

УДК 537.8

ОБ АНОМАЛЬНОЙ ДИФФУЗИИ БЫСТРЫХ ЭЛЕКТРОНОВ В КРИСТАЛЛЕ КРЕМНИЯ

© 2024 г. В. В. Сыщенко^{а, *}, А. И. Тарновский^а, В. И. Дроник^а

^аБелгородский государственный национальный исследовательский университет, Белгород, 308015 Россия

*e-mail: syshch@yandex.ru

Поступила в редакцию 24.01.2024 г.

После доработки 30.02.2024 г.

Принята к публикации 30.02.2024 г.

Аномальной диффузией называют случайный процесс, при котором среднеквадратичное смещение частицы из точки старта нелинейно зависит от времени. Ранее было обнаружено, что такое поведение возможно для частиц высоких энергий, движущихся в кристалле в условиях, близких к аксиальному каналированию. В этом случае быстрое смещение частиц в поперечной атомным цепочкам плоскости (полеты Леви) обусловлено временным захватом частиц в плоскостные каналы. В настоящей работе путем численного моделирования найден показатель аномальной диффузии для различных значений энергии поперечного движения электронов в плоскости (100) кристалла кремния. Установлено, что в случае электронов с энергией поперечного движения, превышающей на 1 эВ высоту седловой точки потенциала системы атомных цепочек [100], результаты согласуются с полученными ранее. Подтверждено, что аномальный характер диффузии обусловлен возможностью кратковременного захвата частицы в плоскостные каналы, с ростом поперечной энергии такая возможность исчезает, и диффузия приобретает нормальный (броуновский) характер.

Ключевые слова: каналирование, кремний, численное моделирование, аномальная диффузия, полеты Леви.

DOI: 10.31857/S1028096024090125, EDN: ENPCIN

ВВЕДЕНИЕ

Быстрая заряженная частица, движущаяся в кристалле вблизи одной из плотноупакованных атомами кристаллографических осей, может захватываться в образованную этими осями потенциальную яму, совершая финитное движение в плоскости, перпендикулярной соответствующей оси, и аномально глубоко проникая в кристалл. Такое явление называется аксиальным каналированием [1–5]. Движение частицы в режиме аксиального каналирования с хорошей точностью может быть описано как движение в поле непрерывного потенциала атомной цепочки, т.е. потенциала, усредненного вдоль оси цепочки. В этом случае сохраняется продольная компонента импульса частицы $p_{\parallel}$, и задача о ее движении сводится к двумерной задаче о движении в поперечной плоскости. Совокупность параллельных атомных цепочек, лежащих в той

или иной плотноупакованной плоскости, может образовать плоскостной канал с возможностью каналирования захваченной в него частицы. Интересная ситуация возникает, когда движение частицы в плоскостном канале слабоустойчиво. В этом случае частица, пройдя некоторый участок пути в плоскостном канале, выбывает из него (неустойчивость движения связана с неоднородностью потенциала набора атомных цепочек, формирующего плоскостной канал) и совершает хаотическое движение в периодическом поле цепочек атомов. Затем, найдя другой канал, она может на какое-то время попасть в него, и так далее. Такое движение частицы в кристалле напоминает так называемые полеты Леви (Lévi flights), известные в теории стохастических процессов (например, [6–10]). Такой режим движения представляет интерес, поскольку приводит к аномальной диффузии частиц.

Нормальная диффузия (броуновское движение) описывается следующим уравнением:

$$\frac{\partial}{\partial t} f(\rho, t) = a \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right) f(\rho, t), \quad (1)$$

где a — коэффициент диффузии, а двумерный случай с $\rho = (x, y)$ как раз соответствует рассматриваемому движению частиц в поперечной к атомным цепочкам кристалла плоскости. Его решение с начальным распределением диффундирующих частиц в виде δ -функции,

$$f(\rho, 0) = \delta(x)\delta(y), \quad (2)$$

имеет вид:

$$f(\rho, t) = \frac{1}{4\pi at} \exp\left(-\frac{\rho^2}{4at}\right) = \frac{1}{\pi \langle \rho^2 \rangle} \exp\left(-\frac{\rho^2}{\langle \rho^2 \rangle}\right) \quad (3)$$

(любой учебник математической физики, например, [11, 12]), т.е. среднеквадратичное смещение частиц из начальной точки зависит от времени линейно:

$$\langle \rho(t)^2 \rangle = at. \quad (4)$$

Ситуация же, когда зависимость этой величины от времени нелинейна:

$$\langle \rho(t)^2 \rangle \sim t^\mu, \quad (5)$$

где μ отлично от единицы, носит название аномальной диффузии.

В [13, 14] было обнаружено, что такое поведение возможно для частиц высоких энергий, движущихся в кристалле в условиях, близких к условиям аксиального каналирования. В этом случае быстрое ($\mu > 1$) смещение частицы в поперечной атомным цепочкам плоскости обусловлено описанным выше временным захватом частиц в плоскостные каналы. В настоящей работе путем численного моделирования найден показатель μ для различных значений энергии поперечного движения электронов в плоскости (100) кристалла кремния. Установлено, что поведение системы качественно согласуется с результатами [13–15], однако количественные результаты допускают неоднозначную интерпретацию.

МЕТОДИКА

Движение релятивистской частицы под малым углом к плотноупакованной атомной цепочке

с хорошей точностью описывается так называемым непрерывным потенциалом, т.е. потенциалом атомов, усредненным вдоль оси цепочки. В работе непрерывный потенциал отдельной атомной цепочки аппроксимирован формулой [1]:

$$U_1(x, y) = -U_0 \ln \left(1 + \frac{\beta R^2}{x^2 + y^2 + \alpha R^2} \right), \quad (6)$$

где для цепочки [100] кристалла кремния $U_0 = 66.6$ эВ, $\alpha = 0.48$, $\beta = 1.5$, $R = 0.194$ Å (радиус Томаса–Ферми), знак “минус” учитывает притягивающий характер потенциала цепочки для налетающего электрона. Такие цепочки образуют в плоскости (100) квадратную решетку с периодом $a = a_z / 2\sqrt{2} \approx 1.92$ Å, где a_z — период решетки кремния, и движение электрона происходит в поле суммарного потенциала всех атомных цепочек кристалла. В используемом алгоритме он аппроксимирован конечной суммой потенциалов 25 ближайших цепочек (рис. 1):

$$U(x, y) = \sum_{i=-2}^2 \sum_{j=-2}^2 U_1(x + ia, y + ja). \quad (7)$$

Уравнение движения релятивистской частицы электрона может быть записано в виде [1, 16]:

$$\frac{d\mathbf{v}}{dt} = \frac{c^2}{E} \left(\mathbf{F} - \frac{1}{c^2} \mathbf{v}(\mathbf{v}\mathbf{F}) \right), \quad (8)$$

где $\mathbf{v}$ — скорость частицы, $\mathbf{F} = -\nabla U$ — действующая на частицу сила, c — скорость света в вакууме, $E = mc^2 \left(1 - v^2 / c^2 \right)^{-1/2}$ — энергия частицы. В случае движения частицы высокой энергии под малым углом ψ и силы, действующей лишь в по-

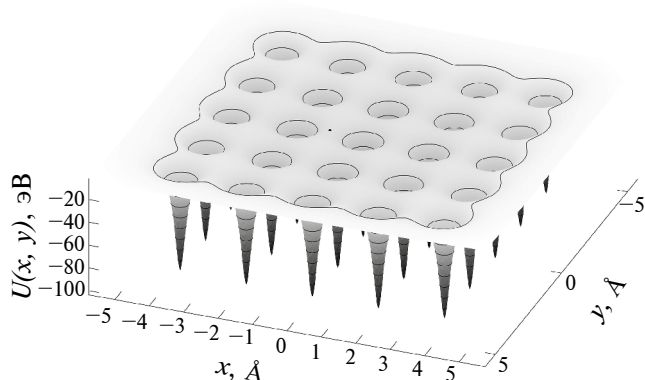


Рис. 1. Потенциальная энергия (7) электрона, движущегося вблизи направления [100] кристалла кремния.

перечной плоскости (что, как отмечено выше, приводит к сохранению продольной компоненты импульса $p_{\parallel}$), уравнение движения в этой плоскости с хорошей точностью может быть сведено к формальному виду нерелятивистского уравнения движения:

$$\frac{dv_{\perp}}{dt} = -\frac{c^2}{E_{\parallel}}, \quad (9)$$

в котором величина $E_{\parallel} / c^2$ играет роль массы частицы, а $E_{\parallel} = (m^2 c^4 + p_{\parallel}^2 c^2)^{1/2}$ — энергия продольного движения [1]. Для его численного интегрирования использован алгоритм Верле в скоростной форме (velocity Verlet algorithm) [17]. Шаг по времени τ выбран таким образом, что

$$c\Delta t = 10 \text{ \AA}. \quad (10)$$

Для нахождения среднеквадратичного смещения частицы как функции времени $\langle \rho(t)^2 \rangle$ моделируют 10^4 траекторий, начальные положения которых (x_0, y_0) разыгрываются в пределах центральной ячейки потенциала (7). На границах этой ячейки на локальную траекторию частицы накладываются периодические граничные условия, информация о глобальном смещении частицы относительно центральной ячейки накапливается.

РЕЗУЛЬТАТЫ И ИХ ОБСУЖДЕНИЕ

Для всех моделируемых траекторий начальную скорость выбирают из выражения для заданного значения энергии поперечного движения:

$$E_{\perp} = \frac{E_{\parallel} v_{\perp 0}^2}{2c^2} + U(x_0, y_0). \quad (11)$$

В одной серии моделирования направление начальной скорости выбирали для частицы случайным образом (как в [13–15]), а в другой все начальные скорости были выбраны в положительном направлении оси x (т.е. трехмерный вектор начальной скорости лежал в плоскости (110) кристалла кремния), как это имело бы место в случае падения на кристалл пучка электронов. Здесь и далее будем (как и в [13–15]) отсчитывать $E_{\perp}$ от седловой точки потенциала (7), находящейся вблизи центральной ячейки (отмечена точкой на рис. 1). В [13] моделирование было выполнено для единственного значения $E_{\perp} = 1$ эВ, траектории частиц в поперечной плоскости прослеживали вплоть до глубин проникновения $l = ct = 10$ нм

(для выбранной энергии электронов $E_{\parallel} = 10$ ГэВ скорость продольного смещения с хорошей точностью можно считать равной скорости света в вакууме), что при выборе шага по времени (10) соответствует числу шагов по времени $N = 10^7$.

Пример типичной траектории электрона в поперечной плоскости представлен на рис. 2. На нем видно, каким именно образом возникает аномальная диффузия: частица время от времени захватывается в плоскостной канал и быстро удаляется от области предшествующей локализации, что и представляет собой полеты Леви, приводящие к супердиффузии в поперечной плоскости.

В настоящей работе в развитие [13–15] выполнено моделирование траекторий электронов для значений энергии поперечного движения 0.5, 1, 1.5, 2, 2.5 и 3 эВ. Рассматривали начальные условия двух типов: (а) случайный разброс по азимуту направлений падающих электронов, как в [13–15]; (б) одинаковое азимутальное направление всех начальных частиц, соответствующее пучку из ускорителя, падающему параллельно плоскости (110). Для двух типов начальных условий на рис. 3 представлены в логарифмическом масштабе найденные в результате моделирования зависимости $\langle \rho(t)^2 \rangle$ для электронов с энергией из этого набора. Угол наклона такой кривой позволяет судить о показателе степени μ в (5) в зависимости от времени. В первых трех случаях в пределе больших глубин проникновения в кристалл μ заметно превышает единицу, что свидетельствует об аномальном характере диффузии частиц в поперечной плоскости. В оставшихся трех случаях энергия поперечного движения значительно пре-

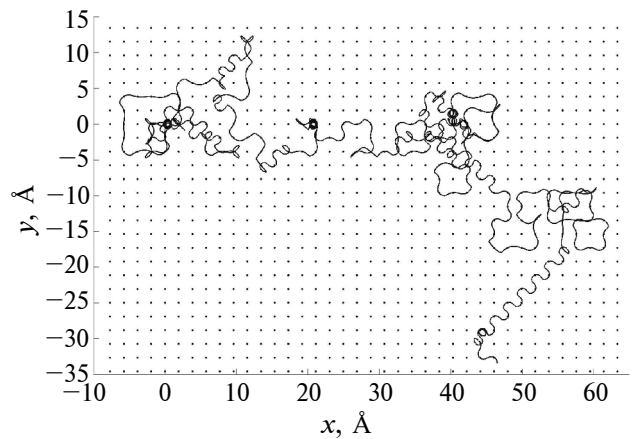


Рис. 2. Типичная траектория электрона в поперечной плоскости [100] кристалла кремния. Энергия поперечного движения электрона 0.5 эВ.

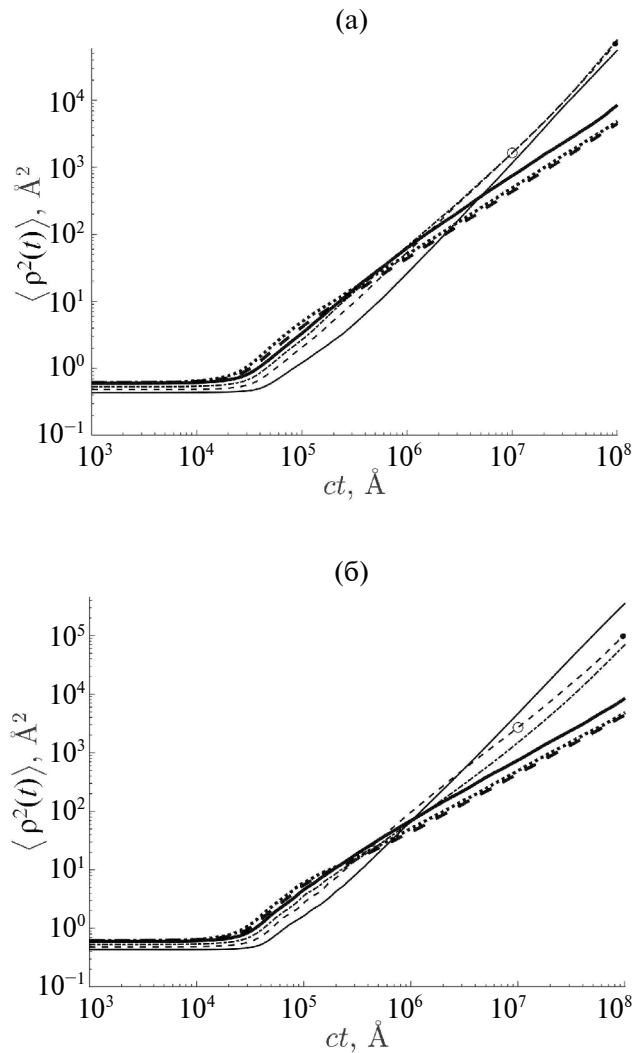


Рис. 3. Найденные численно временные зависимости $\langle \rho(t)^2 \rangle$ в логарифмическом масштабе для электронов с энергией поперечного движения 0.5 (тонкая сплошная линия), 1 (тонкая штриховая линия), 1.5 (тонкая штрихпунктирная линия), 2 (толстая сплошная линия), 2.5 (толстая пунктирная линия) и 3 эВ (толстая штриховая линия) для вариантов (а) и (б) выбора начальных условий. В случае второго варианта на кривой для электронов с $E_{\perp} = 1$ эВ кружком и точкой отмечены значения t_0 , использованные на рис. 4.

вышает высоту потенциальных барьеров. Поэтому захват частицы в плоскостные каналы на значительное время не происходит, и показатель μ близок к единице, т.е. процесс диффузии носит нормальный (броуновский) характер. Как показано в [13], такая же диффузия имеет место в системе случайно расположенных параллельных цепочек.

Зависимость показателя степени μ в (5) от времени в [13–15] предложено брать из найденной

в результате моделирования зависимости $\langle \rho(t)^2 \rangle$, вычисляя отношение

$$\mu(t) = \frac{\ln(\langle \rho(t)^2 \rangle / \langle \rho(t_0)^2 \rangle)}{\ln(t / t_0)}, \quad (12)$$

где t_0 — некоторый стандартный момент времени, $t_0 \ll t$, причем в [13, 14] значение t_0 не конкретизируется, а в [15] упоминается, что оно соответствует глубине проникновения $l = 1$ мм. Однако к получаемым таким образом результатам следует относиться с осторожностью, поскольку формула (12) дает однозначный результат лишь в случае не зависящего от времени показателя μ . Действительно, аппроксимация полученной в результате моделирования функции $\langle \rho(t)^2 \rangle$ степенной зависимостью (5) будет иметь вид:

$$\langle \rho(t)^2 \rangle = \langle \rho(t_0)^2 \rangle (t / t_0)^{\mu(t)}, \quad (13)$$

где деление на t_0 необходимо, чтобы аргумент степенной функции сделать безразмерным. Нетрудно понять, что для заданной функции времени в левой части (13) различный выбор t_0 будет приводить к различным значениям показателя $\mu(t)$, вычисляемого по формуле (12). Эти различия иллюстрирует рис. 4, на котором представлены графики $\mu(t)$, полученные по формуле (12) для $ct_0 = 1$ мм (как в [15]) и $ct_0 = 9.5$ мм, а также как производная функции, аппроксимирующей логарифмическую кривую на рис. 3б, соответствующую $E_{\perp} = 1$ эВ,

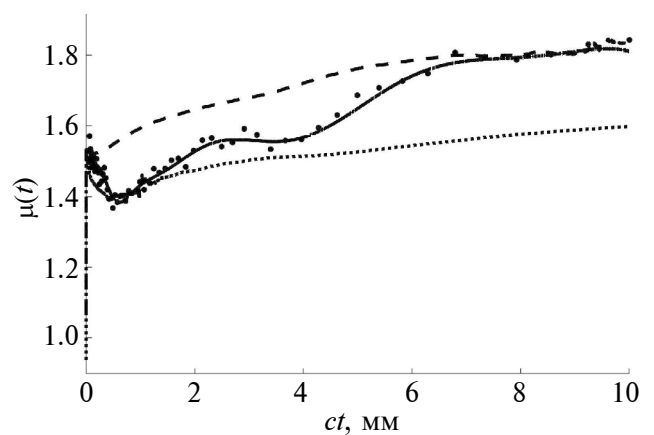


Рис. 4. Графики $\mu(t)$ в случае $E_{\perp} = 1$ эВ, полученные по формуле (12) для $ct_0 = 1$ мм (пунктирная линия) и $ct_0 = 9.5$ мм (штриховая линия), а также как производная функции, аппроксимирующей логарифмическую кривую на рис. 4 полиномом 25-й степени (сплошная линия). Точки соответствуют найденным численно значениям наклона касательных к логарифмической кривой на рис. 3б.

Таблица 1. Степенной показатель диффузии на максимальной глубине проникновения в кристалл, рассчитанный по формуле (12) для $ct_0 = 1$ мм (μ), а также по наклону касательной к логарифмической кривой, отображающей результаты моделирования на рис. 3 (μ_{end}) для начальных условий двух типов: случайный разброс электронов по азимутальным направлениям (а) и параллельный пучок электронов (б)

$E_{\perp}$, эВ	Начальные условия (а)		Начальные условия (б)	
	μ	μ_{end}	μ	μ_{end}
0.5	1.68	1.65	1.88	1.79
1.0	1.67	1.93	1.57	1.75
1.5	1.70	1.89	1.69	1.90
2.0	1.05	1.19	1.06	1.19
2.5	1.01	1.01	1.00	1.02
3.0	0.99	1.02	1.01	0.99

полиномом 25-й степени. Кроме того, на график нанесены точки, соответствующие найденным численно значениям наклона касательных к логарифмической кривой на рис. 3б.

На рис. 5 приведены кривые зависимости $\mu(t)$ для всех исследованных значений $E_{\perp}$, рассчитанные по формуле (12) для $ct_0 = 1$ мм (разрывы на кривых соответствуют исключенной области малых знаменателей в (12) вблизи t_0). Во второй и четвертой колонках (для вариантов различных начальных условий соответственно) табл. 1 при-

ведены значения $\mu(t)$, достигаемые при $ct \rightarrow 10$ мм. Отметим, в частности, что в случае $E_{\perp} = 1$ эВ получен показатель $\mu(t) = 1.67$ для выбора (а) начальных условий и 1.57 для выбора (б), что близко к полученному в [13–15] значению 1.51. Для исследования асимптотического поведения диффузии электронов в поперечной плоскости при больших временах (соответствующих большим глубинам проникновения в кристалл) интерес могут представлять значения μ_{end} , соответствующие наклону логарифмических кривых на рис. 3 при $ct \rightarrow 10$ мм. Эти значения приведены в третьей и пятой колонках таблицы, а также отмечены горизонтальными линиями по правому краю рис. 5а, б.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В работе выполнено моделирование движения ансамбля электронов высокой энергии, движущихся в кристалле кремния под малым углом к оси [100], ненамного превышающим критический угол аксиального каналирования. В случае, когда энергия движения электронов в поперечной плоскости незначительно превышает высоту потенциальных барьеров, создаваемых системой атомных цепочек кристалла, результаты моделирования показывают аномальную диффузию в поперечной плоскости. Эти результаты качественно согласуются с результатами [13–15], где это явление было впервые обнаружено при прохождении частиц высоких энергий через кристалл. В дополнение к [13–15] был исследован набор различных значений энергии поперечного движения электронов. Показано, что с увеличением $E_{\perp}$ характер

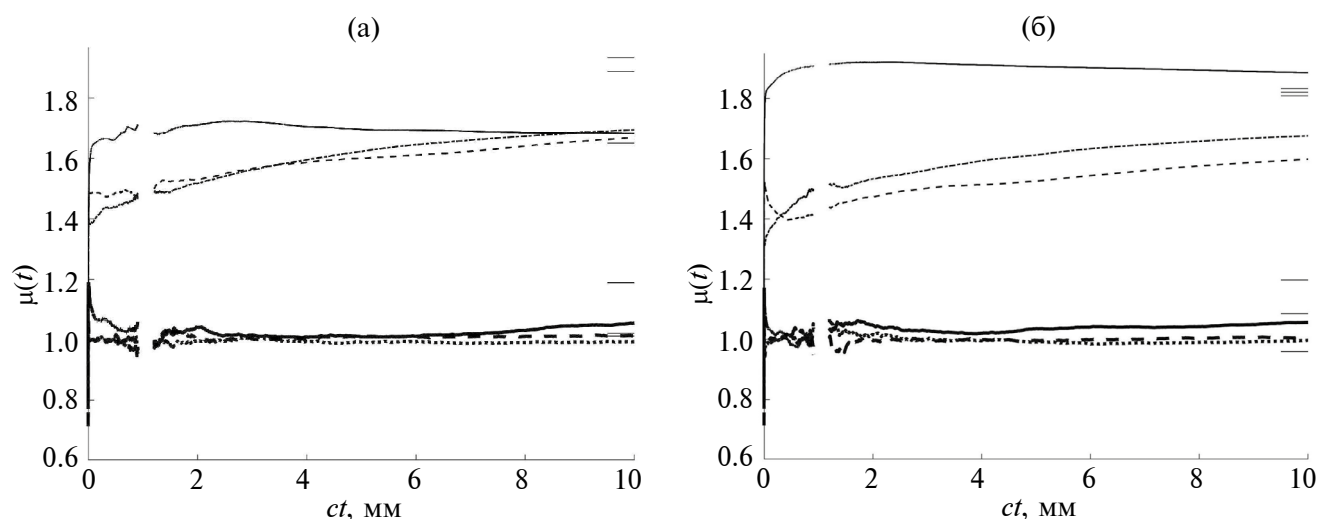


Рис. 5. Зависимости $\mu(t)$ для всех исследованных значений $E_{\perp}$, рассчитанные по формуле (12) для $ct_0 = 1$ мм для вариантов (а) и (б) выбора начальных условий; типы линий соответствуют рис. 3. Короткие горизонтальные линии на рисунках справа соответствуют значениям μ_{end} из табл. 1.

движения приближается к нормальной (броуновской) диффузии, что обусловлено исчезновением возможности захвата электрона в плоскостные каналы. Другим результатом работы является демонстрация неоднозначности извлекаемой с помощью подхода [13–15] зависимости степенного показателя диффузии от времени. Таким образом, количественная характеристика аномальной диффузии, извлекаемая из результатов моделирования, нуждается в уточнении перед использованием в дальнейших приложениях, таких как описание диффузии кинетическими уравнениями с пространственными производными дробного порядка [8, 11, 18]. В то же время качественно случаи аномальной и нормальной диффузии заметно различаются независимо от деталей используемой процедуры. Отметим также, что в работе были исследованы начальные условия двух типов: случайный разброс направлений падающих электронов по азимуту, как в [13–15], и параллельный пучок падающих частиц. Качественный характер диффузии в поперечной плоскости в обоих случаях один и тот же.

КОНФЛИКТ ИНТЕРЕСОВ

Авторы данной работы заявляют, что у них нет конфликта интересов.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Ахиезер А.И., Шульга Н.Ф. Электродинамика высоких энергий в веществе. М.: Наука, 1993. 344 с.
2. Ахиезер А.И., Шульга Н.Ф., Трутень В.И., Гриненко А.А., Сыщенко В.В. // УФН. 1995. Т. 165. № 10. С. 1165.
<https://doi.org/10.3367/UFNr.0165.199510c.1165>
3. Gemmel D.S. // Rev. Mod. Phys. 1974. V. 46. P. 129.
<https://doi.org/10.1103/RevModPhys.46.129>
4. Uggerhøj U.I. // Rev. Mod. Phys. 2005. V. 77. P. 1131.
<https://doi.org/10.1103/RevModPhys.77.1131>
5. Lindhard J. // Kongel. Dan. Vidensk. Selsk., Mat.-Fys. Medd. 1965. V. 34. № 14. P. 1.
6. Bouchaud J.-P., Georges A. // Phys. Rep. 1990. V. 195. P. 127.
[https://doi.org/10.1016/0370-1573\(90\)90099-N](https://doi.org/10.1016/0370-1573(90)90099-N)
7. Shlesinger M.F., Zaslavsky G.M., Klafter J. // Nature. 1993. V. 363. P. 31.
<https://doi.org/10.1038/363031a0>
8. Metzler R., Klafter J. // Phys. Rep. 2000. V. 339. P. 1.
<https://doi.org/10.1016/S0370-15730000070-3>
9. Zaslavsky G.M. // Phys. Rep. 2002. V. 371. P. 461.
[https://doi.org/10.1016/S0370-1573\(02\)00331-9](https://doi.org/10.1016/S0370-1573(02)00331-9)
10. Chechkin A.V., Klafter J., Gonchar V.Yu., Metzler R., Tanatarov L.V. // Phys. Rev. E. 2003. V. 67. 010102 (R).
<https://doi.org/10.1103/PhysRevE.67.010102>
11. Тихонов А.Н., Самарский А.А. Уравнения математической физики. М.: Наука, 1977. 736 с.
12. Мэттьюз Дж., Уокер Р. Математические методы физики. М.: Атомиздат, 1972. 392 с.
13. Greenenko A.A., Chechkin A.V., Shul'ga N.F. // Phys. Lett. A. 2004. V. 324. P. 82.
<https://doi.org/10.1016/j.physleta.2004.02.053>
14. Shul'ga N.F., Greenenko A.A., Truten' V.I. // Ukr. J. Phys. 2006. V. 51. № 2. P. 147.
15. Шульга Н.Ф. Некоторые вопросы теории рассеяния быстрых частиц в веществе и во внешних полях. Киев: Наукова думка, 2010. 199 с.
16. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Теория поля. М.: Наука, 1988. 512 с.
17. Гулд Х., Тобочник Я. Компьютерное моделирование в физике. Ч. 1. М.: Мир, 1990. 349 с.
18. Brockmann D., Geisel T. // Phys. Rev. Lett. 2003. V. 90. P. 170601.
<https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.90.170601>

On Anomalous Diffusion of Fast Electrons through the Silicon Crystal

V. V. Syshchenko^{1,*}, A. I. Tarnovsky¹, V. I. Dronik¹

¹Belgorod State University, Belgorod, 308015 Russia

*e-mail: syshch@yandex.ru

Anomalous diffusion is a random process in which the root-mean-square displacement of a particle from the starting point depends nonlinearly on time. The possibility of such behavior for high energy particles moving through the crystal under conditions close to axial channeling was found earlier. In this case, the rapid displacement of particles in a plane transverse to atomic strings (Lévi flights) is due to the temporary capture of the particles in planar channels. In this work, by means of numerical simulation, the anomalous diffusion exponent was found for different values of the energy of electron transverse motion in the (100) plane of a silicon crystal. It has been established that in the case of electrons with an energy exceeding by 1 eV the height of the saddle point of the potential of a system of atomic chains [100], the results are consistent with those obtained earlier. It has been confirmed that the anomalous nature of diffusion is due to the possibility of short-term capture of particles in planar channels. With increasing transverse energy, this possibility disappears, and diffusion becomes normal (Brownian).

Keywords: channeling, silicon, numerical simulation, anomalous diffusion, Lévi flights.