

**ВЛИЯНИЕ АТОМНОГО ФОРМ – ФАКТОРА НА ЭФФЕКТ
КАНАЛИРОВАНИЯ В КРИСТАЛЛЕ КРЕМНИЯ /**
The effect of the atomic form factor on the channeling effect in a silicon crystal



¹Кощеев Владимир Петрович

²Штанов Юрий Николаевич



¹) E-mail: koshcheev1@yandex.ru тел.: +7985-476-16-19

²) E-mail: yuran1987@mail.ru тел.: +7922-417-40-22

Теория

Известно [1], что потенциальная энергия иона в осевом канале кристалла может быть построена с помощью разложения в тригонометрический ряд Фурье атомного форм-фактора

$$U(x, y) = d^{-3} \sum_{n_x} \sum_{n_y} \sum_{j=1}^8 V(g) \exp(-\sigma^2 g^2 / 2) \cos \left[2\pi n_x (x - x_j) / a_x + 2\pi n_y (y - y_j) / a_y \right], \quad (1)$$

где σ^2 — средний квадрат амплитуды тепловых колебаний атомов кристалла;

$g^2 = (2\pi n_x / a_x)^2 + (2\pi n_y / a_y)^2$ — квадрат компоненты вектора обратной решетки; a_x, a_y —

периодичности расположения атомов.

1. В. П. Кошечев, Д. А. Моргун, Т. А. Панина, Ю. Н. Штанов. Компьютерное моделирование стохастической динамики эффекта каналирования – Сургут : ООО "Печатный мир", 2017. – 170 с. – (25 лет СурГУ). – ISBN 978-5-6040248-5-0. – EDN YQWUHL.

<https://elibrary.ru/item.asp?id=36608128>

Теория

$V(g)$ — компонента Фурье потенциальной энергии взаимодействия иона с атомом была построена в [2] в первом порядке теории возмущений

$$V(g) = \frac{4\pi Z_1 Z_2 e^2}{g^2} \left(1 - \frac{F(g)}{Z_2} \right), \quad (2)$$

где $F(g)$ атомный форм-фактор для атома кристалла.

Теория

Тогда для случая Si(3p) запишем в виде

$$F(g) = \int n_1(\mathbf{r}) \exp(-i\mathbf{g}\mathbf{r}) d^3r, \quad (3)$$

где $n(\mathbf{r}) = 2|\psi_{1s}(\mathbf{r})|^2 + 2|\psi_{2s}(\mathbf{r})|^2 + 6|\psi_{2p}(\mathbf{r})|^2 + 2|\psi_{3s}(\mathbf{r})|^2 + 2|\psi_{3p}(\mathbf{r})|^2$ – электронная

плотность для атома кремния и постоянная решетки кристалла кремния $d = 5.4307 \text{ \AA}$ и

$$\sqrt{\sigma^2} = 0.0753 \text{ \AA}.$$

Волновые функции в формуле (3), которые аппроксимируют решения уравнения Хартри-Фока, представлены в [2].

2. Clementi E., Roetti C. // Atomic Data Nucl. Data Tables. 1974. V. 14. № 3. P. 177. [https://doi.org/10.1016/S0092-640X\(74\)80016-1](https://doi.org/10.1016/S0092-640X(74)80016-1)

Результаты расчетов

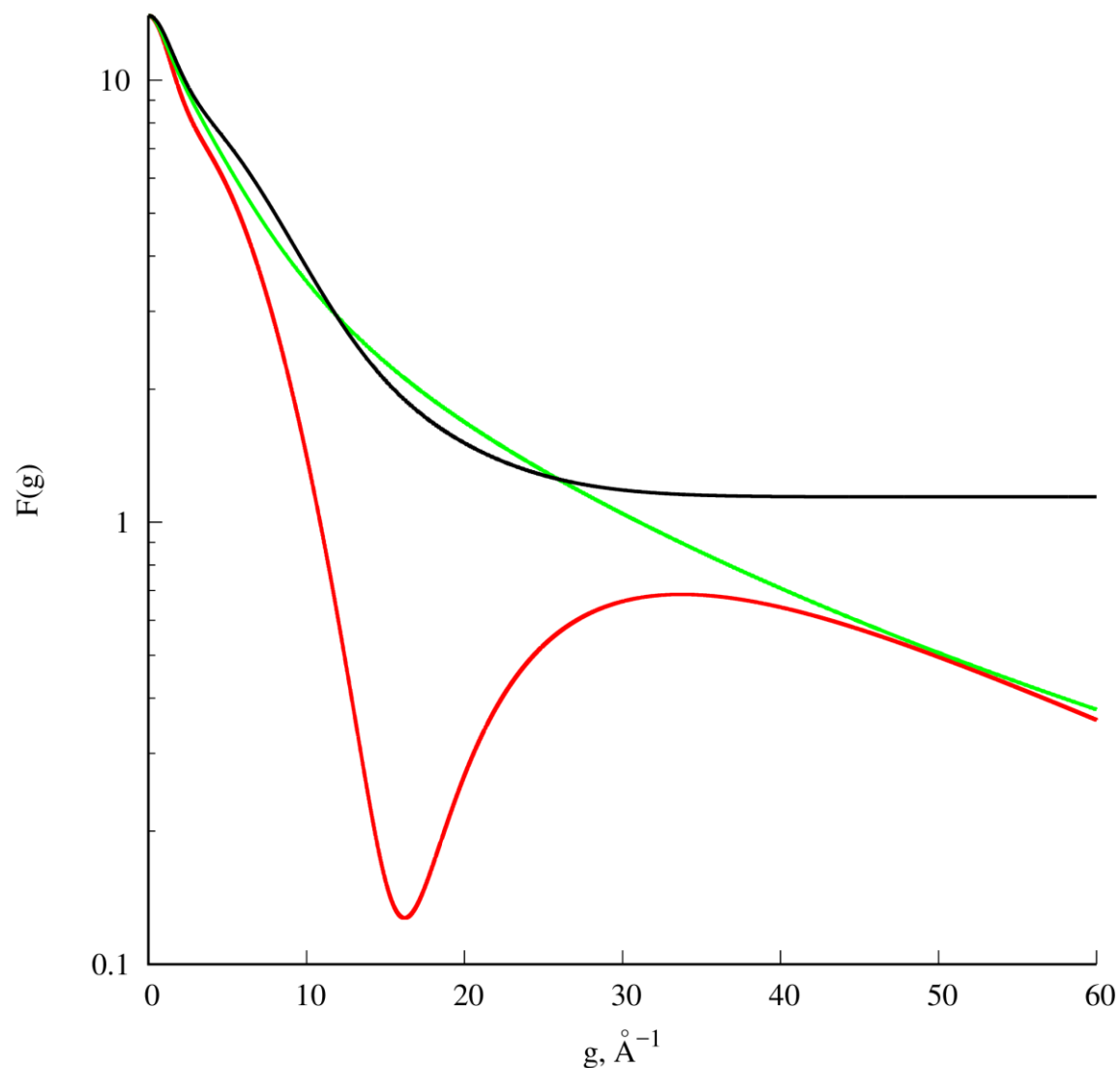


Рис.1. Атомный форм-фактор в приближении Хартри-Фока для нейтрального атома кремния в состоянии 3р – сплошная **красная линия**; приближении Дойля-Тёрнера – сплошная **черная линия**; приближении Мольер – сплошная **зеленая линия**.

Fig.1. The atomic form factor in the Hartree-Fock approximation for a neutral silicon atom in the 3p state is a **solid red line**; the Doyle–Turner approximation is a **solid black line**; the Moliere approximation is a **solid green line**.

Результаты расчетов

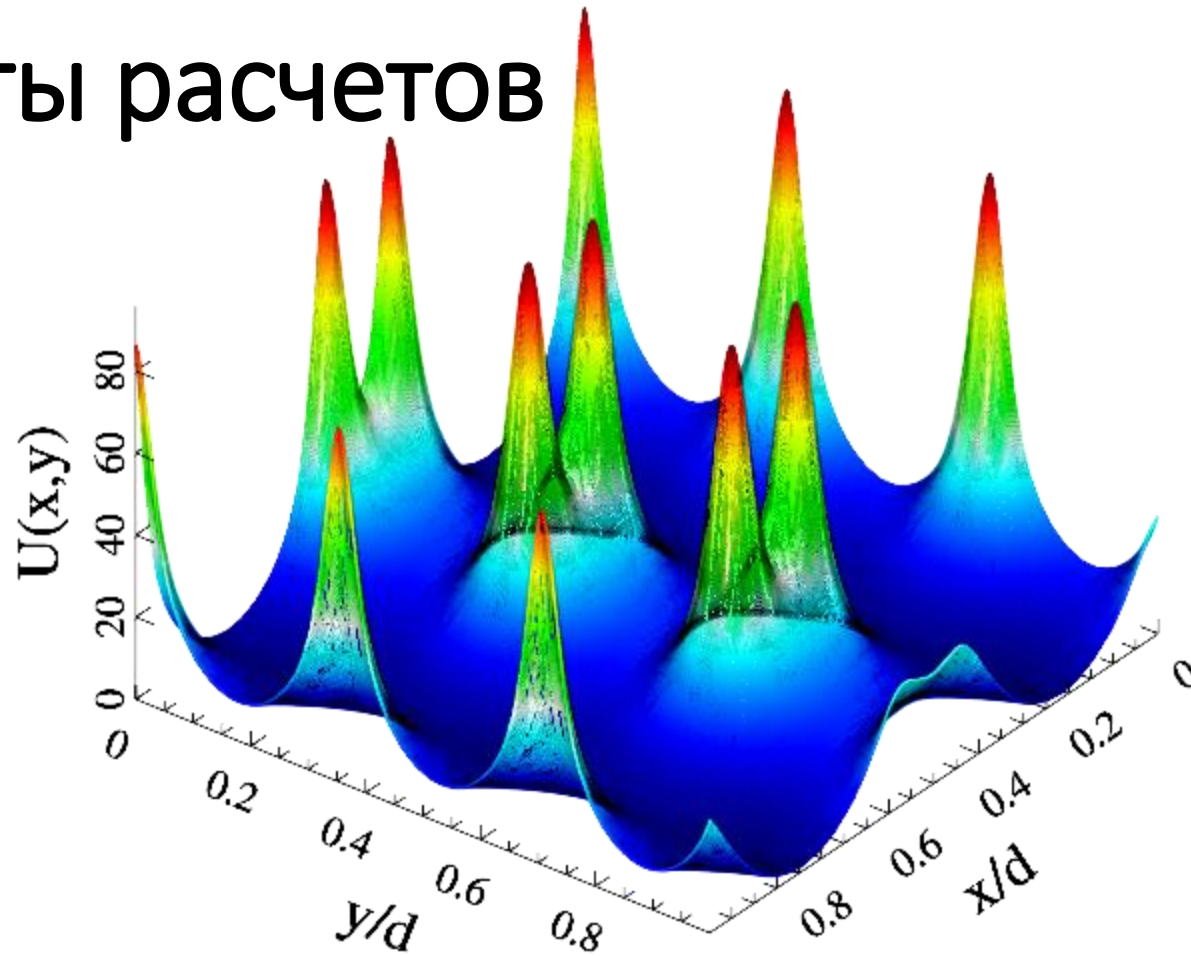


Рис.2. Непрерывный потенциал взаимодействия для $\langle 110 \rangle$ кристалла кремния при $T=300\text{K}$ в приближении Хартри-Фока.

Fig.2. The continuous interaction potential for $\langle 110 \rangle$ silicon crystals at $T=300\text{K}$ in the Hartree-Fock approximation.

Результаты расчетов

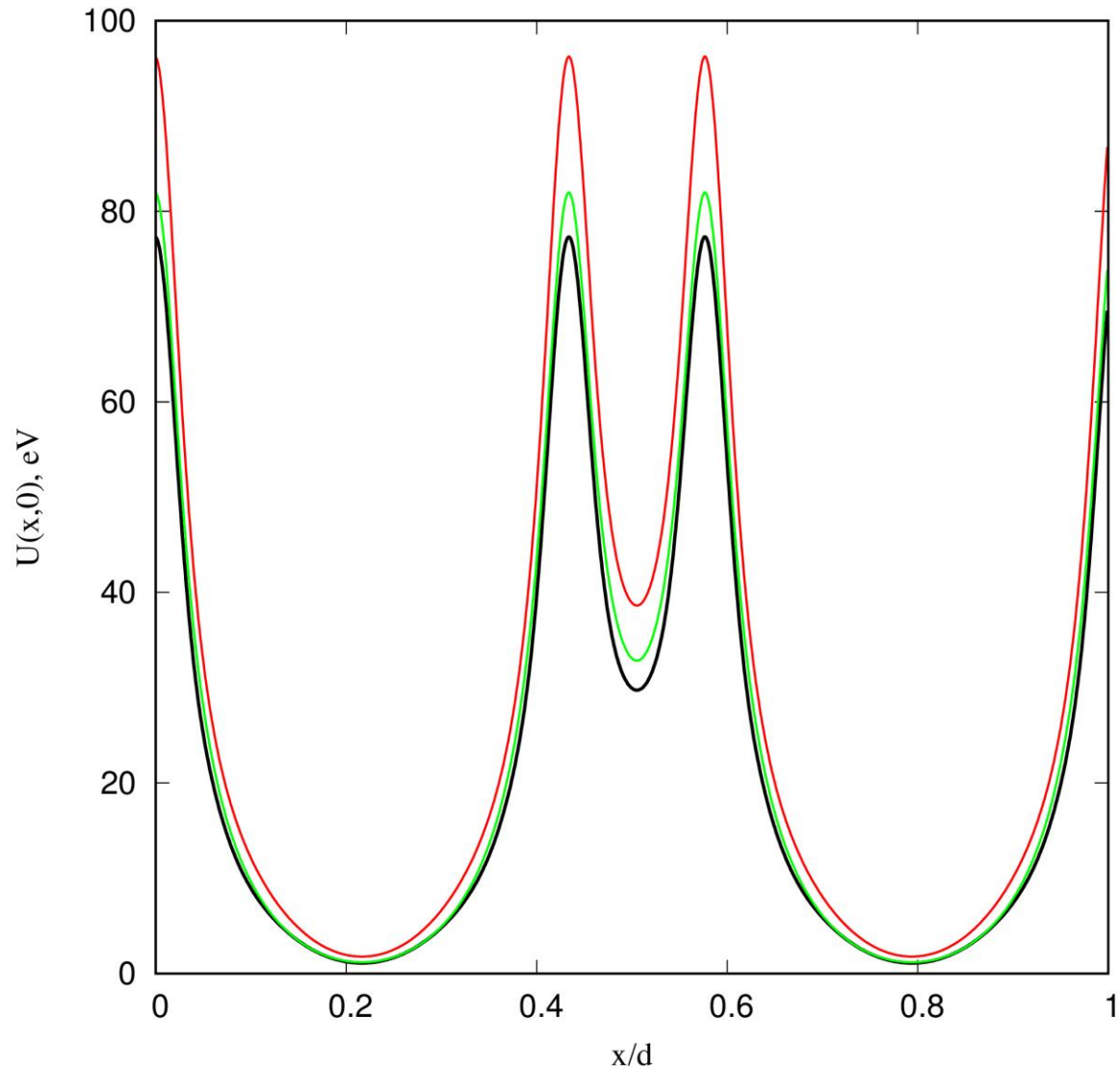


Рис.3. Непрерывный потенциал взаимодействия для $\langle 110 \rangle$ кристалла кремния при $T=300\text{K}$ в приближении Хартри-Фока – **сплошная красная линия**; приближении Дойля-Тёрнера – **сплошная черная линия**; приближении Мольера – **сплошная зеленая линия**.

Fig.3. The continuous interaction potential for $\langle 110 \rangle$ silicon crystals at $T=300\text{K}$ in the Hartree-Fock approximation is a **solid red line**; in the Doyle–Turner approximation, it is a **solid black line**; in the Moliere approximation, it is a **solid green line**.

Результаты расчетов

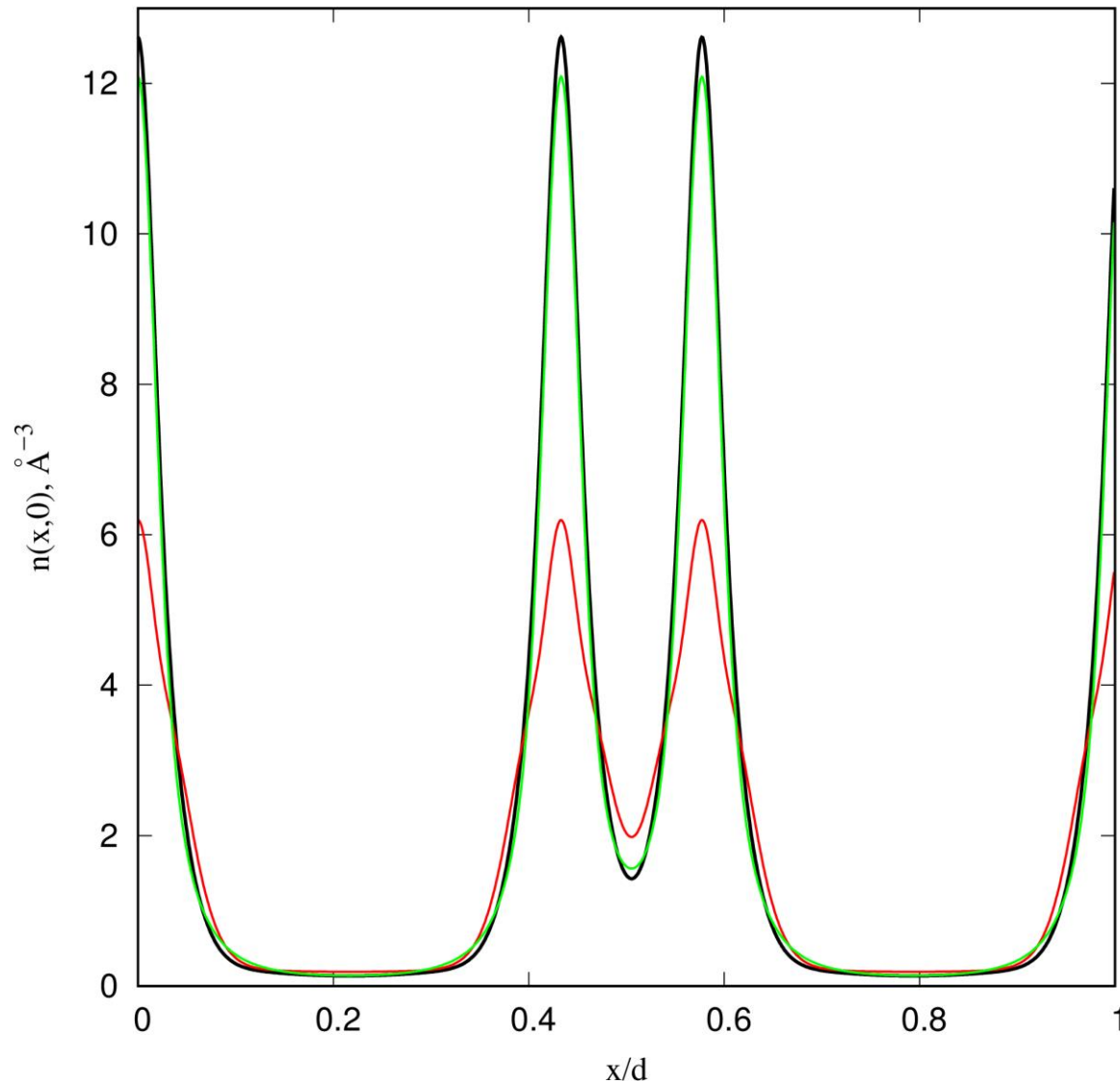
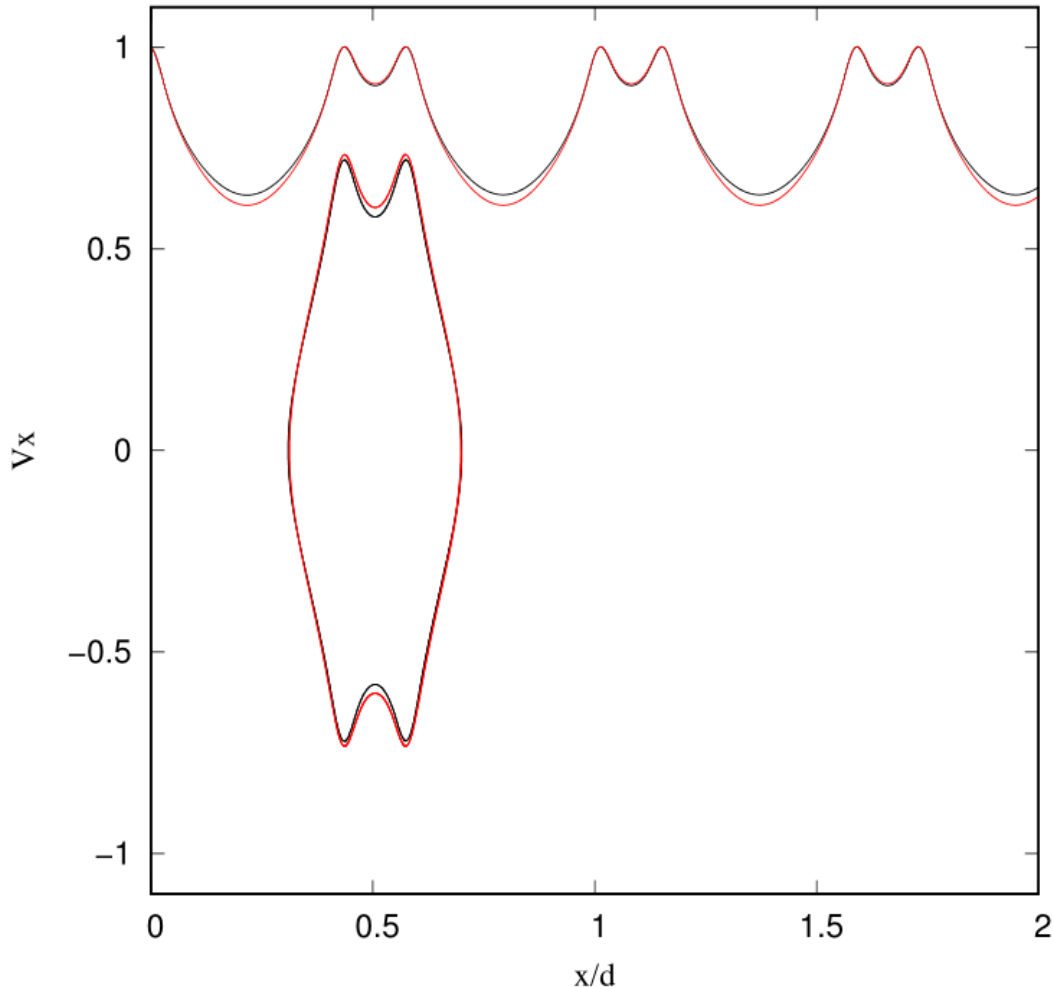


Рис.4. Электронная плотность для <110> кристалла кремния при $T=300\text{K}$ в приближении Хартри-Фока – **сплошная красная линия**; приближении Дойля-Тёрнера – **сплошная черная линия**; приближении Мольер – **сплошная зеленая линия**.

Fig.4. The electron density for <110> silicon crystals at $T=300\text{K}$ in the Hartree-Fock approximation is a **solid red line**; in the Doyle–Turner approximation, it is a **solid black line**; in the Moliere approximation, it is a **solid green line**.

Результаты расчетов



- **Рис.5.** Траектории надбарьерных и подбарьерных частиц для электронов с энергией 855 МэВ в (111) плоскостном канале кремния. **Сплошной красной линией** обозначен расчет для приближения Хартри-Фока, а **сплошной черной линией** – приближения Дойля-Тёрнера.
- **Fig.5.** Trajectories of sup-barrier and sub-barrier particles for electrons with an energy of 855 MeV in a (111) planar channels by silicon. The **solid red line** shows the calculation for the Hartree-Fock approximation, and the **solid black line** shows the Doyle-Turner approximation.

Результаты расчетов

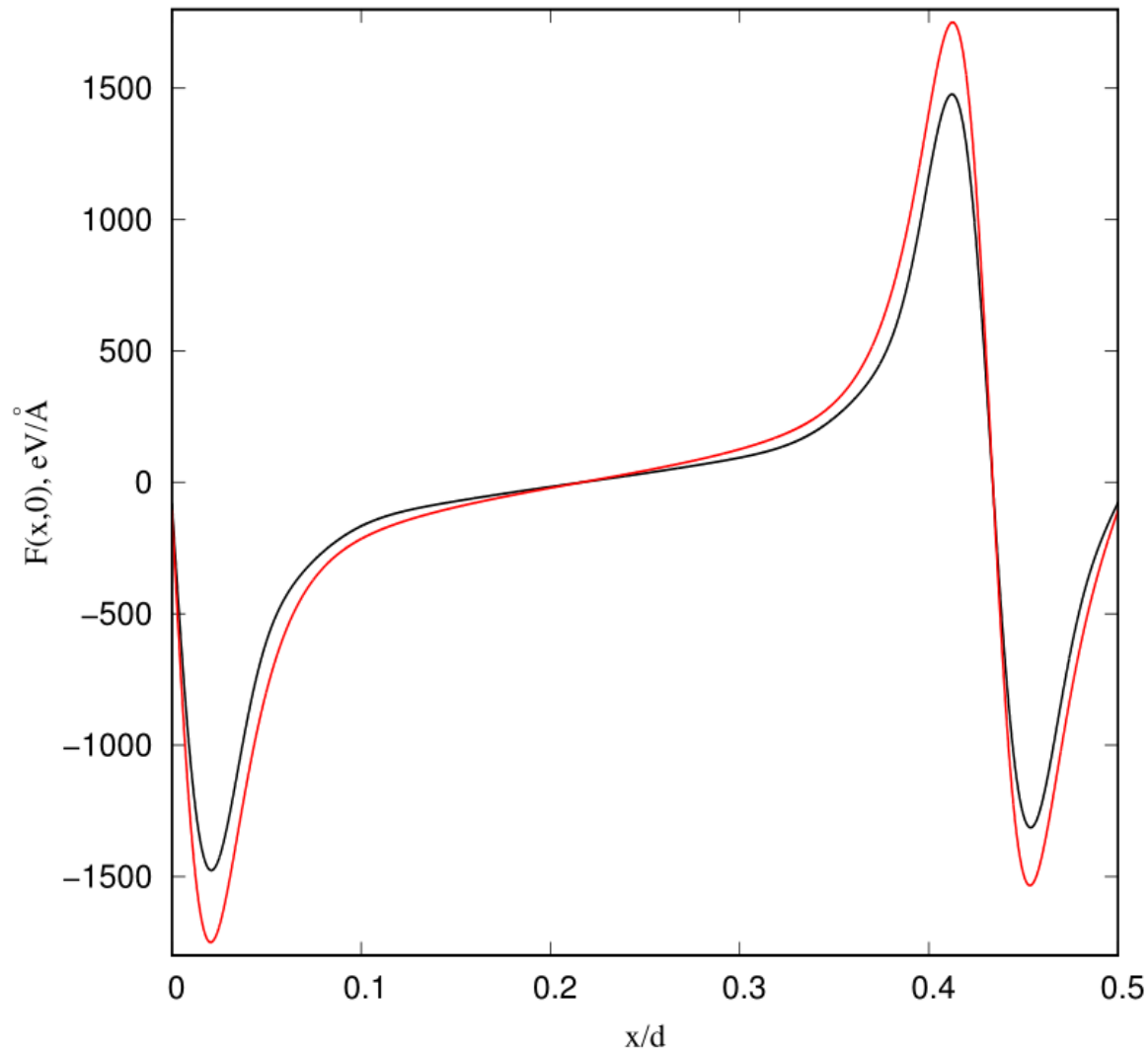


Рис.6. Сила взаимодействия $F(x, y) = -\partial U(x, y)/\partial x$ для электронов с энергией 855 МэВ в (111) плоскостном канале кремния. **Сплошной красной линией** обозначен расчет для приближения Хартри-Фока, а **сплошной черной линией** – приближения Дойля-Тёрнера.

Fig.6. The force of interaction $F(x, y) = -\partial U(x, y)/\partial x$ for electrons with an energy of 855 MeV in a (111) planar channel by silicon. The **solid red line** indicates the calculation for the Hartree-Fock approximation, and the **solid black line** indicates the Doyle-Turner approximation.

Результаты расчетов

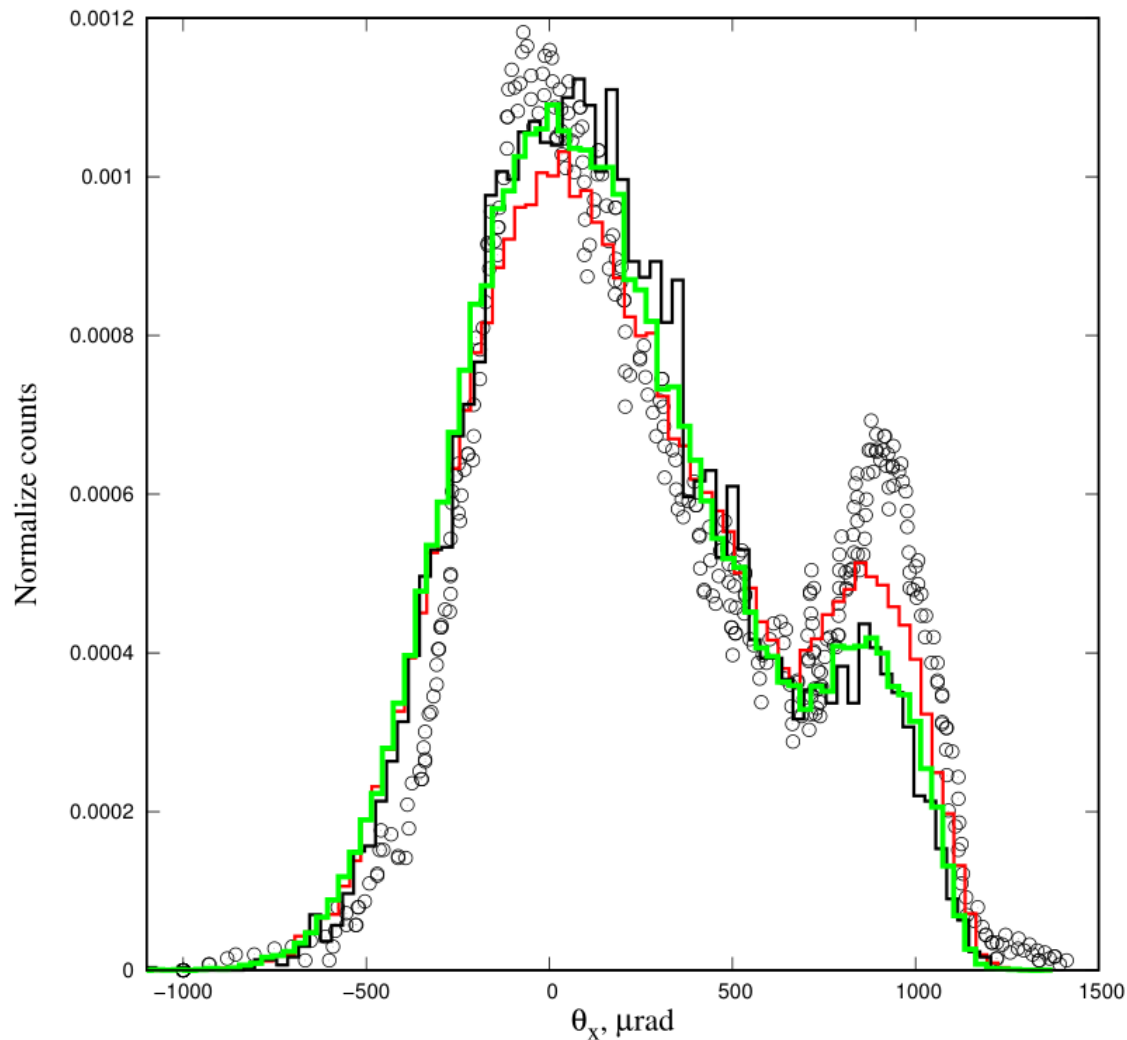


Рис.7. Угловое распределение пучка электронов с энергией 855 МэВ в (111) плоскостном канале кремния. Радиус изгиба кристалла равен 33.5 мм. На рисунке обозначены: эксперимент [4] кружками; результаты компьютерного моделирования:

- в приближении Хартри-Фока – **сплошная красная линия** ($L=30.5\text{мкм}$);
- приближении Дойля-Тёрнера – **сплошная черная линия** ($L=30.5\text{мкм}$);
- приближении Мольер – **сплошная зеленая линия** ($L=30.5\text{мкм}$).

Разрешение детектирующей системы 30мкрад.

Результаты расчетов

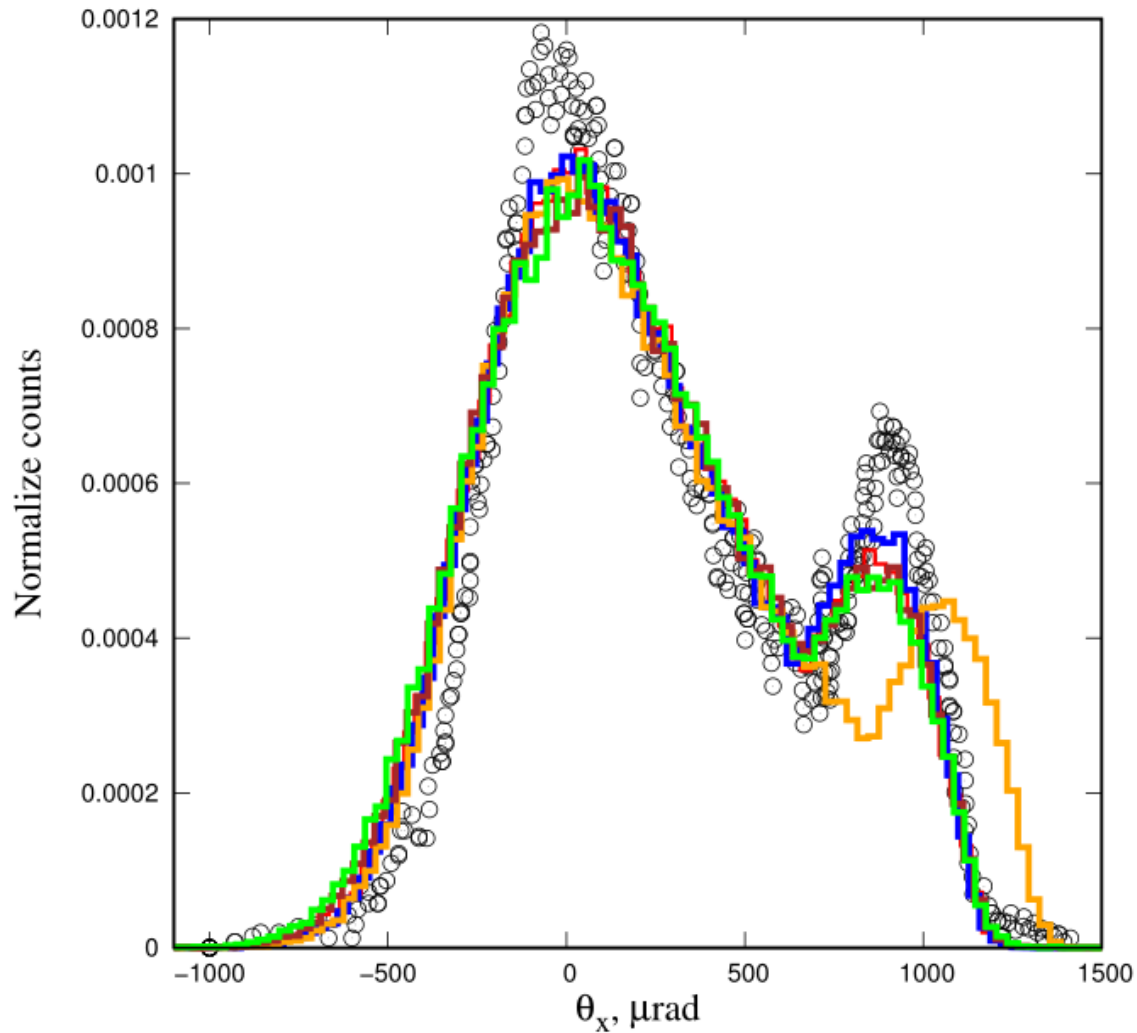


Рис.8. Угловое распределение пучка электронов с энергией 855 МэВ в (111) плоскостном канале кремния. На рисунке обозначены: эксперимент [4] кружками; результаты компьютерного моделирования в приближении Хартри-Фока с углом отклонения 910 мкрад:

1. **синяя линия** ($L=27\mu\text{м}$);
2. **красная линия** ($L=30.5\mu\text{м}$);
3. **коричневая линия** ($L=33.5\mu\text{м}$);
4. **зеленая линия** ($L=36.5\mu\text{м}$);

И с углом отклонения 1098 мкрад **оранжевая линия** ($L=27\mu\text{м}$).

Разрешение детектирующей системы 30мкрад.

Литература

1. *В. П. Кощев, Д. А. Моргун, Т. А. Панина, Ю. Н. Штанов.* Компьютерное моделирование стохастической динамики эффекта каналирования – Сургут : ООО "Печатный мир", 2017. – 170 с. – (25 лет СурГУ). – ISBN 978-5-6040248-5-0. – EDN YQWUHJ.
<https://elibrary.ru/item.asp?id=36608128>
2. *Clementi E., Roetti C.* // Atomic Data Nucl. Data Tables. 1974. V. 14. № 3. P. 177. [https://doi.org/10.1016/S0092-640X\(74\)80016-1](https://doi.org/10.1016/S0092-640X(74)80016-1)
3. *Mazzolari A. et al.* Steering of a Sub-GeV Electron Beam through Planar Channeling Enhanced by Rechanneling // Phys. Rev. Lett. 2014. V. 112. P. 135503. DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.112.135503>

Дополнительные материалы к статье размещены в
<http://wwwinfo.jinr.ru/programs/jinrlib/tropics/index.html>



Спасибо за внимание!

Для связи

Кошечев Владимир Петрович E-mail: koshcheev1@yandex.ru тел.: +7985-476-16-19 [elibrary](#)

Штанов Юрий Николаевич E-mail: yuran1987@mail.ru тел.: +7922-417-40-22 [elibrary](#)