

## بررسی تابش کانالی صفحه ای بوسیله الکترونهای نسبیتی در ساختارهای مختلف بلور SiC

کروجی سودابه\*، آزادگان بهنام

دانشگاه حکیم سبزواری، گروه فیزیک

### چکیده

توزیع طیف تابش کانالی توسط الکترونهای نسبیتی در صفحات مختلف از ساختارهای متفاوت بلور کریید سیلیکون (SiC) مانند Hexagonal (h) (۴h)، zinclend (۳C) و rhombohedral (۹R) ارائه شده است. برای هر ساختار صفحاتی را که تابش کانالی برای آن امکان پذیر باشد پیدا کرده ایم. با استفاده از تقریب دوپلی-تورنر و با احتساب ارتعاشات گرمائی اتمها، پتانسیلهای پیوسته برای ساختارهای مختلف بلور SiC محاسبه شده اند. در الکترونها با انرژی کمتر از ۱۰۰ مگا الکترون ولت محاسبات به صورت کوانتومی و با انرژی بالاتر از ۱۰۰ مگا الکترون ولت محاسبات به صورت کلاسیکی می باشد.

واژه های کلیدی: تابش کانالی، پتانسیل پیوسته، حالت های مقید، بلور کریید سیلیکون

### مقدمه

تابش کانالی به وسیله ذرات باردار نسبیتی در مدت عبورشان از میان یک تک بلور، که موازی با یک صفحه یا محور بلور است، گسیل می شود [۱-۲]. مطالعه تابش کانالی توسط ذرات باردار نسبیتی عموماً از بلورهای تک اتمی مانند الماس، سیلیکون، ژرمانیم و از فلزاتی از قبیل (Be, Ni, Sb) انجام شده است و از بلورهای چند اتمی مانند (LiH, LiF) به ندرت استفاده شده است.

اکثر این بلورها دارای ساختار مکعبی هستند. در چنین بلورهائی، تابش های قوی ناشی از صفحات (۱۰۰)، (۱۱۰) و (۱۱۱) می باشند. اما در بلور SiC تابش کانالی برای صفحاتی با شاخص های بالاتر که پتانسیل های عمیق دارند امکان پذیر است.

### تئوری

تابش کانالی هنگامی رخ می دهد که باریکه الکترونهای نسبیتی در جهتی نزدیک به محور یا صفحه بلور وارد تک بلور گردد. در تابش کانالی صفحه ای، چون پتانسیل آن یک بعدی است حرکت ذره به دو مولفه طولی و عرضی تقسیم می شود. در حرکت طولی چون الکترون تحت تاثیر نیرو قرار نمی گیرد، سرعت آن ثابت است ( $v \approx c$ ). تحت شرایط کانالی (زاویه فرودی الکترونها  $\theta$  نسبت به صفحات کریستال کوچک است) مولفه عرضی  $p_x$ ، در مقایسه با  $p_z$  کوچک است و بنابراین انرژی عرضی به صورت زیر تعریف می شود:



$$, \quad (1) E_x = \frac{p_x^2}{2m\gamma} + V(x)$$

که در آن  $m\gamma$  جرم نسبیتی می باشد. چون پتانسیل تناوب شبکه ای دارد نوشتن آن به صورت سری فوریه عمومی ترین شکل پتانسیل پیوسته است که منجر به رابطه زیر می شود:

$$, \quad n = \dots, -1, 0, 1, 2, \dots \quad (2) V(x) = \sum_n V_n e^{ingx}$$

که  $V_n$  نشانگر ضرایب فوریه پتانسیل پیوسته است. با استفاده از تقریب دوپلی-تورنر [۳] برای برهمکنش الکترون-اتم، این ضرایب به صورت زیر بیان می شوند:

$$(3) V_n = -\frac{2\pi}{V_c} a_0^2 (e^2 / a_0) \sum_j e^{-M_j(\vec{g})} e^{-i\vec{g} \cdot \vec{r}_j} \sum_{i=1}^4 a_i e^{\left(-\frac{1}{4} \frac{b_i}{4\pi^2} (ng)^2\right)}$$

که  $V_c$  حجم شبکه وارون،  $a$  شعاع بوهر،  $e$  بار الکترون و  $\vec{r}_j$  مختصات  $j$  امین اتم در شبکه واحد را نشان می دهند،  $a_i$  و  $b_i$  ضرایب معلوم هستند و  $M_j(\vec{g}) = \frac{1}{2} g^2 \langle u_j^2 \rangle$  فاکتور دمای والر را نشان می دهد که ارتعاشات حرارتی  $j$  امین اتم با دامنه میانگین مربعی  $\langle u_j^2 \rangle$  را توصیف می کند. فاکتور ساختار بلور است. فاکتور ساختار، آن دسته از شاخص های میلر را که برای آنها بازتاب از سطوح قوی است مشخص می کند. در بلور SiC این شرایط با  $I=0$  برآورده می شود.

### توصیف کلاسیک تابش کانالی صفحه ای

در چارچوب مکانیک کلاسیک، الکترون دارای یک حرکت نوسانی در داخل بلور است که این حرکت نوسانی دارای شتابی است که باعث تابش کانالی می شود. معادله حرکت برای ذره نسبیتی در پتانسیل یک بعدی به فرم زیر است [۳]:

$$(4) \gamma m \ddot{x} = -\frac{\partial V(x)}{\partial x}$$

چگالی انرژی گسیل شده در زاویه فضایی  $d\Omega$  و بازه فرکانس  $(\omega, \omega + d\omega)$  به صورت زیر است:

$$(5) \frac{d^2 E}{d\omega d\Omega} = \frac{e^2}{4\pi^2 c} \left| \int_0^\tau e^{i(\omega t - \vec{k} \cdot \vec{r})} \frac{\vec{n} \times ((\vec{n} - \vec{\beta}) \times \vec{\beta})}{(1 - \vec{\beta} \cdot \vec{n})^2} dt \right|^2$$

که  $\beta = v/c$  سرعت ذره،  $k$  بردار موج،  $n$  بردار واحد در جهت فوتون ساطع شده و  $t$  زمان عبور ذره در طول بلور است.

### توصیف کوانتومی تابش کانالی صفحه ای

در چارچوب مکانیک کوانتومی، حرکت عرضی الکترونهاي کانال زده شده با جرم  $m\gamma$  بوسیله معادله شرودینگر یک بعدی توصیف می شود:



$$(۶) -\frac{\hbar^2}{2m_e\gamma} \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + V(x)\psi(x) = E\psi(x)$$

گذار خود به خود بین حالت‌های مقید، باعث گسیل تابش کانالی می شود. چون پتانسیل به صورت تناوبی است توابع موج در معادله شرودینگر، توابع موج بلاخ هستند:

$$(۷) \psi(x) = e^{ikx} \sum_n c_n e^{ingx}, \quad n = \dots, -1, 0, 1, 2, \dots$$

که  $g$  بردار شبکه معکوس صفحه است. با جایگذاری (۲) و (۷) در معادله (۶)، مساله به حل ویژه مقادیر ماتریس  $A$  که مولفه های آن به صورت زیر است تبدیل می شود:

$$(۸) \begin{aligned} A_{nm} &= V_{n-m} \quad (n \neq m) \\ A_{nn} &= \frac{\hbar^2}{2m\gamma} (k + ng)^2 + V_0 \end{aligned}$$

توزیع انرژی زاویه ای فوتونها در جهت رو به جلو به صورت زیر است [۳]:

$$(۹) \frac{d^3 N_{CR}(i \rightarrow f)}{d\Omega_\gamma dE_\gamma dz} = \frac{\alpha \lambda_c^2}{\pi \hbar c} \int dk E_k^0 \left| \langle \psi_{kf} | d/dx | \psi_{ki} \rangle \right|^2 \frac{(\Gamma_k/2)}{(E_\gamma - E_k^0)^2 + 0.25\Gamma_k^2} P_{ki}(z)$$

### توصیف کوانتومی و کلاسیکی تابش کانالی صفحه ای روی بلور SiC

توصیف کوانتومی و کلاسیکی تابش کانالی بستگی به انرژی الکترونها فرودی و عمق پتانسیل یا به عبارت دیگر بستگی به تعداد حالت‌های مقید دارد. برای الکترونها با انرژی کمتر از ۱۰۰ مگا الکترون ولت تعداد حالت‌های مقید محدود و کم است و پهنای بلاخ نزدیک به لبه چاه بزرگ هستند. در این حالت مکانیک کوانتومی طیف تابشی را توصیف می کند. اما وقتی تعداد حالت‌های مقید زیاد است و پهنای بلاخ نزدیک به لبه چاه کوچک هستند، محاسبات، توسط مکانیک کلاسیکی انجام می پذیرد.

### SiC نوع ۴H

SiC نوع ۴H دارای ساختار هگزاگونال است که شامل ۴ اتم Si و ۴ اتم C در سلول واحد است. این شبکه هگزاگونال متعلق به گروه فضائی  $P6_3mc$  و شماره گروه آن ۱۸۶ می باشد و هر یون Si توسط یک چهار وجهی از یونهای C احاطه شده است و بالعکس. بردارهای اولیه در مختصات دکارتی عبارت اند از:

$$\vec{a}_1 = a\left(\frac{1}{2}\hat{x} - \frac{\sqrt{3}}{2}\hat{y}\right), \quad \vec{a}_2 = a\left(\frac{1}{2}\hat{x} + \frac{\sqrt{3}}{2}\hat{y}\right), \quad \vec{a}_3 = c\hat{z}$$

که بردارهای  $a_1, a_2$  دارای طولهای مساوی بوده و با هم زاویه ۱۲۰ درجه می سازند و بردار  $a_3$  بر این دو بردار عمود است که  $a = 3,0805 \text{ \AA}$  و  $c = 10,0848 \text{ \AA}$  ثابتهای شبکه هستند. بردارهای شبکه وارون عبارت اند

از:

$$\vec{b}_1 = \frac{2\pi}{a}(\hat{x} - \frac{1}{\sqrt{3}}\hat{y}), \quad \vec{b}_2 = \frac{2\pi}{a}(\hat{x} + \frac{1}{\sqrt{3}}\hat{y}), \quad \vec{b}_3 = \frac{2\pi}{c}\hat{z}$$

موقعیت اتمها در سلول واحد به صورت زیر بیان می شود:

$$\begin{aligned} Si(I) &: \{0,0, Z_1 C\}, \{0,0, (Z_1 + 1/2)C\} \\ C(I) &: \{0,0, Z_2 C\}, \{0,0, (Z_2 + 1/2)C\} \\ Si(II) &: \{1/2a, 1/\sqrt{12}a, Z_3 C\}, \{1/2a, -1/\sqrt{12}a, (Z_3 + 1/2)C\} \\ C(II) &: \{1/2a, 1/\sqrt{12}a, Z_4 C\}, \{1/2a, -1/\sqrt{12}a, (Z_4 + 1/2)C\} \end{aligned}$$

صفحات بلور با ۳ شاخص میلر (hkil) مشخص می شوند ( $\vec{i} = -(\vec{h} + \vec{k})$ ) و فاصله بین صفحات با رابطه زیر داده می شود:

$$\frac{1}{d_p^2} = \frac{4}{3} \left( \frac{h^2 + hk + k^2}{a^2} \right) + \frac{l^2}{c^2}$$

عمق پتانسیل و فاصله بین صفحات بستگی به ضرایب میلر دارد.

### SiC نوع ۳C

SiC نوع ۳C دارای ساختار zincblend است که سلول واحد آن شامل یک اتم Si و یک اتم C می باشد. این شبکه متعلق به گروه فضائی  $F\bar{4}3m$  و شماره گروه آن ۲۱۶ می باشد. بردارهای اولیه در مختصات دکارتی عبارتند از:

$$\vec{a}_1 = \frac{1}{2}a(\hat{y} + \hat{z}), \quad \vec{a}_2 = \frac{1}{2}a(\hat{x} + \hat{z}), \quad \vec{a}_3 = \frac{1}{2}a(\hat{x} + \hat{y})$$

و موقعیت اتمها در سلول واحد به صورت زیر می باشد:

$$Si : \{0; 0; 0\}; C : \{1/4a; 1/4a; 1/4a\}$$

### SiC نوع ۹R

SiC نوع ۹R دارای ساختار rhombohedral و متعلق به گروه فضائی  $R\bar{3}m$  می باشد. بردارهای اولیه در مختصات دکارتی به صورت زیر می باشد:

$$\vec{a}_1 = \frac{1}{2}a\hat{x} + \frac{1}{2\sqrt{3}}a\hat{y} + \frac{1}{3}c\hat{z}, \quad \vec{a}_2 = -\frac{1}{2}a\hat{x} + \frac{1}{2\sqrt{3}}a\hat{y} + \frac{1}{3}c\hat{z}, \quad \vec{a}_3 = -\frac{1}{\sqrt{3}}a\hat{y} + \frac{1}{3}c\hat{z}$$

و موقعیت اتمها در سلول واحد عبارتند از:

$$\begin{aligned} C(I) &: \{0,0, x_1 C\}, \{0,0, x_2 C\}, \{0,0, x_3 C\} \\ Si(I) &: \{0,0, x_4 C\}, \{0,0, x_5 C\}, \{0,0, x_6 C\} \end{aligned}$$

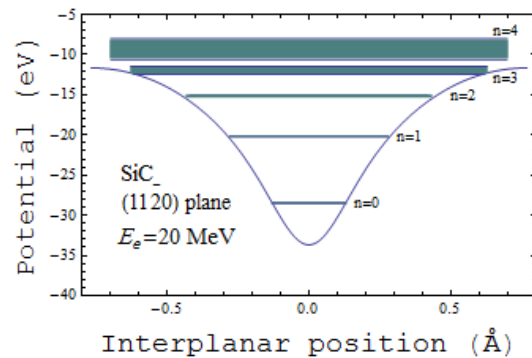
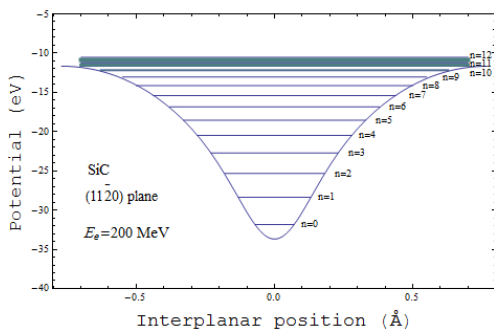
### نتایج

در این قسمت به مقایسه تابش کانالی از ساختارهای مختلف بلور SiC پرداخته می شود. پتانسیل صفحه  $(11\bar{2}0)$  به همراه حالت‌های مقید با پهناهای بلاخ برای الکترونهای ۲۰ MeV و ۲۰۰ MeV در SiC نوع

19 th Iranian's Nuclear Conference

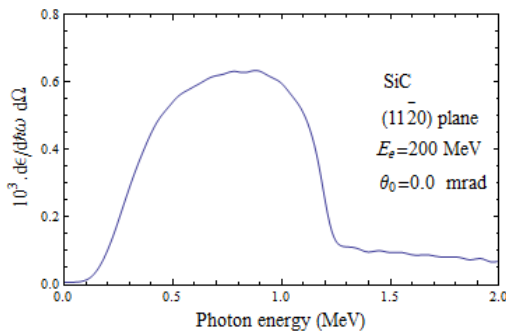
${}^4\text{H}$  در شکل ۱ و ۲ نشان داده شده است. برای انرژیهای  $20\text{ MeV}$  این صفحه دارای ۴ حالت مقید و ۳ گذار است. طیف تابش کانالی آن طبق محاسبات مکانیک کوانتومی در شکل ۳ نشان داده شده است. برای انرژیهای  $200\text{ MeV}$  این صفحه دارای ۱۰ حالت مقید و ۹ گذار است. محاسبه طیف تابش کانالی برای آن به صورت کلاسیکی است و در شکل ۴ نشان داده شده است.

پتانسیل پیوسته محاسبه شده برای صفحه (۱۱۰) همراه با ترازهای انرژی در  $\text{SiC}$  نوع  ${}^3\text{C}$  برای الکترونها با انرژی  $20\text{ MeV}$  در شکل ۵ نشان داده شده است. این صفحه شامل دو چاه پتانسیل با عمقهای متفاوت است که نشان می دهد در این صفحه دو نوع اتم  $\text{Si}$  و  $\text{C}$  وجود دارند. چاه با عمق بیشتر متعلق به اتم  $\text{Si}$  می باشد. در این انرژی ۳ حالت مقید در چاه سمت چپ و یک حالت مقید در چاه سمت راست وجود دارد. طیف تابش آن به صورت کوانتومی در شکل ۶ نشان داده شده است. پتانسیل پیوسته صفحه  $(1\bar{1}0)$  بلور  $\text{SiC}$  نوع  ${}^9\text{R}$  و طیف تابشی آن برای الکترونها با انرژی  $20\text{ MeV}$  به ترتیب در شکل ۷ و ۸ نشان داده شده است.

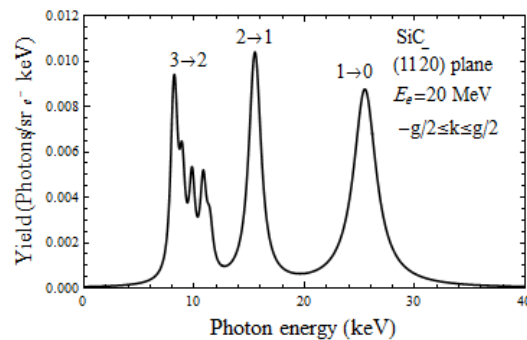


شکل ۲: پتانسیل و ویژه ساختار  ${}^4\text{H}$  برای الکترون

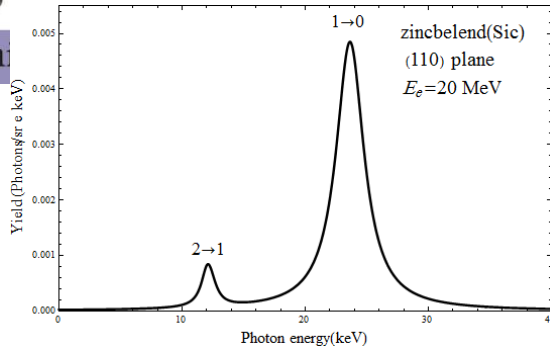
شکل ۱: پتانسیل و ویژه مقادیر صفحه  $(11\bar{2}0)$  ساختار  ${}^4\text{H}$  برای الکترونهای  $20\text{ MeV}$ .



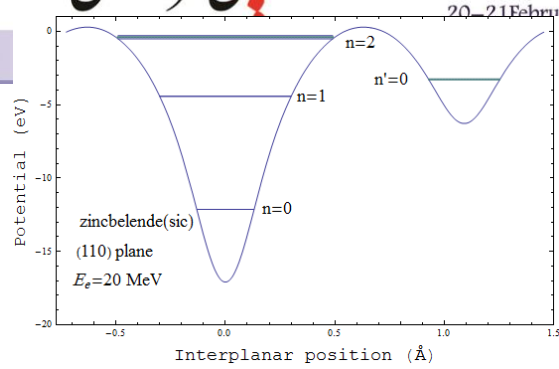
شکل ۴: طیف کلاسیکی تابش کانالی صفحه  $(11\bar{2}0)$  ساختار  ${}^4\text{H}$  برای الکترونهای  $200\text{ MeV}$ .



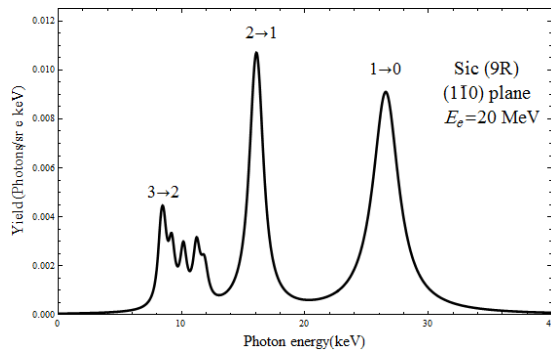
شکل ۳: طیف کوانتومی تابش کانالی صفحه  $(11\bar{2}0)$  ساختار  ${}^4\text{H}$  برای الکترونهای  $20\text{ MeV}$ .



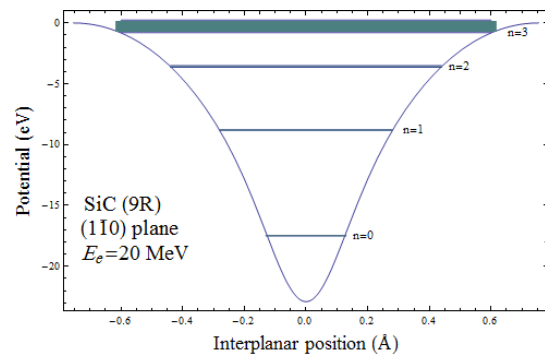
شکل ۶: طیف کوانتومی تابش کانالی صفحه (۱۱۰) ساختار ۳C برای الکترونهاي ۲۰ MeV.



شکل ۵: پتانسیل و ویژه مقادیر صفحه (۱۱۰) ساختار ۳C برای الکترونهاي ۲۰ MeV.



شکل ۸: طیف کوانتومی تابش کانالی صفحه (1 1 0) ساختار ۹R برای الکترونهاي ۲۰ MeV.



شکل ۷: پتانسیل و ویژه مقادیر صفحه (1 1 0) ساختار ۹R برای الکترونهاي ۲۰ MeV.

## نتیجه گیری

توصیف کوانتومی یا کلاسیکی تابش کانالی بستگی به انرژی الکترونهاي فرودی و عمق پتانسیل یا به عبارت دیگر بستگی به تعداد حالتهاي مقید دارد. وقتی تعداد حالتهاي مقید محدود است و پهناهای بلاخ نزدیک به لبه چاه بزرگ هستند مکانیک کوانتومی طیف تابشی را توصیف می کند. وقتی که تعداد حالتهاي مقید زیاد است و پهناهای بلاخ برای حالتهاي که نزدیک به سطح چاه هستند کوچک هستند مکانیک کلاسیک می تواند طیف تابشی را توصیف کند. طیف تابش کانالی برای ساختارهای مختلف بلور SiC محاسبه شده اند. از تابش کانالی می توان به عنوان چشمه اشعه X قوی با قابلیت تنظیم انرژی و شدت استفاده نمود.

## مراجع

- [۱] M.A. Kumakhov, R. Wedell, *Radiation of Relativistic Light Particles during Interaction with Single Crystals* (Spektrum Akademischer Verlag, Heidelberg, ۱۹۹۱).
- [۲] J.U. Andersen, E. Lægsgaard, Phys. Rev. Lett. ۴۴, ۱۰۷۹ (۱۹۸۰).
- [۳] B. Azadegan and S.B. Dabagov, Eur. Phys. J. Plus (۲۰۱۱) ۱۲۶: ۵۸