

АМПЛИТУДА ТЕПЛОВЫХ КОЛЕБАНИЙ АТОМОВ КРЕМНИЯ В ЭКСПЕРИМЕНТАХ ПО КАНАЛИРОВАНИЮ ЭЛЕКТРОНОВ

А.П. Лазарь

Институт физики твердого тела и полупроводников НАН Беларуси
ул. П. Бровки 17, Минск, 220072 Беларусь, e-mail: lazar@ifttp.bas-net.by

Проведен анализ спектров излучения релятивистских электронов при плоскостном каналировании в кремнии с целью уточнения среднеквадратичных амплитуд тепловых колебаний атомов в направлениях, перпендикулярных плоскостям {100} и {110}. При проведении расчетов учитывались расходимость и немонотонность падающего пучка, многократное рассеяние электронов в кристалле, конечная длина деканалирования частиц, поглощение фотонов, толщина и температура кристалла, спектральное разрешение детектора фотонов. Были получены амплитуды тепловых колебаний, обеспечивающие наилучшее согласие с экспериментом: 0.0782 Å для плоскости {100} и 0.0805 Å для плоскости {110}. Данные значения заметно расходятся со значением 0.075 Å, полученным в исследованиях с помощью дифракции рентгеновских лучей.

Введение

Дискретный спектр излучения каналированных частиц является весьма чувствительным к форме усредненного кристаллического потенциала. Анализ положений линий и их ширины позволяет получать информацию о кристаллическом потенциале, дебаевской температуре, распределении атомов по амплитудам тепловых колебаний, электронной плотности в кристаллах и т.д.

Ранее нами были получены аналитические выражения, аппроксимирующие плотность распределения электронов в атомах [1], что дает возможность с высокой точностью определить непрерывный осевой или плоскостной потенциал кристалла. В данной работе, с целью уточнения среднеквадратичных амплитуд тепловых колебаний атомов в направлениях, перпендикулярных плоскостям {100} и {110}, проведен анализ спектров излучения релятивистских электронов при плоскостном каналировании в кремнии.

Основная часть

В работе [2] было проведено систематическое исследование спектров излучения электронов с энергией 16.9–54.5 МэВ при плоскостном (100) и (110) каналировании в кремнии. Сравнение экспериментальных и расчетных спектров выявило завышение расчетных значений энергий переходов $1 \rightarrow 0$ и $3 \rightarrow 0$, выходящее за пределы погрешности измерения.

Среди возможных причин, приводящих к подобному результату, есть одна, лежащая в самом начале расчета — потенциал кристалла моделируется суммой потенциалов изолированных атомов без учета ковалентной связи атомов, образующих кристалл. Однако, в случае атомов кремния это обстоятельство не является существенным. Ковалентная связь в алмазе, имеющем такую же решетку, действительно служит заметной причиной сдвига линий для электронов, каналированных вдоль оси $\langle 110 \rangle$ и плоскости {111}; но геометрия зон такова, что сдвиг пренебрежительно мал для {100} и {110} плоскостей кристалла [3]. Более того, в сравнении с алмазом ($Z=6$) ковалентная связь в кремнии ($Z=14$) оказывает еще менее существенной в силу того, что доля электронов,

охваченная этой связью, гораздо меньше (4 из 14 против 4 из 6).

Еще одной причиной сдвига может являться не совсем точное значение используемой в расчетах среднеквадратичной амплитуды тепловых колебаний атомов u_1 . Согласно International Tables for Crystallography [4] для атомов кристаллического кремния при комнатной температуре $u_1=0.075$ Å. Данное значение получено из рентгеноструктурных исследований, использующих дифракцию рентгеновских лучей в кристаллах.

О характере влияния величины амплитуды тепловых колебаний атомов на непрерывный плоскостной потенциал можно судить из рисунка, где потенциал плоскости {110} кремния представлен при комнатной температуре ($u_1=0.075$ Å), абсолютном нуле ($u_1=0.049$ Å) и в статическом случае. Расстояние от плоскости дано в единицах межплоскостного расстояния.

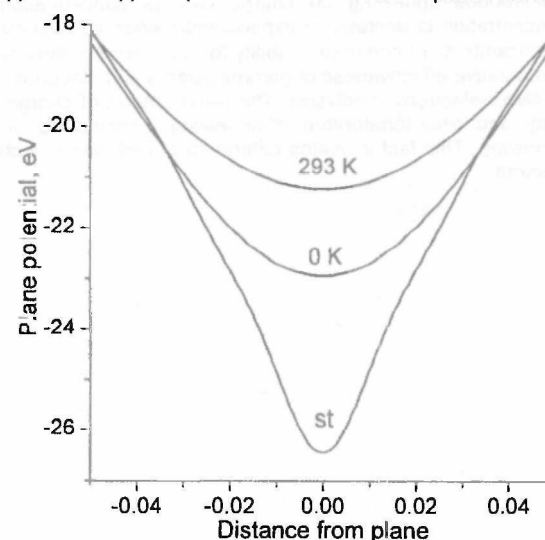


Рис. Непрерывный потенциал {110} плоскости кремния при комнатной температуре, абсолютном нуле и в статическом случае

В этом масштабе ($d_{\{110\}}=1.92$ Å) среднеквадратичной амплитуде тепловых колебаний атомов при $T=293$ K соответствует значение $u_1=0.039$, при $T=0$ K — $u_1=0.026$.

Видно, что основное различие потенциальных функций «теплых» решеток от статической проявляется в пределах соответствующей амплитуды тепловых колебаний. Отметим, что это как раз область преимущественной локализации электронов, находящихся при каналировании в основном состоянии, и энергии переходов на которое оказываются завышенными. За ее пределами ход функций практически одинаков. Данное обстоятельство позволяет попытаться найти (уточнить) те значения амплитуд тепловых колебаний, при которых наблюдается согласие между расчетом и анализируемыми экспериментальными данными.

Как известно, энергия линии в спектре излучения параметрически зависит от энергии электронов и температуры кристалла. С увеличением энергии каналированных частиц она увеличивается, а с увеличением температуры — уменьшается. Однако необходимо сразу уточнить, что процедура подгонки заключалась не в тривиальном нахождении значений этих величин для каждого конкретного случая энергии и плоскости кристалла, а в том, чтобы найденные значения единообразно описывали всю совокупность экспериментальных данных.

В таблице систематизированы результаты такого анализа вместе экспериментальными и расчетными результатами работы [2]. Расчет зонного спектра поперечной энергии каналированных электронов и волновых функций проводился в многопучковом приближении [3]. Ис-

пользовалось 75 волн. Непрерывный потенциал плоскости находился в соответствии с [5]. При проведении расчетов учитывались параметры падающего пучка (его расходимость и немонотонность), многократное рассеяние электронов в кристалле, конечная длина деканалирования частиц, поглощение излучения в образце, толщина и температура кристалла, спектральное разрешение детектора фотонов.

Из приведенных результатов следует, что удалось получить весьма хорошее соответствие между расчетными положениями линий и экспериментальными значениями. При этом средневзвешенная амплитуда тепловых колебаний атомов кремния в направлении, перпендикулярном плоскости {100}, составила 0.0782 ± 0.0004 Å. Для {110} плоскости — 0.0805 ± 0.0005 Å. Если сравнивать значения лоренц-факторов, варьировавшиеся независимо для двух плоскостей, то и здесь получено хорошее соответствие. К примеру, для электронов с энергией 30.5 МэВ в случае плоскости {100} $\gamma = 60.857$, а в случае плоскости {110} $\gamma = 60.865$. Номинальное значение энергии пучка электронов в эксперименте составляла $\gamma = 60.78 \pm 0.45$. В [2] расчетная величина лоренц-фактора для данной энергии в зависимости от плоскости и перехода менялась в пределах от 60.85 до 61.70.

Таблица

Среднеквадратичные амплитуды тепловых колебаний атомов кремния (расчет)

Плос- кость	$E_{кин},$ МэВ	$i \rightarrow f$	$E_{\gamma},$ кэВ			$u_1, \text{Å}$	
			Расчет [2]	Экспер. [2]	Данная работа	Расчет [2]	Данная работа
{100}	20.0	1→0	18.38	18.2±0.1	18.20	0.0818	0.0802
		2→1	19.43	19.55±0.2	19.55	0.0781	0.0778
	30.5	1→0	36.93	37.06±0.2	37.06		
		3→2	37.08	36.8±0.4	36.99		
		2→1	60.89	60.9±0.3	60.80	0.0788	0.0785
		1→0	95.69	95.7±0.4	95.71		
{110}	16.9	3→0	192.37	193.3±2.0	193.54		
		3→2	6.59	7.0±0.4	6.67	0.0841	0.0825
		2→1	10.72	10.7±0.1	10.75		
		1→0	19.07	18.9±0.1	18.92		
	20.0	3→0	36.71	36.5±0.2	36.41		
		3→2	9.12	9.2±0.2	9.19	0.0835	0.0804
		2→1	14.46	14.4±0.2	14.39		
		1→0	24.78	24.6±0.2	24.59		
	30.5	3→0	48.56	48.2±0.3	48.22		
		4→3	14.60	14.9±0.2	14.92	0.0808	0.0801
		3→2	21.05	21.1±0.2	20.98		
		2→1	31.17	31.1±0.2	31.04		
		1→0	48.21	48.4±0.3	48.36		
	30.5	4→1	67.47	66.8±0.5	67.06		
		3→0	100.70	100.2±0.8	100.49		

Если продолжить сравнение результатов подгонки, то следует отметить хорошее согласие найденных амплитуд колебаний атомов для плоскости {100} при энергиях 30.5 и 54.5 МэВ (в отличие от 20.0 МэВ). Значения практически совпадают. Это тем более примечательно, что для плоскости {110} ситуация заметно хуже — с уменьшением энергии электронов расхождение становится весьма значительным. Однако средневзвешенные значения по всему диапазону энергий, $u_{\{100\}}=0.0789\pm0.0007$ Å и $u_{\{110\}}=0.0813\pm0.0009$ Å, неплохо согласуются с нашими результатами. Тем не менее, во всех случаях наблюдается увеличение амплитуд с уменьшением энергии электронов, и описать всю совокупность данных для плоскости одним значением амплитуды не удастся. Вопрос о причине расхождения результатов для низких и высоких энергий остается.

Среднее значение амплитуд тепловых колебаний обеих плоскостей равно 0.0794 Å заметно отличается от значения 0.075 Å, полученного для кремния в дифракционных измерениях. Такое несоответствие не наблюдается в кристаллах со сходной кристаллической структурой, таких как алмаз, германий и арсенид галлия, и пока остается невыясненным. Однако есть обстоятельства, допускающие возможность несоответствия результатов этих двух методик. В то время как излучение при каналировании оказывается чувствительным к потенциалу кристалла, дифракция рентгеновских лучей чувствительна к распределению электронной плотности в кристалле. Потенциал, ощущаемый каналированной частицей, обусловлен как атомными электронами, так и атомными ядрами, а при рентгеновской дифракции вклад последних пренебрежительно мал (сечение рассеяния обратно пропорционально квадрату массы рассеивающего центра). Поэтому рентгеновские лучи могут нести

информацию только об электронных облаках, окружающих ядра, тогда как излучение при каналировании заключает в себе информацию и о ядрах.

Заключение

В работе проведен анализ спектров излучения релятивистских электронов при плоскостном каналировании в кремнии с целью уточнения среднеквадратичных амплитуд тепловых колебаний атомов в направлениях, перпендикулярных плоскостям {100} и {110}. При проведении расчетов учитывались расходимость и некогерентность падающего пучка, многократное рассеяние электронов в кристалле, конечная длина деканалирования частиц, поглощение фотонов, толщина и температура кристалла, спектральное разрешение детектора фотонов. Были получены амплитуды тепловых колебаний, обеспечивающие наилучшее согласие с экспериментом: 0.0782 Å для плоскости {100} и 0.0805 Å для плоскости {110}. Данные значения заметно расходятся со значением 0.075 Å, полученным в исследованиях с помощью дифракции рентгеновских лучей.

Работа выполнена при частичной финансовой поддержке БРФФИ (проект Ф00-122).

Список литературы

1. Коршунов Ф.П., Лазарь А.П. // ЯФ. — 2003. — Т. 66, №2. — С. 1.
2. Kephart J.O., Berman B.L., Pantell R.H. et al. // Phys. Rev. B. — 1991. — Vol. 44, No. 5. — P. 1992.
3. Klein R.K., Kephart J.O., Pantell R.H. et al. // Phys. Rev. B. — 1985. — Vol. 31, No. 1. — P. 68.
4. International Tables for Crystallography // Vol. C. — 1999. — Edited by Wilson A.J.C. and Prince E. — Dordrecht. — Kluwer Academic Publishers.
5. Коршунов Ф.П., Лазарь А.П. // Взаимодействие излучений с твердым телом: Материалы IV Международной конференции. — Мн., 2001. — С.31.

THERMAL-VIBRATIONAL AMPLITUDES OF SILICON ATOMS IN ELECTRON CHANNELING EXPERIMENTS

A.P. Lazar

Institute of Solid State and Semiconductor Physics, P. Brovki str. 17, Minsk, 220072 Belarus,
E-mail: lazar@iftp.bas-net.by, korshun@iftp.bas-net.by

An analysis of planar channeling radiation emitted by relativistic electrons from a silicon crystal has been carried out in order to determine the rms thermal-vibrational amplitudes of atoms in the directions perpendicular to {100} and {110} planes. Performing calculations the incident beam divergence and energy spread, multiple scattering of electrons in the crystal, finite occupation length of channeled particles, photon absorption, as well as thickness and temperature of the crystal and energy resolution of the photon detector were taken into account. The amplitudes of thermal vibrations providing the best fit of experimental results have been determined: 0.0782 Å for the {100} plane and 0.0805 Å for the {110} one. These values differ substantially from the value of 0.075 Å obtained from x-ray-diffraction measurements.