

Г Л А В А II

ВЛИЯНИЕ МНОГОКРАТНОГО РАССЕЯНИЯ НА ДВИЖЕНИЕ КАНАЛИРОВАННЫХ ЧАСТИЦ В ОБЛАСТИ БОЛЬШИХ ГЛУБИН ПРОНИКНОВЕНИЯ

2.6.1. СТАТИСТИЧЕСКОЕ (ТЕПЛОВОЕ) ОПИСАНИЕ ЭФЕКТА КАНАЛИРОВАНИЯ ЗАРЯЖЕННЫХ ЧАСТИЦ В КРИСТАЛЛАХ.

Из решения задачи о броуновском движении квантового осциллятора, которое было рассмотрено выше, следует, что релаксация потока каналированных частиц к состоянию статистического (теплового) квазиравновесия вызвана учетом процесса многократного рассеяния. Релаксация потока каналированных частиц к квазиравновесному состоянию происходит на глубине наступления статистического квазиравновесия, которая отделяет квантовую область описания эффекта от классической. Состояние статистического квазиравновесия потока каналированных частиц описывается классическим каноническим распределением Гиббса [85] с эффективной температурой $\beta^{-1} = M \Delta t = E \bar{\theta}^2 / 4$

$$g(p_1, r_1) = Z^{-1} \exp \left[- \beta H(p_1, r_1) \right], \quad (6.1)$$

где $H(p_1, r_1) = (p_1^2 / 2M) + U(r_1)$ — классический гамильтониан поперечной составляющей движения каналированных частиц в усредненном потенциале $U(r_1)$ системы кристаллографических осей или плоскостей; статистическая сумма Z определяется из условия нормировки функции (6.1).

Функция распределения (6.1) описывает эволюцию потока каналированных частиц в многомерном фазовом пространстве. В ряде

случаев, оказывается удобным рассматривать функцию распределения каналированных частиц по поперечным энергиям, которую построим известным образом [86]

$$g(E_{\perp}, e) = \int e^{-\beta H(P_{\perp}, r_{\perp})} \delta[E_{\perp} - H(P_{\perp}, r_{\perp})] dP_{\perp} dr_{\perp} = \Omega(E_{\perp}) \exp(-\beta E_{\perp}), \quad (6.2)$$

где $\Omega(E_{\perp}) = \iint_{H(P_{\perp}, r_{\perp}) = E_{\perp}} dP_{\perp} dr_{\perp}$ — об'ем области в

фазовом пространстве с энергией не превосходящей E_{\perp} .

Функция распределения (6.2) определяет плотность вероятности обнаружения каналированных частиц в пределах эквипотенциального слоя толщиной от E_{\perp} до $E_{\perp} + dE_{\perp}$. Модуль квазиравновесного распределения (6.2) составляет одну четверть среднего квадрата угла многократного рассеяния. На необходимость введения такого множителя указывалось в ряде работ по восстановлению профиля концентрации дефектов в кристаллах [40, 87-88].

Исходя из общих положений статистической механики следовало ожидать, что квазиравновесное распределение (6.1) может быть получено с помощью моделирования траекторий каналированных частиц. Действительно, Барретом и др. [46] было отмечено, что экспоненциальное распределение по поперечным кинетическим энергиям достаточно хорошо аппроксимирует результаты машинного моделирования [37]. Рассмотрим, также, два предельных случая функции распределения (6.1). Предположим, что вклад многократного рассеяния каналированных частиц пренебрежимо мал

($\beta^{-1} = 0$), тогда функция (6.1) переходит в изоканоническое распределение, на основе которого построена статистическая теория Липсхарда [1]. С другой, функция распределения (6.1) совпадает с решением диффузионного уравнения, лежащего в основе ряда теорий эффекта каналирования [27], когда исключается влияние непрерывного потенциала $U(r_1) = 0$. Таким образом, развитая теория включает в себя оба предельных случая описания эффекта каналирования частиц в кристаллах.

Состояние статистического квазиравновесия исключает возможность перераспределения потока каналированных частиц в зависимости от угла наклона кристалла. В этом случае, ориентационная зависимость выхода процессов, требующих близкого облучения, определяется вероятностью захвата частиц в реалы каналирования, которая была рассмотрена выше. При плоскостном каналировании положительно заряженных частиц зависимость функции распределения по поперечным энергиям от угла наклона кристалла запишется в виде

$$g(\vartheta, E_{\perp}, e) = g(E_{\perp}, e) \exp \left[-\vartheta^2 / 2 (\Delta^2 + \vartheta_a^2) \right], \quad (6.3)$$

где вероятность захвата частиц в реалы каналирования вычислена в приближении (2.14). Ориентационная зависимость для случая осевого каналирования положительно заряженных частиц может быть рассмотрена аналогичным образом.

2.7.1. КВАЗИРАВНОВЕСНОЕ РАСПРЕДЕЛЕНИЕ ПОТОКА КАНАЛИРОВАННЫХ ЧАСТИЦ.

Введем в рассмотрение относительный поток каналированных

частиц в пространстве поперечных энергий

$$\gamma(E_{\perp}, \rho) = g(E_{\perp}, \rho) dE_{\perp} / V_s^{-1} dE_{\perp}, \quad (7.1)$$

где $V_s^{-1} dE_{\perp}$ - распределение по поперечной энергии хаотического пучка заряженных частиц, которые пересекают кристалл вдоль от выделенного кристаллографического направления.

Относительный поток (7.1) определяет, фактически, динамическое отношение числа частиц каналированного и хаотического пучка в зависимости от глубины проникновения и поперечной энергии. В приближении гармонического потенциала осевого канала относительный поток (7.1) запишем в виде

$$\gamma(\varepsilon_{\perp}, \varepsilon_D) = \frac{\varepsilon_{\perp}}{\varepsilon_D^2} \exp\left(-\frac{\varepsilon_{\perp}}{\varepsilon_D}\right), \quad (7.2)$$

где $\varepsilon_{\perp} = E_{\perp} / V_s$ и $\varepsilon_D = M \Delta t / V_s$ - значения приведенной поперечной и тепловой энергии.

В случае равномерно распределенных рассеивающих центров значение приведенной тепловой энергии имеет вид

$$\varepsilon_D = \ell / \ell_1 \quad (7.3)$$

где ℓ_1 - длина деканализации, которая определяется из равенства $\varepsilon_D = 1$. Большая часть каналированных частиц движется в центральной части осевого канала (см. рис. 7), потенциал которой хорошо аппроксимирует параболой.

Первый и второй моменты распределения (7.2) возрастают

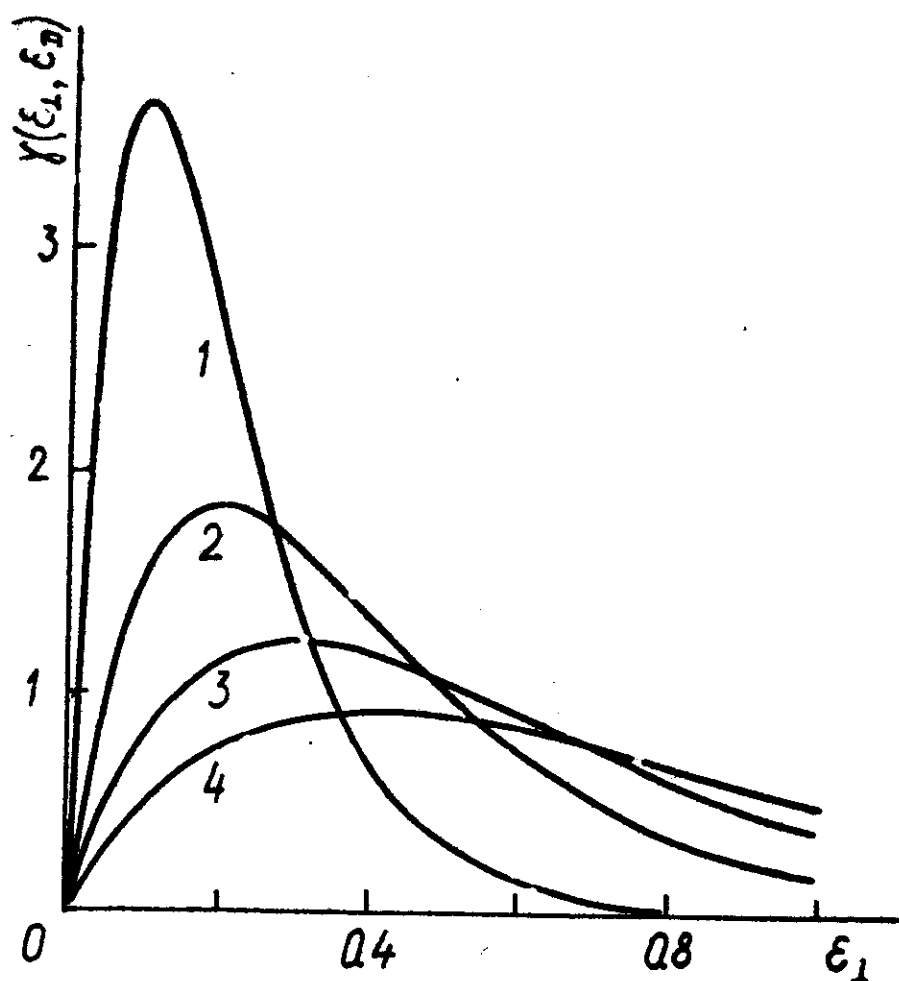


Рис. 7. Увеличение глубины проникновения $\varepsilon_D = l/l_s =$
 $0.1 - 1; 0.2 - 2; 0.3 - 3; 0.4 - 4$ приводит к "рас-
 плыванию" и "смещению" относительно потока (7.2)
 в область больших значений приведенной поперечной
 энергии $\varepsilon_1 = E_1 / V_{Rs}$.

прямо пропорционально значению приведенной тепловой энергии

$$\bar{\varepsilon}_\perp = (\bar{\varepsilon}_\perp^2)^{1/2} = \varepsilon_D$$

Таким образом, увеличение глубины проникновения $\varepsilon_D = e / e_1$, приводит к "расплыванию" и "смещению" функции распределения каналированных частиц по поперечной энергии. Покажем, что использование иной аппроксимации непрерывного потенциала не приводит к качественному изменению характера эволюции относительного потока каналированных частиц. Вычислим относительный поток $f(\varepsilon_\perp, \varepsilon_D)$ для случая аппроксимации потенциала непрерывной цепочки в приближении Линдхарда [89]

$$f(\varepsilon_\perp, \varepsilon_D) = \frac{e^{-\varepsilon_\perp / \varepsilon_D}}{Z(\varepsilon_\perp^{\min}, \varepsilon_D)} \cdot \frac{\left(1 + \frac{3a^2}{u_i^2}\right)^{\varepsilon_\perp} - \left(1 + \frac{3a^2}{u_i^2}\right)^{\varepsilon_\perp^{\min}}}{\left(1 + \frac{3a^2}{u_i^2}\right)^{\varepsilon_\perp} - 1},$$

(7.4)

где постоянная $Z(\varepsilon_\perp^{\min}, \varepsilon_D)$ определяется из условия нормировки $f(\varepsilon_\perp, \varepsilon_D)$ на единицу; $\varepsilon_\perp^{\min} = E_\perp^{\min} / \bar{V}_{RS}$; значение $E_\perp^{\min} = \frac{V_s}{2} \ln \left[1 + 3a^2 / (k_0^2 + u_i^2) \right]$ зависит от радиуса обрезания $k_0^2 = 1/\pi N d^2$ потенциала Линдхарда. Можно легко видеть, что относительный поток (7.4) изменяется с ростом глубины проникновения каналированных частиц аналогично распределению (7.2).

Рассмотрим случай плоскостного каналирования. В приближении параболического потенциала плоскостного канала относительный поток (7.1) запишем в виде

$$f(\varepsilon_{\perp}, \varepsilon_D) = \frac{1}{\varepsilon_D} \exp(-\varepsilon_{\perp} / \varepsilon_D) \quad (7.5)$$

Первый момент распределения (7.5) равен нулю, в то время как второй возрастает прямо пропорционально значению приведенной тепловой энергии. Следует обратить внимание на качественное отличие распределений по поперечной энергии канализованных частиц в осевом и плоскостном случае, которое, очевидно, должно обнаружиться себя в спектре излучения релятивистских частиц.

2.8.1. УНИВЕРСАЛЬНАЯ ФУНКЦИЯ ДЕКАНАЛИЗОВАНИЯ ЗАРЯЖЕННЫХ ЧАСТИЦ В КРИСТАЛЛАХ.

Как было показано нами выше, плотность потока канализованных частиц в области больших глубин проникновения ($t > T_R$) является универсальной функцией эффективной температуры, т.е. сохраняет свой вид в сложном потенциальном рельефе систем кристаллографических осей или плоскостей. Движение канализованных частиц происходит в пределах конечного фазового объема, ограниченного поверхностью постоянной энергии равной максимальному значению потенциала изолированной атомной цепочки или плоскости. Рассмотрим вероятность обнаружения канализованных частиц в пределах конечного фазового объема

$$g_{ch.}(e) = \int_0^{V_s} g(E_{\perp}, e) dE_{\perp}, \quad (8.1)$$

которая связана с функцией деканализованности $\chi(e)$ соотношением

$$\chi(e) = 1 - g_{ch}(e)$$

(8.2)

Из определения $g(E_1, e)$ следует, что глубина проникновения e может быть выражена через безразмерное отношение $\varepsilon_D = e/e_1$, которое не зависит от вида аппроксимации непрерывного потенциала атомного ряда или плоскости. Таким образом, нормированные выходы деканализированных частот должны лежать на универсальной кривой (8.2) при переходе к масштабу глубин проникновения, выраженному в $\varepsilon_D \sim E \bar{\sigma}^2 / 4 V_s$, как это наблюдалось в эксперименте [9] (см. рис. 8).

Сложный потенциальный рельеф системы кристаллографических осей или плоскостей затрудняет точное вычисление функции деканализирования. В гармоническом приближении, которое было рассмотрено выше, функция деканализирования для осевого и плоскостного случая имеет вид

$$\chi_R(e) = \left(1 + 1/\varepsilon_D\right) \exp(-1/\varepsilon_D) \quad (8.3a)$$

$$\chi_P(e) = \exp(-1/\varepsilon_D) \quad (8.3b)$$

Функции деканализирования (8.3a) и (8.3b) являются монотонно возрастающими функциями приведенной тепловой энергии.

Найдем точку перегиба функции (8.3a) и (8.3b)

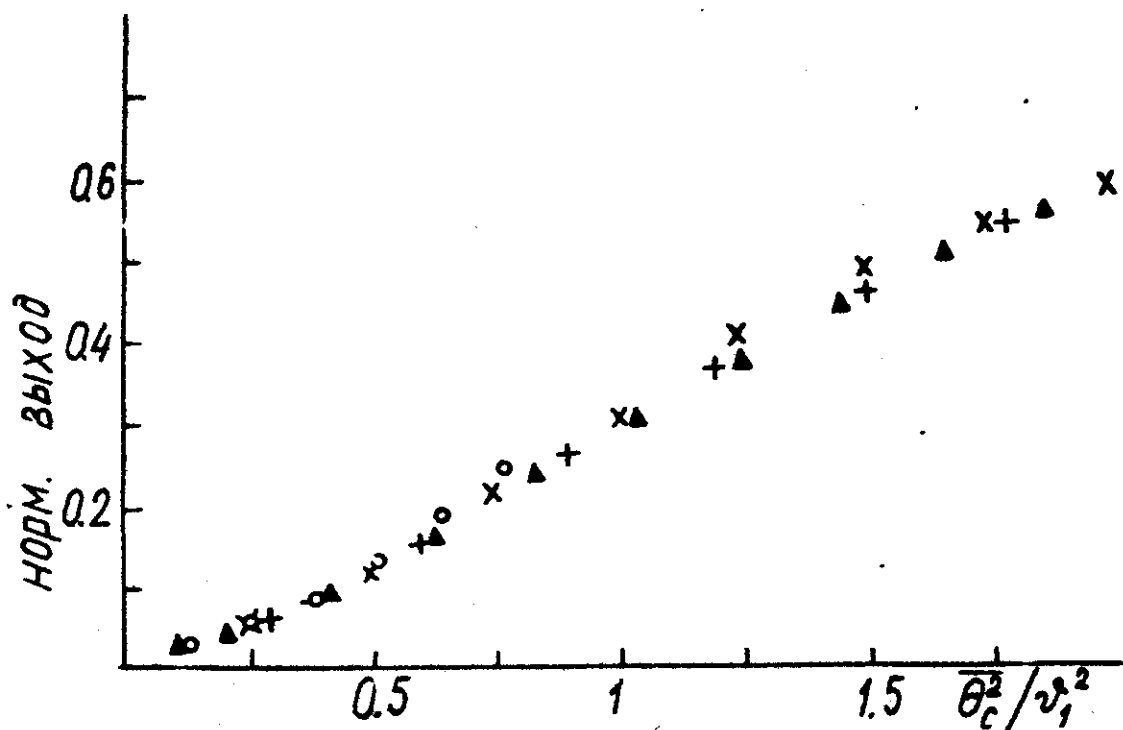


Рис. 8. Нормированные выходы протонов, каналированных в $\langle 110 \rangle$ осевом канале алмаза, лежат на универсальной кривой вне зависимости от их начальной энергии [90]: \circ - 1 МэВ; Δ - 4,5 МэВ; $+$ - 7 МэВ; \times - 8,9 МэВ.

$$\left. \frac{d^2 \chi(\varepsilon_D)}{d\varepsilon_D^2} \right|_{\varepsilon_D = \varepsilon_0} = 0 \quad (8.4)$$

где $\varepsilon_R^0 = (1/3)$ и $\varepsilon_P^0 = 0,5$ — значения приведенной тепловой энергии в точке перегиба. Соответствующие значения функции доканализирования равны $\chi_R^0 = (4/e^3) \approx 0.2$ и $\chi_P^0 = e^{-2} \approx 0.135$.

На рис. 9. приведены значения нормированного выхода протонов $E = 1 \text{ МэВ}$, канализованных в направлении оси $\langle 110 \rangle$ монокристалла германия $[91]$. С помощью функции доканализирования (8.3а) значения нормированного выхода преобразованы к значениям приведенной тепловой энергии, которая возрастает прямо пропорционально глубине проникновения канализованных протонов. На рис. 9. отмечены значения точки перегиба функции доканализирования, вычисленные по формуле (8.4), которые находятся в хорошем согласии с данными эксперимента.

2.9.1. КВАЗИРАВНОВЕСНОЕ УГЛОВОЕ РАСПРЕДЕЛЕНИЕ

КАНАЛИРОВАННЫХ ЧАСТИЦ.

Рассмотрим угловое распределение частиц, вылетающих из кристалла, толщина которого больше длины наступления статистического квазиравновесия. Это распределение описывается азимутально симметричным распределением Максвелла с нулевым средним при любом значении угла разориентации, т.е. угла между направлением кристаллографическим направлением и направлением ионизации вылетающих частиц.

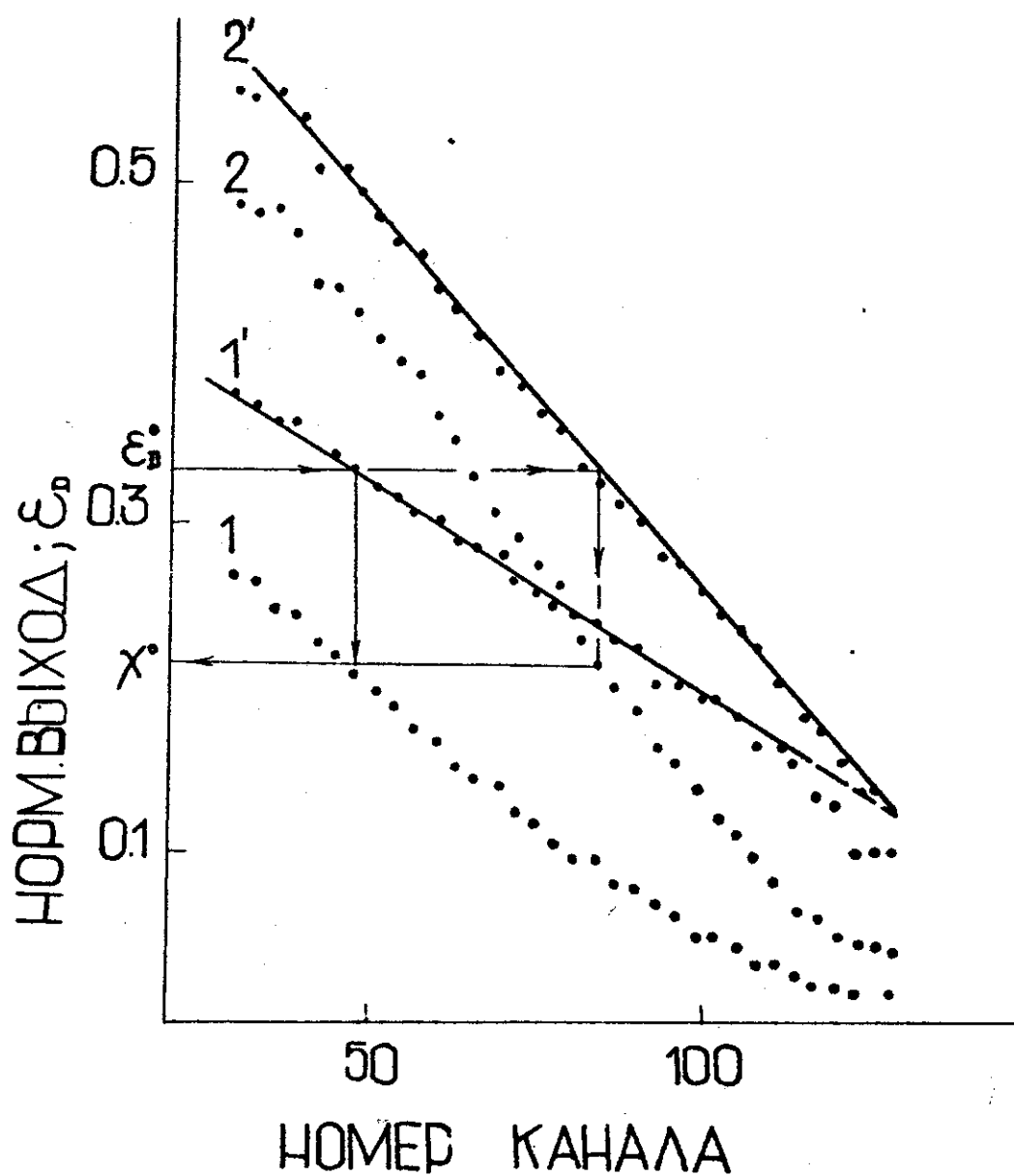


Рис. 9. Значения приведенной тепловой энергии I' и $2'$ восстановлены из нормированного выхода протонов каналпро-
ванных в $\langle 110 \rangle$ осевом канале германия в зависи-
мости от температуры кристалла: [91] : 1 - 200°K,
2 - 470°K.

$$\gamma(\varepsilon_T, \varepsilon_D) = (\pi \varepsilon_D)^{-1} \exp(-\varepsilon_T / \varepsilon_D), \quad (9.1)$$

где $\varepsilon_T = E \psi^2 / V_s$ — значение приведенной поперечной кинетической энергии.

Азимуальная симметрия углового распределения канализованных частиц была обнаружена Андерсоном и Ледерсоном [92] в эксперименте на прохождение 1,6 МэВ протонов в $\langle 110 \rangle$ осевом канале монокристалла кремния (см. рис. 10). Тем не менее, авторы вышеупомянутой работы выразили опасение, что обнаруженный эффект является следствием несовершенной техники эксперимента. Действительно, как было отмечено в обзорной статье Утормон [4], прямое исследование функций распределения канализованных частиц по поперечным импульсам затруднено в области энергий \sim (МэВ/нуклон), и очень просто осуществимо в экспериментах с высокоэнергетическими пучками вторичных частиц. Азимуальная симметрия угловых распределений была обнаружена в эксперименте [93] с высокоэнергетическими пучками канализованных протонов и пионов в $\langle 110 \rangle$ осевом канале германия (см. рис. 11.). Максимум интенсивности рассеянных частиц наблюдается в направлении кристаллографической оси и не зависит от угла наклона кристалла, что является следствием статистической независимости потока канализованных частиц.

Угловое распределение вылетающих из кристалла частиц образовано канализованной и хаотической компонентами, которые можно легко вычислить с помощью функции дисканализованности (8.2). Таким образом, прямое сопоставление распределения (9.1) с ре-

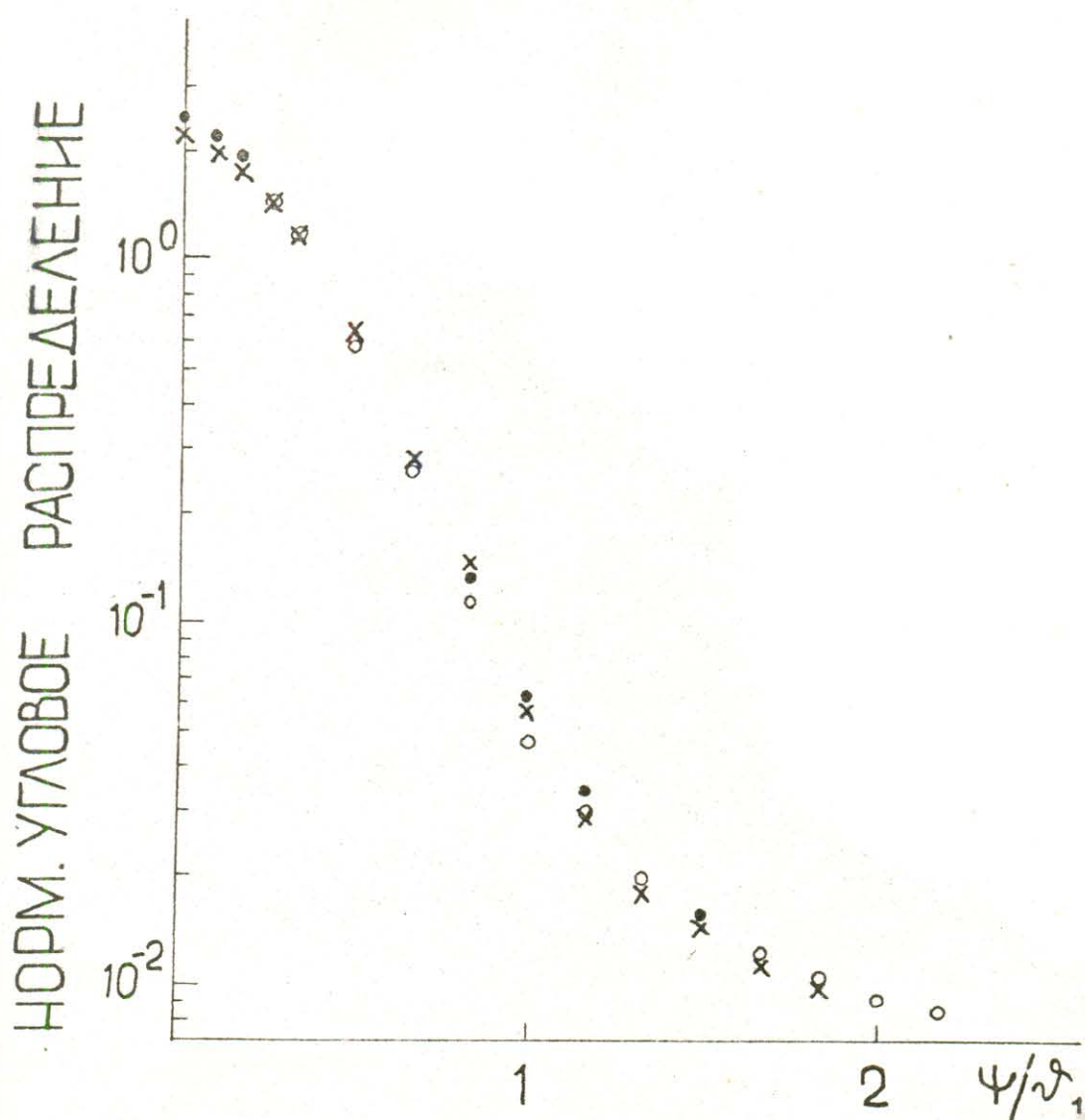


Рис. 10. Азимутальная симметрия углового распределения протонов с $E = 1,6$ МэВ, вылетевших из $\langle 110 \rangle$ осевого канала монокристалла кремния [92]. Сканирование протоннограммы осуществлялось в направлении плоскости (110) и в двух хаотических направлениях, которые обозначены символами X и O.

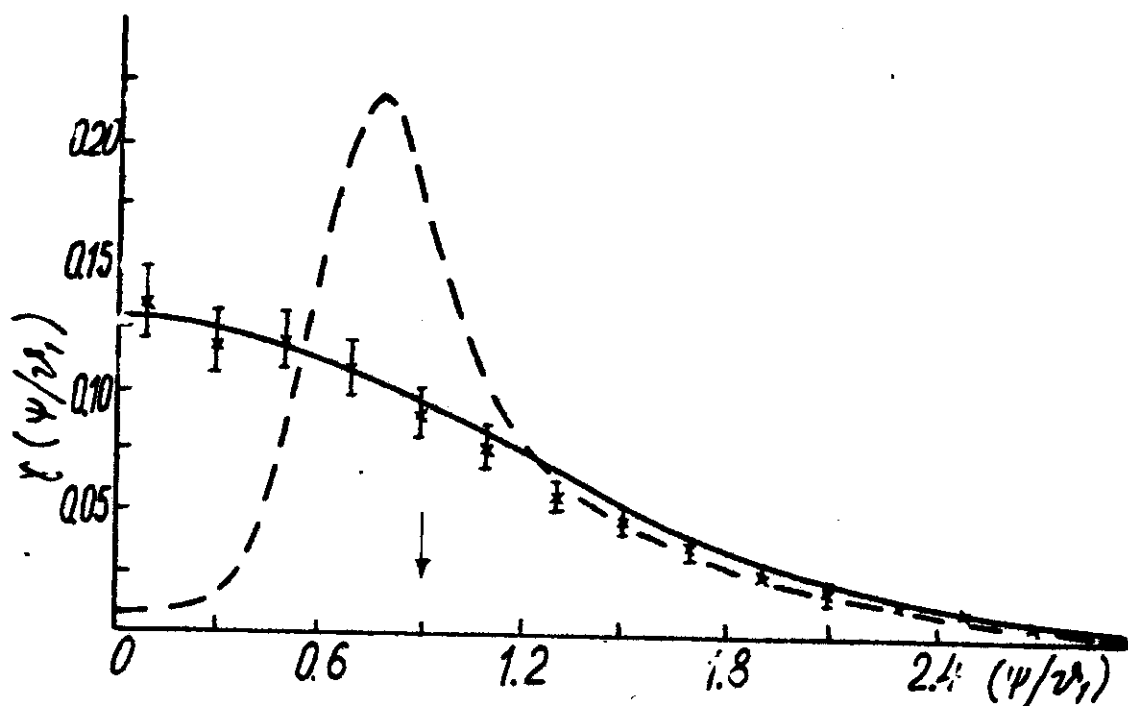


Рис. II. Азимутально-симметричное угловое распределение пионов и протонов с энергией 250 ГэВ/С, вылетевших из $\langle 110 \rangle$ осевого канала монокристалла германия [93]. Стрелкой отмечен угол падения пучка частиц на кристалл. Пунктирная линия - расчет по диффузионной модели [24]. Сплошная линия - по формуле (9.1).

результатами эксперимента возможно для не слишком толстых кристаллов ($\varepsilon_D < 1$), когда вклад деканализации мал (см. рис. II.).

2.10.1. О ВОССТАНОВЛЕНИИ ПРОФИЛИ КОНЦЕНТРАЦИИ ДЕФЕКТОВ В КРИСТАЛЛЕ.

Исследование динамики различного рода воздействий на совершенство кристаллической структуры с помощью эффекта каналирования привлекает все больший интерес. Как было показано выше, процесс многократного рассеяния приводит к увеличению вероятности обнаружения заряженных частиц вне пределов конечного фазового объема, ограниченного поверхностью постоянной энергии равной максимальному значению непрерывного потенциала атомного ряда или плоскости. В случае дефектных кристаллов, уменьшение числа каналированных частиц в пределах конечного фазового объема вызвано процессом как многократного, так и прямого рассеяния на ядрах смещенных атомов. Учет вклада прямого рассеяния приводит к следующему виду функции деканализации

$$\chi(e) = 1 - g_{ch}(e) + \int C(r_1, e) g(r_1, e) dr_1; \quad (10.1)$$

$$g(r_1, e) = \int dP_1 g(r_1, P_1, e),$$

где $C(r_1, e)$ — относительная концентрация ядер на глубине проникновения e и на расстоянии r_1 от центра канала.

Частным случаем функции деканализации (10.1) является приближение, в котором ядра смещенных атомов равномерно распределены по сечению канала

$$\chi(e) = 1 - g_{ch}(e) + c(e) g_{ch}(e)$$

(10.2)

Использование функции деканализованности (10.2) носит оценочный характер, так как адекватное восстановление профиля концентрации дефектов возможно при известном местоположении связанного атома кристалла. Исследование ориентационной зависимости выхода деканализованных ионов в данном случае не применимо, так как условие статистической независимости исключает влияние угла наклона кристалла на перераспределение потока каналлованных частиц. Для определения профиля концентрации (местоположения) дефектов необходимо выполнить измерения энергетических спектров деканализованных ионов не менее чем в двух кристаллографических направлениях.