

# Угловое распределение дифрагированного рентгеновского излучения при (111) каналировании электронов в Si: влияние зонной структуры энергетических уровней

О. В. Богданов, К. Б. Коротченко, Ю. Л. Пивоваров

Томский политехнический университет, 634050 Томск, Россия

Поступила в редакцию 12 апреля 2007 г.

Показано, что учет зонной структуры энергетических уровней каналированных электронов приводит к качественному изменению угловых распределений рентгеновского излучения под брэгговскими углами, что может быть полезным при экспериментальном обнаружении эффекта.

PACS: 41.60.–m, 61.85.+p, 78.70.–g

1. Параметрическое рентгеновское излучение (PXR) релятивистских электронов при каналировании обсуждалось в [1–3] в рамках кинематической теории.

Позже, в динамической модели, была предложена более детальная теория [4], позволившая получить формулы углового распределения вероятности излучения на единицу длины для надбарьерных (внутризонных) переходов, известного как PXRC (PXRC – это PXR при каналировании) и подбарьерных (межзонных) переходов, названного в [4] DCR (Diffracted Channeling Radiation).

Однако основным результатом [4] – предсказание узкого двойного пика DCR большой амплитуды (в 10 и более раз превосходящей амплитуду PXR) в центральной части PXR – был проверен только для одного значения энергии электронов ( $\gamma \simeq 20$ ) и без учета зонной структуры энергетических уровней в кристалле (в силу малой ширины подбарьерных уровней).

Цель данной работы:

- рассчитать угловое распределение DCR и PXRC вблизи брэгговского направления с учетом зонной структуры уровней;
- исследовать ориентационную зависимость (то есть зависимость от угла падения электронов  $\vartheta_o$ ) углового распределения DCR;
- проследить эволюцию максимумов интенсивности DCR в зависимости от энергии электронного пучка.

2. При плоскостном каналировании релятивистских частиц происходят спонтанные переходы между уровнями  $E_i(k_i)$  и  $E_f(k_f)$  поперечного движения (где  $k_i$  и  $k_f$  – волновые векторы электронов на уровнях  $i$  и  $f$ , соответственно). На рис.1 изображены гео-

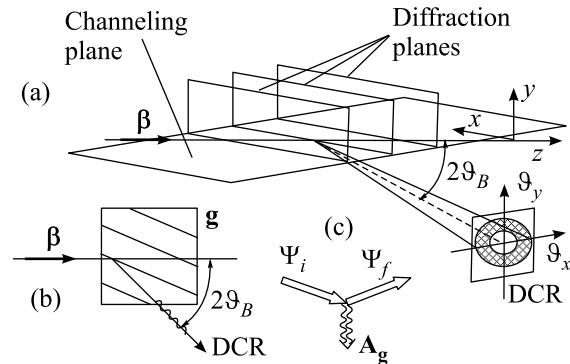


Рис.1. Формирование DCR: (a) схема наблюдения углового распределения DCR; (b) взаимное расположение вектора скорости электрона  $\mathbf{v} = \beta\mathbf{c}$  и направления вылета фотона DCR; (c) диаграмма DCR –  $\mathbf{A}_g$  волновая функция фотона

метрия эксперимента и диаграмма процесса DCR. На этом рисунке  $\Psi_i$  и  $\Psi_f$  – волновые функции электрона,  $\mathbf{A}_g$  – волновые функции фотона в приближении двухволновой дифракции.

Энергию излученного фотона можно записать в виде

$$\hbar\omega = \frac{\hbar\mathbf{g}\mathbf{v}_{||} + \Omega_{if}(k_i, k_f)}{1 - \beta_{||}^* \cos(2\vartheta_B)}, \quad (1)$$

где  $\Omega_{if}(k_i, k_f) = E_i(k_i) - E_f(k_f)$ ,  $\beta_{||}^* = v_{||}/c^*$ ,  $v_{||}$  – скорость частицы вдоль канала,  $c^* = c\sqrt{\epsilon_o}$ ,  $\epsilon_o$  – диэлектрическая постоянная,  $\vartheta_B$  – угол Брэгга,  $\mathbf{g}$  – вектор обратной решетки.

На основании этой модели, для углового распределения вероятности излучения на единицу длины для подбарьерных (межзонных) переходов, то есть DCR, по аналогии с [4] получим

$$\frac{d^3 N}{d\vartheta_x d\vartheta_y dz} = \frac{\alpha \omega_B^3 |y_{if}(k_i, k_f)|^2}{4\pi c^3 \sin^2 \vartheta_B} P_i(k_i, k_o) \times \left( \frac{\vartheta_x^2 \vartheta_y^2}{4(1+W_{\parallel}^2)} + \frac{(\vartheta_y^2 - \Omega_{if}(k_i, k_f)/\hbar\omega_B)^2}{4(1+W_{\perp}^2)} \right), \quad (2)$$

$$W_{\sigma} = \frac{1}{2|\chi_g|P_{\sigma}} \left( R - \frac{|\chi_g|^2 P_{\sigma}^2}{R} \right), \quad (3)$$

$$(\sigma = \parallel, \perp),$$

$$P_{\perp} = 1, P_{\parallel} = \cos(2\vartheta_B),$$

$$R = \left[ \vartheta_x - \frac{\Omega_{if}(k_i, k_f)}{\hbar\omega_B} \cos \vartheta_B \right]^2 + \vartheta_y^2 + \vartheta_{kin}^2 - 2 \frac{\Omega_{if}(k_i, k_f)}{\hbar\omega_B}, \quad (4)$$

$$\vartheta_{kin}^2 = \gamma^{-2} + |\chi_0|,$$

где  $\alpha$  – постоянная тонкой структуры,  $\omega_B = |\mathbf{g}|/2 \sin \vartheta_B$  – частота виртуальных фотонов, удовлетворяющих условиям дифракции Брэгга,  $\chi_0 = \epsilon_0 - 1$ ,  $\chi_g$  – фурье-компоненты диэлектрической восприимчивости  $y_{if}(k_i, k_f)$  – дипольные матричные элементы, рассчитанные с учетом зонной структуры энергетических уровней,

$$y_{if}(k_i, k_f) = \int_{-\frac{d}{2}}^{\frac{d}{2}} y \psi_f^*(k_f, y) \psi_i(k_i, y) dy \quad (5)$$

( $d$  – межплоскостное расстояние),  $P_i(k_i, k_o)$  – начальная заселенность подуровня с волновым вектором  $k_i$  зоны  $i$  электронами с волновым вектором  $k_o$ :

$$P_i(k_i, k_o) = \int_{-\frac{d}{2}}^{\frac{d}{2}} \psi^*(k_o, y) \psi_i(k_i, y) dy. \quad (6)$$

Формула (2) отличается от результата [4] именно тем, что мы учли начальные заселенности  $P_i(k_i, k_o)$  и зависимость от волнового вектора  $k_i$ .

**3.** В периодическом потенциале волновые функции  $\varphi_i(k_i, y)$  и энергии  $E_i(k_i)$  поперечного движения электронов являются, как известно (см., например, [5]), 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 представима в виде суммы четной и нечетной функций.

В рассматриваемой задаче 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 фактора из [6]. В качестве примера, на рис.2 представлены результаты вычислений для электронов с  $\gamma = 20$ , каналированных в плоскости Si (111).

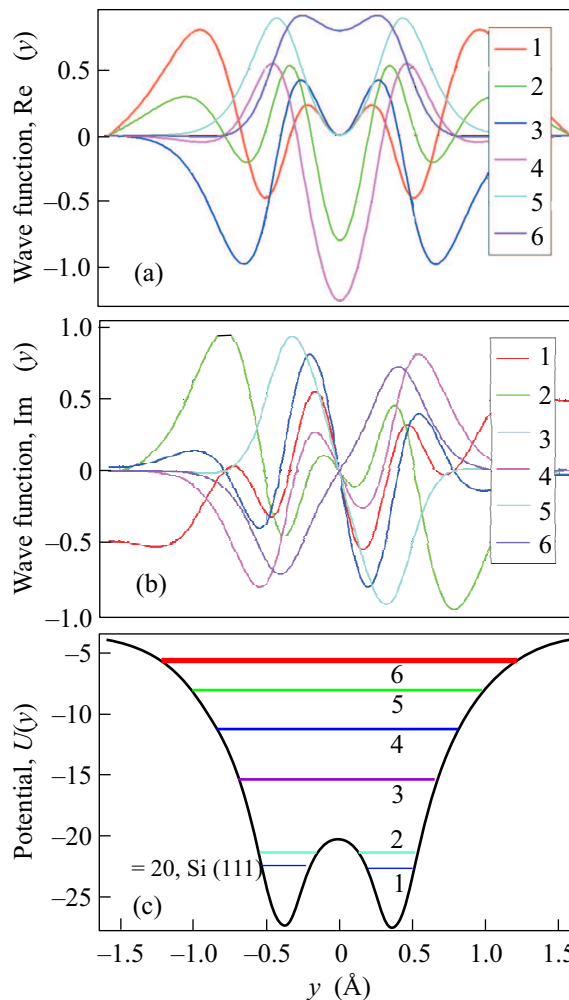


Рис.2. Действительная  $\text{Re} \psi(y)$  (a) и мнимая  $\text{Im} \psi(y)$  (b) части волновой функции электронов с  $\gamma = 20$  для потенциала  $U(y)$  (c) плоскости (111) Si; цифры 1...6 нумеруют подбарьерные зоны

Соответствующие начальные заселенности  $P_i(k_i, 0)$  – подуровней с волновыми векторами  $k_i \in (0, g/2)$  для всех зон  $i \in (1, 6)$  – электронами с волновым вектором  $k_o = 0$  (то есть для электронов, влетающих параллельно плоскости каналирования (111) кристалла Si), рассчитанные по волновым функциям  $\varphi_i(k_i, y)$ , показаны на рис.3 (сравни [7]).

Из этого рисунка хорошо видно, что:

- заселенности сильно меняются как от зоны к зоне, так и в пределах каждой зоны (ширина зон на рис.3 условно изображена одинаковой);
- 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 1) равны нулю.

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



Рис.3. Начальные заселенности подбарьерных зон электронами с  $\gamma = 20$ , движущимися параллельно ( $\vartheta_o = 0$ ) плоскости (111) Si

Такие свойства заселенностей приводят к необходимости учета зонной структуры и при расчетах матричных элементов  $y_{if}(k_i, k_f)$  для подбарьерных переходов. 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 – матричные элементы  $|y_{if}(k_i, k_f)| \neq 0$  для любых  $i \neq f$ .

В качестве примера на рис.4, представлены результаты вычислений матричных элементов для электронов с  $\gamma = 20$ , каналированных в плоскости Si (111).



Рис.4. Матричные элементы  $|y_{if}(k_i, k_f)|$  для подбарьерной зоны с номером 2 электронов с  $\gamma = 20$ , каналированных в плоскости (111) Si

4. При расчетах суммарного излучения под углом Брэгга  $I_B = d^3 N / d\vartheta_x d\vartheta_y dz$ , то есть излучения от всех электронов, падающих под углом  $\vartheta_o = \hbar k_o / p$  на плоскость каналирования, мы исходили из простого предположения, что вклад в DCR могут дать только те из каналированных электронов, которые были захвачены на подбарьерные уровни, – остальные электроны участвуют в создании PXR, то есть

$$I_{PXR}(k_o) = \left(1 - \sum_i \langle P_i(k_o) \rangle\right) I_{PXR}^o(k_o), \quad (7)$$

где символом  $\langle \dots \rangle$  обозначено:  $\langle F(k_i) \rangle = \int F(k_i) dk_i$  – среднее значение по зоне  $i$ ,  $I_{PXR}^o(k_o)$  – интенсивность PXR без учета DCR.

В качестве примера на рис.5 приведены результаты расчетов углового распределения DCR под углом

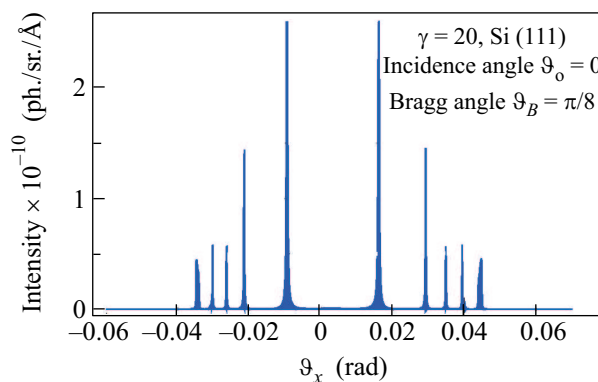


Рис.5. Зависимость углового распределения DCR от угла  $\vartheta_x$  (при  $\vartheta_y = 0$ ) для электронов с  $\gamma = 20$ , падающих на плоскость (111) Si под углом  $\vartheta_o = 0$ ; наблюдение ведется под углом  $2\vartheta_B = \pi/4$

$2\vartheta_B = \pi/4$  для электронов с  $\gamma = 20$ , падающих на плоскость (111) Si под углом  $\vartheta_o = 0$ , то есть зависимость от угла  $\vartheta_x$  при  $\vartheta_y = 0$ . Формально, на рис.5 присутствует и PXR, однако его амплитуда в 315 раз меньше.

На рис.6 представлен 3D фрагмент центрального максимума DCR с рис.5 – хорошо видна сложная двойная структура пика. Причем сам пик имеет кольцеобразную форму. Следует отметить, что все пики DCR, для всех условий серии, упомянутой выше, имеют структуру двойного пика кольцеобразной формы.

Отметим, что для электронов с  $\gamma = 20$ , каналированных в плоскости (110) Si, наши расчеты подтверждают результат, полученный в [4] для зависимости DCR от угла  $\vartheta_x$  при  $\vartheta_y = 0$  (наблюдение под углом  $2\vartheta_B = 32, 2^\circ$ ). Однако, при учете зонной структуры мы нашли, что каждый пик, полученный в [4], имеет

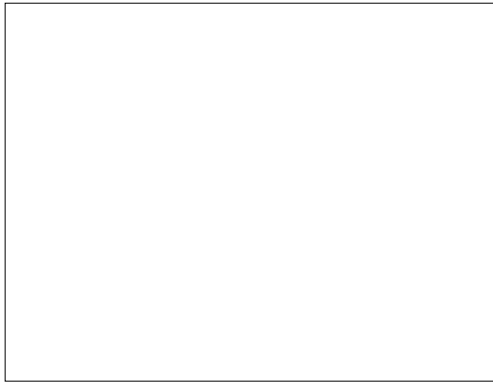


Рис.6. Фрагмент центрального кольца DCR с рис.5

двойную структуру (рис.7а) и есть еще два дополнительных пика, соответствующих переходу  $2 \rightarrow 0$

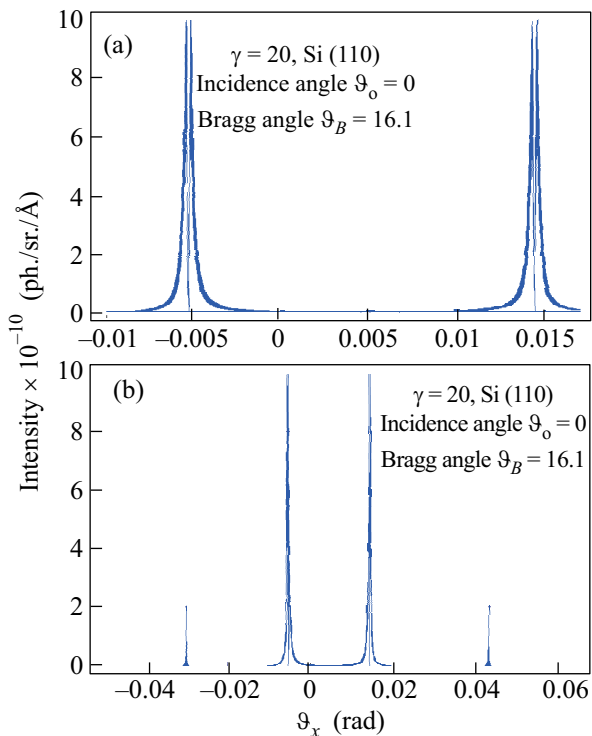


Рис.7. Зависимость углового распределения DCR от угла  $\vartheta_x$  (при  $\vartheta_y = 0$ ) для условий, описанных в [4]: (а) максимумы DCR, соответствующие, как и в [4], переходу  $1 \rightarrow 0$ ; (б) полная картина DCR

(рис.7б). Этот результат хорошо согласуется с особенностями матричных элементов (5) – см. рис.4.

Для сравнения, на рис.8 приведены результаты расчетов углового распределения DCR под углом  $2\vartheta_B = \pi/4$  для электронов с  $\gamma = 100$ , падающих на плоскость (111) Si под углом  $\vartheta_o = 0$ , то есть зависи-

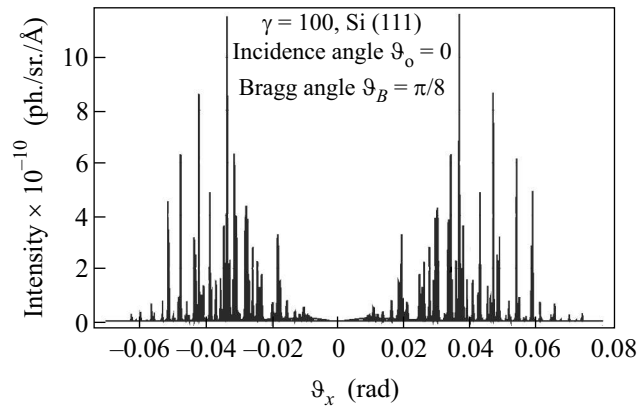


Рис.8. Зависимость углового распределения DCR от угла  $\vartheta_x$  (при  $\vartheta_y = 0$ ) для электронов с  $\gamma = 100$ , падающих на плоскость (111) Si под углом  $\vartheta_o = 0$ ; наблюдение ведется под углом  $2\vartheta_B = \pi/4$

мость от угла  $\vartheta_x$  при  $\vartheta_y = 0$ . На рис.8 присутствует и PXR, однако его амплитуда в 110 раз меньше.

Видно, что все пики DCR “сместились” (от центра) на значительно большие углы и амплитуда пиков возросла.

Зависимость картины излучения под брэгговскими углами от угла  $\vartheta_o$  падения электронов на плоскость каналирования демонстрирует рис.9 – при  $\vartheta_o = \vartheta_L$  ( $\vartheta_L$  – критический угол каналирования)

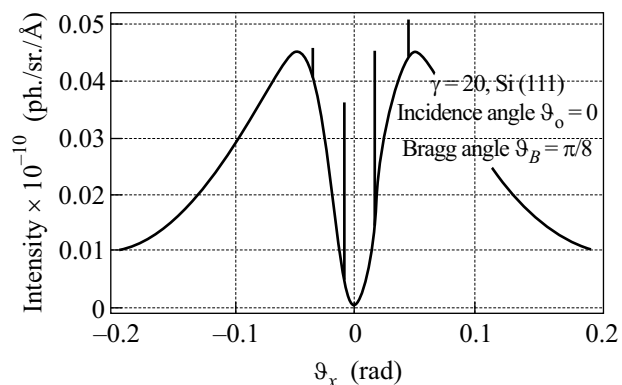


Рис.9. Зависимость углового распределения DCR от угла  $\vartheta_x$  (при  $\vartheta_y = 0$ ) для электронов с  $\gamma = 20$ , падающих на плоскость (111) Si под критическим углом каналирования  $\vartheta_o = \vartheta_L$ ; наблюдение ведется под углом  $2\vartheta_B = \pi/4$

DCR практически исчезает и остается только PXR.

5. В [4] была предложена формула для оценки нижнего порога энергии электронов, необходимой для возникновения DCR.

С учетом зонной структуры энергетических уровней эта формула примет вид

$$\gamma > \left( 2 \frac{\Omega_{if}(k_i, k_f)}{\hbar\omega_B} - |\chi_0| + |\chi_g| \right)^{-1/2}. \quad (8)$$

Для того чтобы проследить эволюцию амплитуды пиков DCR, мы провели расчеты для плоскостей каналирования (110) и (111) кристалла Si при энергиях электронов, соответствующих  $\gamma = 18, 20, 25, 35, 50, 75$  и 100. Результаты представлены на рис.10.



Рис.10. Зависимость амплитуды максимальных пиков DCR от  $\gamma$  для плоскостей каналирования (110) и (111) кристалла Si

Гистограмма на рис.10 однозначно подтверждает оценку  $\gamma = 20$ , полученную в [4] для порога DCR. При этом мы хотим отметить следующие особенности:

- при плоскостном каналировании в Si, пороговое значение  $\gamma$  для электронов, необходимое для возникновения DCR, практически не зависит от типа плоскости (110) или (111);
- амплитуда пиков DCR с ростом  $\gamma$  для электронов убывает по закономерности, близкой к экспоненциальной;
- для  $\gamma$ , меньшего порогового значения, DCR формально возможно, но не для всех переходов  $f \rightarrow i$ , и имеет амплитуду, сравнимую с амплитудой PXR.

6. Таким образом, наше исследование, дает основание утверждать, что с точки зрения теории, имеет право на существование достаточно необычный вид рентгеновского излучения при каналировании – DCR.

Соответственно, возникает вопрос: почему, несмотря на значительную амплитуду DCR, оно до сих пор не обнаружено?

Наши результаты позволяют сформулировать следующие условия, необходимые для регистрации DCR:

- угловое разрешение регистрирующей аппаратуры должно позволить обнаружить пики шириной  $\sim 0.8$  мрад. (см. рис.6);
- электронный пучок должен быть ориентирован под углом  $\vartheta_0$ , заметно меньшим критического угла каналирования  $\vartheta_L$  ( $\sim 1$  мрад. для  $\gamma = 100$ ), к плоскости каналирования;
- толщина кристалла меньше длины деканалирования.

1. V. G. Baryshevsky and I. Ya. Dubovskaya, J. Phys. C **16**, 3663 (1983).
2. T. Ikeda, Y. Matsuda, H. Nitta, and Y. H. Ohtsuki, Nuclear Instruments & Methods in Physics Research B **115**, 380 (1996).
3. Y. Matsuda, T. Ikeda, H. Nitta et al., Nuclear Instruments & Methods in Physics Research B **115**, 396 (1996).
4. R. Yabuki, H. Nitta, T. Ikeda, and Y. H. Ohtsuki, Physical Review B **63**, 174112 (2001).
5. Н. Ашкрофт, Н. Мермин, *Физика твердого тела*, М.: Мир, 1979.
6. Kh. Chouffani, Ph.D Thesis, Washington D.C. 1995.
7. В. А. Базылев, Н. К. Жеваго, *Излучение быстрых частиц в веществе и во внешних полях*, М.: Наука, 1987.