в кристаллах.

3. Сопоставимость заселенностей НБ- и ПБ-состояний при малых углах падения позволяет экспериментально выявить яркие различия в по-

ведении электронов обеих фракций в области толщин  $L > L_{coh}$ . Так, в угловом распределении частиц за кристаллом будут одновременно наблюдаться как повышенный выход рассеяния на большие углы (ПБ-фракция), так и аномально большое количество электронов, движущихся в узком интервале углов  $\Delta\theta \sim \theta_c$  вблизи направления падения и испытывающих слабое многократное рассеяние (НБ-фракция). Помимо этого низколежащие НБ-состояния должны характеризоваться существенно меньшими энергетическими потерями, чем в аморфной среде, тогда как для ПБ-состояний эти потери будут заметно большими. В случае осевого каналирования все эти эффекты могут быть выражены еще ярче.

Некоторые аспекты этой неожиданной картины аномального прохождения НБ-части электронов через кристаллы, по-видимому, наблюдались экспериментально в работах [6 — 9]. Однако в целом явление нуждается в детальном изучении. В этой связи особый интерес представляли бы экспериментальные исследования энергетических спектров электронов в условиях каналирования.

Сделаем в заключение одно замечание. Полученные результаты показывают, что антисимметричные ПБ-уровни практически не могут составить никакой конкуренции низколежащим НБ-состояниям в формировании слабо взаимодействующей фракции электронов (ср. [8]). Действительно, взаимодействие с ядрами кристалла для частиц на этих уровнях если и ослабляется, то весьма незначительно (важную роль при этом играют тепловые колебания атомов — см. рис. 2, б, где отмечены величины  $\langle |\psi_{qn}(x_{nuc})|^2 \rangle_T$ ); взаимодействие же с электронной подсистемой кристалла для таких уровней только усиливается из-за увеличения вероятности нахождения частиц в областях локализации атомных оболочек.

Институт атомной энергии  
им. И.В.Курчатова

Поступила в редакцию  
3 апреля 1980 г.

Ереванский физический институт

### Литература

- [1] Ю.Каган, Ю.В.Кононец. ЖЭТФ, 58, 226, 1970.
- [2] В.В.Каплин, С.А.Воробьев. ЖЭТФ, 73, 583, 1977.
- [3] Ю.Каган, Ю.В.Кононец. ЖЭТФ, 64, 1042, 1973.
- [4] Yu.Kagan, Yu.V.Kononets, A.A.Mamontov. Phys. Lett., 72A, 247, 1979.
- [5] E.A.Babakhanyan, Yu.V.Kononets. Phys. Stat. Sol., 98B, 59, 1980.
- [6] Е.А.Кулешов, Э.Т.Шипатов. ФТТ, 15, 1945, 1973.
- [7] V.V.Kaplin, S.V.Plotnikov, I.A. Tshekhanovskiy, S.A. Vorobiev. Phys. Lett., 54A, 447, 1975.
- [8] D.E.Popov, V.V.Kaplin, S.A.Vorobiev. Phys. Stat. Sol., 96B, 263, 1979.
- [9] С.А.Воробьев, В.В.Каплин, Д.Е.Попов, О.Г.Костарева. Письма в ЖЭТФ, 31, 359, 1980.