

УДК 539.186

## ОСОБЕННОСТИ ЗАСЕЛЕННОСТЕЙ КВАНТОВЫХ СОСТОЯНИЙ ПРИ ПЛОСКОСТНОМ КАНАЛИРОВАНИИ ЭЛЕКТРОНОВ И ПОЗИТРОНОВ В КРИСТАЛЛЕ Si

© 2008 г. К. Б. Коротченко

*Томский политехнический университет, Томск, Россия*

Поступила в редакцию 28.02.2008 г.

Показано, что учет зонной структуры энергетических уровней поперечного движения электронов и позитронов при плоскостном каналировании приводит к качественному изменению картины начальных заселенностей. Более того, схема заселенностей соседних энергетических зон заметно отличается от привычной схемы для изолированной потенциальной ямы, для которой заселенности всех четных зон (номер основного состояния принят за единицу) равны нулю. Расчеты проведены для плоскостей каналирования (110) и (111) кристалла Si при  $\gamma = 20, 25, 35, 50, 75$  и  $100$ . Исследована зависимость заселенности от угла падения частиц на плоскость каналирования.

Как мы уже отмечали в [1], в периодическом потенциале волновая функция  $\varphi_i(k_i, y)$  и энергия  $E_i(k_i)$  поперечного движения электрона являются, как известно [2], непрерывными функциями волнового вектора  $k_i$ . В силу непрерывности спектра  $E_i(k_i)$  энергетические подуровни внутри зоны должны быть двукратно вырождены и, соответственно, волновая функция  $\varphi_i(k_i, y)$  должна быть представлена в виде суммы четной и нечетной функций.

В рассматриваемой задаче, как и в [1], функции  $\varphi_i(k_i, y)$  определялись из уравнения Шредингера с релятивистской массой  $m^* = \gamma m_e$  и блоховскими граничными условиями. При вычислении плоскостного потенциала  $U(y)$  использовалась аппроксимация атомного формфактора из [3]. В качестве примера на рис. 1 представлены результаты вычислений для электронов и позитронов с  $\gamma = 20$ , каналированных в плоскостях (110) и (111) Si. Там же для сравнения показан вид потенциальных функций для различных плоскостей каналирования.

Начальная заселенность подуровня с волновым вектором  $k_i$  зоны  $i$  электронами (позитронами) с волновым вектором  $k_0$ , по определению [4], равна:

$$P_i(k_i, k_0) = \left| \int_{-d/2}^{d/2} \varphi^*(k_0, y) \varphi_i(k_i, y) dy \right|^2. \quad (1)$$

Начальные заселенности  $P_i(k_i, 0)$ , рассчитанные по волновым функциям  $\varphi_i(k_i, y)$  для электронов и позитронов с  $\gamma = 35$  показаны на рис.2. Результаты, представленные на этом рисунке, рассчитаны для частиц, влетающих параллельно плоскостям каналирования (110) и (111) кристалла Si (т.е. с волновым вектором  $k_0 = 0$ ) и подуровней с волновыми векторами  $k_i \in (0, |\mathbf{g}|/2)$ , где  $\mathbf{g}$  – вектор

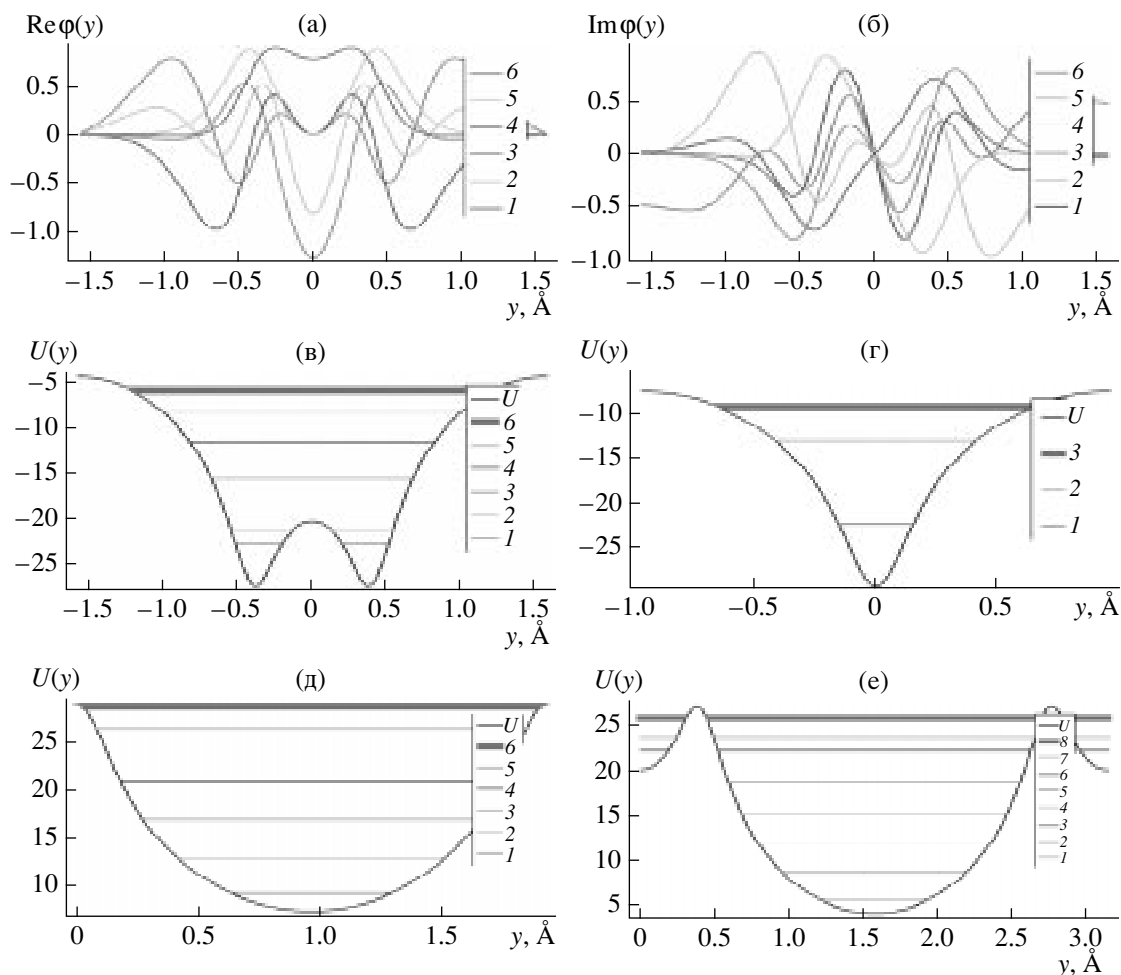
обратной решетки, для всех подбарьерных зон. Начальные заселенности без учета непрерывности спектра  $E_i(k_i)$  в плоскостном канале (110) кристалла Si для электронов можно найти в [4].

Для сравнения на рис. 3 приведены зависимости средних (по зоне) начальных заселенностей  $P_i(k_0) = \langle P_i(k_i, k_0) \rangle_{k_i}$  от угла падения  $\theta_0 = k_0/p$  на плоскости каналирования (110) и (111) кристалла Si для электронов и позитронов с  $\gamma = 20$ . Аналогичные результаты, но без учета непрерывности спектра  $E_i(k_i)$ , для начальных заселенностей Si (110) для электронов можно найти в [4].

Из рисунков 1, 2 и 3 хорошо видно, что: 1) заселенности сильно меняются как от зоны к зоне, так и в пределах каждой зоны (ширина зон на рис. 2 условно изображена одинаковой); 2) заселенности не равны нулю ни для одной зоны и, более того, схема заселенностей соседних энергетических зон резко отличается от привычной схемы для изолированной потенциальной ямы, для которой заселенности всех четных зон (номер основного состояния принят за единицу) равны нулю; 3) средняя начальная заселенность отдельных уровней для позитронов имеет значения, близкие (и даже большие) к ее максимальным значениям при  $\theta_0 = 0$ , для углов падения позитронов на плоскость каналирования вплоть до критического угла каналирования  $\theta_0 = \theta_L$ .

Результаты были проверены серией расчетов для плоскостей каналирования (110) и (111) кристалла Si при значениях энергии электронов (позитронов), соответствующих  $\gamma = 18, 20, 25, 35, 50, 75$  и  $100$ .

Такие свойства заселенностей приводят к необходимости учета зонной структуры и при рас-



**Рис. 1.** Действительная  $\text{Re}\varphi(y)$  (а) и мнимая  $\text{Im}\varphi(y)$  (б) части волновой функции электронов с  $\gamma = 20$  для потенциала  $U(y)$  (в) плоскости (111) Si; цифры 1...6 нумеруют подбарьерные зоны. Для сравнения показан вид потенциальных функций для различных плоскостей каналирования: г – Si (110), электроны; д – Si (110), позитроны; е – Si (111), позитроны.

четах матричных элементов для подбарьерных переходов

$$y_{if}(k_i, k_0) = \int_{-d/2}^{d/2} \varphi_f^*(k_f, y) y \varphi_i(k_i, y) dy \quad (2)$$

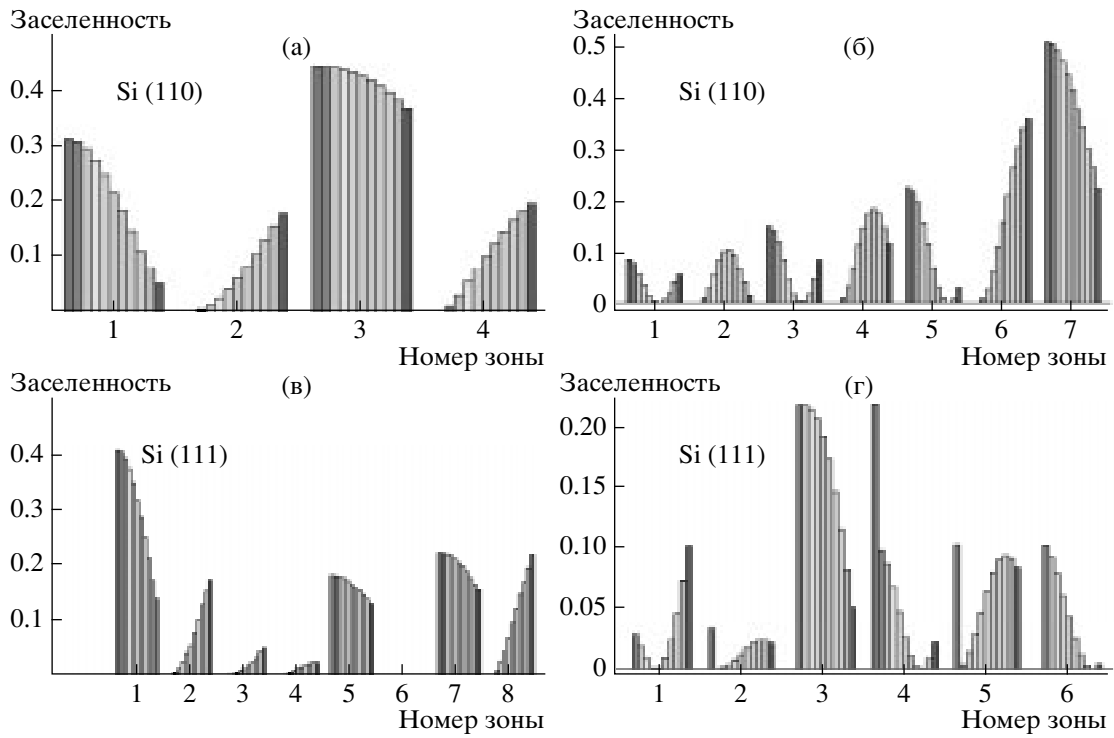
(здесь  $d$  – межплоскостное расстояние). При этом естественно ожидать существенного изменения представления о разрешенных переходах (по сравнению с изолированной ямой). Численное исследование, проведенное для той же серии, позволяет утверждать, что в дипольном приближении запрещенных подбарьерных переходов нет, т.е. матричные элементы  $|y_{ij}(k_i, k_j)| \neq 0$  для любых  $i \neq j$ .

В качестве примера, на рис. 4 представлены результаты вычислений матричных элементов для электронов и позитронов с  $\gamma = 35$ , каналированных в плоскости (111) Si. При расчетах, например, суммарного параметрического излучения под углом Брэгга при каналировании (PXRC), т.е. излучения от всех электронов, падающих под углом  $\theta_0 = k_0/p$

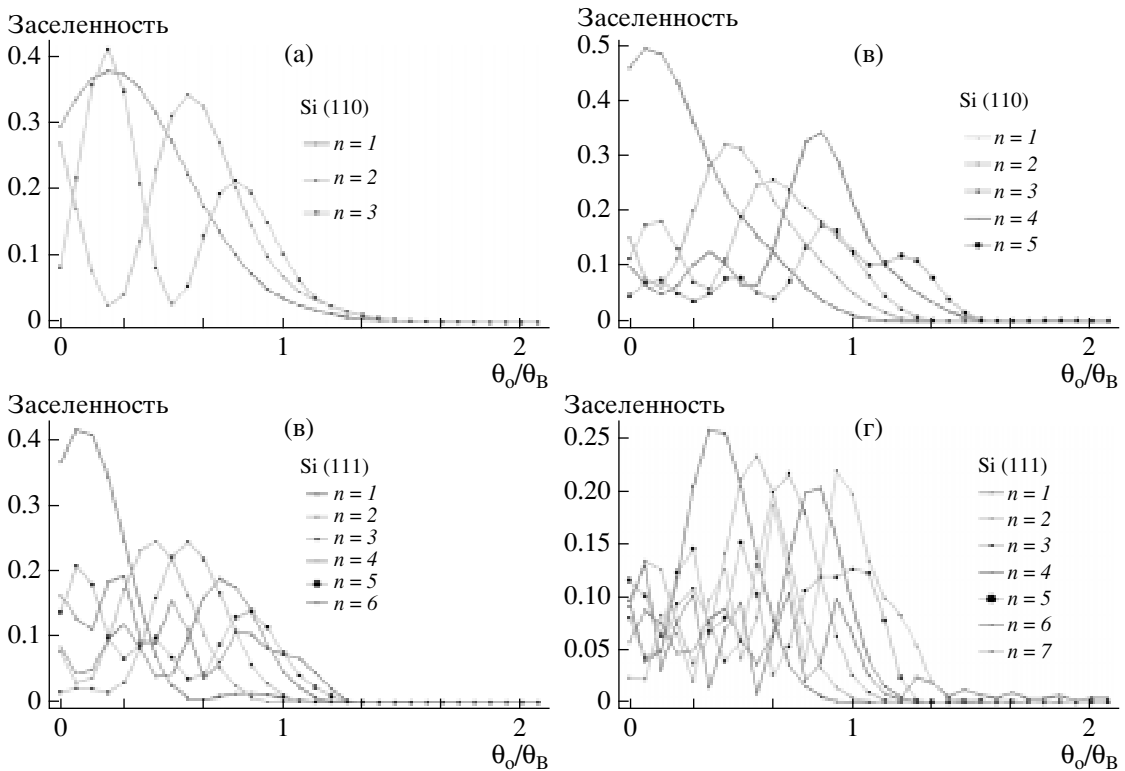
на плоскость каналирования, нужно учитывать, что вклад в PXRC могут дать только те из каналированных электронов, которые не были захвачены на подбарьерные уровни. Соответственно, прежде чем использовать предлагаемый метод для расчетов PXRC, необходимо убедиться, что суммарная заселенность всех зон (подбарьерных и надбарьерных) действительно равна единице.

Проблема связана с тем, что волновую функцию  $\varphi(k_0, y)$  свободного электрона, входящую в определение начальной заселенности, невозможно однозначно нормировать. Поэтому при любых конкретных расчетах, приходится подбирать амплитуду этой волновой функции из дополнительных физических условий. В нашем случае таким условием может выступать именно требование равенства единице суммарной заселенности всех зон.

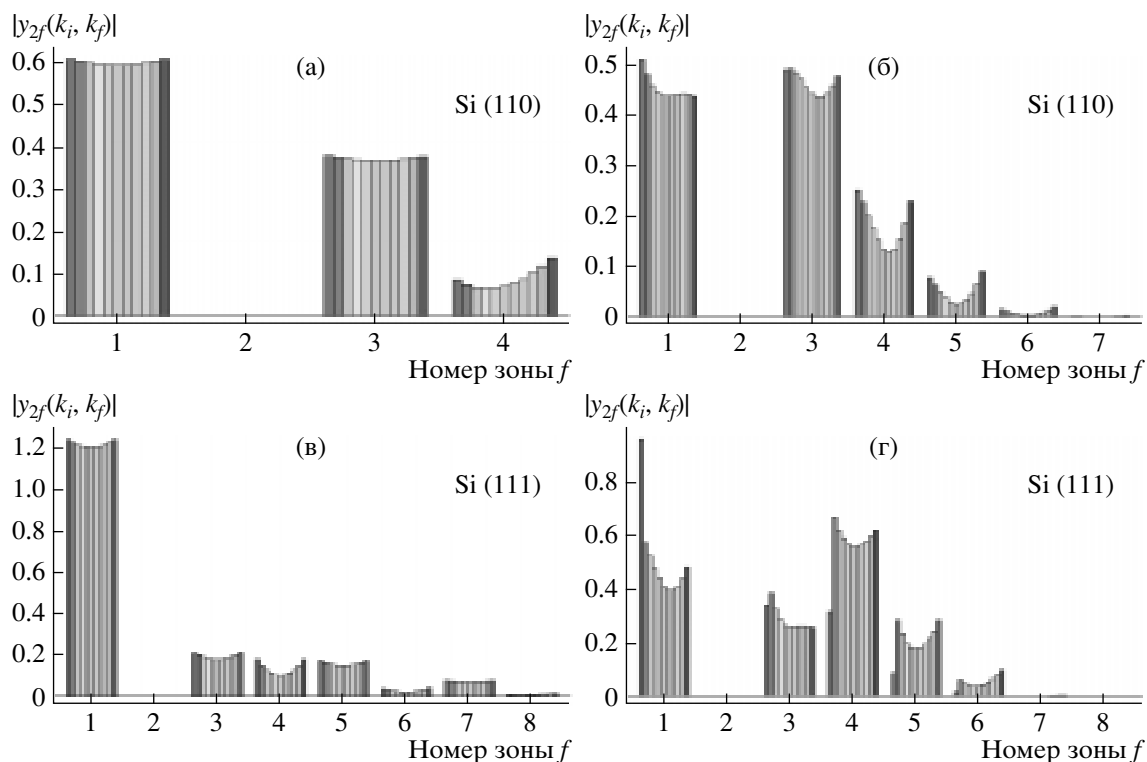
Гистограмма на рис. 5 однозначно подтверждает справедливость предлагаемой модели. Здесь приведены результаты расчета начальных заселенностей первых 26 зон для электронов с  $\gamma = 100$ ,



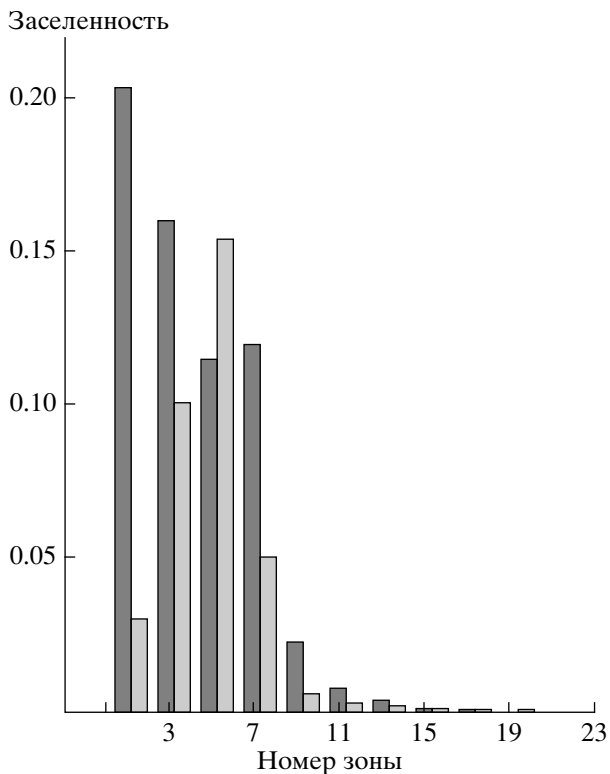
**Рис. 2.** Начальные заселенности подбарьерных зон электронами (а, в) и позитронами (б, г) с  $\gamma = 35$ , движущимися параллельно ( $\theta_0 = 0$ ) плоскостям (110) и (111) Si.



**Рис. 3.** Зависимость средних (по зоне) начальных заселенностей  $P_i(k_0) = \langle P_i(k_i, k_0) \rangle_{k_i}$  от угла падения  $\theta_0 = k_0/p$  на плоскости каналирования (110) и (111) кристалла Si для электронов (а, в) и позитронов (б, г) с  $\gamma = 20$ ;  $\theta_L$  – критический угол каналирования.



**Рис. 4.** Матричные элементы  $|y_{ij}(k_i, k_p)|$  для подбарьерной зоны с номером 2 электронов (а, в) и позитронов (б, г) с  $\gamma = 35$ , каналированных в плоскостях (110) и (111) Si.



**Рис. 5.** Начальные заселенности первых 26 зон (подбарьерные зоны – 1...7) для электронов с  $\gamma = 100$ , каналированных в плоскости (110) Si (угол влета  $\theta_0 = 0$ ).

движущихся параллельно плоскости (110) Si. Видно, что уже с уровня  $n = 17$  заселенности практически равны нулю. При этом, суммарная заселенность всех 26 зон равна  $\Sigma P_i = 0.986937$ .

Таким образом, наши результаты позволяют утверждать, что при расчетах и анализе спектров излучения каналированных электронов и позитронов в кристаллических структурах (при условии, что толщина кристалла меньше длины деканализации) необходимо учитывать зонную структуру всех уровней (т.е. не только надбарьерных). Пример такого подхода к описанию излучения при каналировании электронов (точнее, DCR – Diffracted Channeling Radiation для электронов) можно найти в [1].

Автор выражает глубокую признательность проф. Пивоварову Ю.Л. за плодотворные дискуссии.

#### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Богданов О.В., Коротченко К.Б., Пивоваров Ю.Л. // Письма в ЖЭТФ. 2007. Т. 85. Вып. 11. С. 684.
2. Ашкрофт Н., Мермин Н. Физика твердого тела. Т. 1. М.: Мир, 1979. 399 с.
3. Chouffani Kh., Thesis Ph.D., Washington D.C. 1995. 152 p.
4. Базылев В.А., Жеваго Н.К. Излучение быстрых частиц в веществе и во внешних полях. М.: Наука, 1987. 272 с.

## **Features of Quantum States Populations under Planar Channeling Electrons and Positrons in Si**

**К. В. Korotchenko**

The band structure of energy levels under planar channeling is shown to result in qualitative change of the initial populations for electrons and positrons. Moreover, the population scheme for neighboring energy bands differs significantly from ordinary one in the case of isolated potential well for which the populations of all even bands equal zero (the number of the ground state is 1). The calculations are carried out for Si (110) and (111) at  $\gamma = 20, 25, 35, 50, 75$  and 100. The dependence of different bands populations on the angle of incidence channeling plane is investigated.