

ГОУ ВПО «Сургутский государственный университет ХМАО-Югры»

на правах рукописи

Панина Татьяна Александровна

**ВЛИЯНИЕ КВАНТОВЫХ ФЛУКТУАЦИЙ НА ДИНАМИКУ
ЭФФЕКТА ПЛОСКОСТНОГО КАНАЛИРОВАНИЯ ЭЛЕКТРОНОВ,
ПОЗИТРОНОВ И МНОГОЗАРЯДНЫХ ИОНОВ**

Диссертация на соискание учёной степени
кандидата физико-математических наук

Сургут 2010

Основные результаты диссертации опубликованы в работах:

1. Кощев В.П., Моргун Д.А. Панина Т.А. Стохастическая динамика процесса многократного рассеяния и потерь энергии каналированных частиц // Известия РАН. Серия физическая. 2009. Т. 73. №11. С. 1586.
2. Панина Т.А., Кощев В.П., Моргун Д.А., Сафин Н.В. Потенциальная энергия взаимодействия быстрого многозарядного иона с атомами кристалла с учетом принципа Паули // Известия РАН. Серия физическая. 2010. Т. 74. №2. С. 230.
3. Кощев В.П., Моргун Д.А., Панина Т.А. Стохастическая динамика эффекта каналирования в кристаллах и нанотрубках: Монография. – Ханты-Мансийск: Полиграфист. 2008.
4. Панина Т.А. Влияние квантового состояния налетающего иона на потенциальную энергию взаимодействия с атомами кристалла // Материалы VI Окружной конференции молодых ученых «Наука и инновации XXI века». – Сургут: Изд-во СурГУ. 2006.
5. Панина Т.А., Кощев В.П., Моргун Д.А. Потенциальная энергия взаимодействия атома с непрерывным потенциалом плоскостного канала кристалла // Тезисы докладов XXXVI международной конференции по физике взаимодействия заряженных частиц с кристаллами. – М.: Изд-во УНЦ ДО. 2006. С. 37.
6. Панина Т.А., Кощев В.П., Моргун Д.А. Моделирование движения быстрых ионов в осевых каналах кристалла // Тезисы докладов XXXVII международной конференции по физике взаимодействия заряженных частиц с кристаллами. – М.: Университетская книга. 2007. С. 51.
7. Панина Т.А., Кощев В.П. Потенциальная энергия взаимодействия быстрого многозарядного иона с атомами кристалла // Труды XVIII международной конференции «Взаимодействие ионов с поверхностью». – М.: Изд-во ИТЦ МАТИ. 2007. Т. 1. С. 314.

8. Кощев В.П., Панина Т.А., Моргун Д.А. Влияние квантовых флуктуаций на стохастическую динамику эффекта каналирования // Тезисы докладов XXXVIII международной конференции по физике взаимодействия заряженных частиц с кристаллами. – М.: Университетская книга. 2008. С. 48.
9. Панина Т.А., Кощев В.П., Моргун Д.А. Моделирование траекторий каналированных частиц в пространстве поперечных энергий в осевых каналах кристалла // Тезисы докладов XXXVIII международной конференции по физике взаимодействия заряженных частиц с кристаллами. – М.: Университетская книга. 2008. С. 49.
10. Панина Т.А., Кощев В.П., Моргун Д.А. Основные уравнения теории осевого каналирования // Материалы VII Окружной конференции молодых ученых «Наука и инновации XXI века». – Сургут: Изд-во СурГУ. 2008. С. 16
11. Панина Т.А., Кощев В.П., Моргун Д.А., Сафин Н.В. Моделирование нагрева и охлаждения многозарядных ионов в плоскостных каналах кристалла // Тезисы докладов XXXIX международной конференции по физике взаимодействия заряженных частиц с кристаллами. – М.: Университетская книга. 2009. С. 47.
12. Панина Т.А., Моргун Д.А., Кощев В.П., Сапожникова Е.С. Моделирование траекторий протонов в $\langle 100 \rangle$ осевом канале кристалла кремния // Тезисы докладов XXXIX международной конференции по физике взаимодействия заряженных частиц с кристаллами. – М.: Университетская книга. 2009. С. 48.
13. Панина Т.А., Кощев В.П., Моргун Д.А., Сафин Н.В. Потенциальная энергия взаимодействия быстрого многозарядного иона с атомами кристалла с учетом принципа Паули // Труды XIX международной конференции «Взаимодействие ионов с поверхностью». – М.: Изд-во Галлея-принт. 2009. Т. 1. С. 252.
14. Кощев В.П., Моргун Д.А., Панина Т.А. Стохастическая динамика процесса многократного рассеяния и потерь энергии каналированных частиц

// Тезисы докладов 58 международного совещания по ядерной спектроскопии и структуре атомного ядра «Ядро 2008». — С.-П. 2008. С.253.

Введение

Теория каналирования основана на уравнении диффузионного типа, впервые введенного Й. Линдхардом [1] (см. также, например, [2], [3], [4], [5]). Позже Ю. В. Мартыненко для описания эффекта каналирования предложил использовать кинетическое уравнение Фоккера-Планка в пространстве поперечных энергий [6] (см. также, например, [7], [8], [9]). В 1973 году в работе [10] для этих же целей было предложено уравнение Фоккера-Планка в пространстве поперечных координат и скоростей. Перечисленные уравнения связаны с понятием коэффициента диффузии, который из различных принципов получен в [1] и [10].

При движении частицы внутри кристалла ее траектория определяется непрерывным потенциалом атомной цепочки или атомной плоскости, который в свою очередь связан с понятием потенциальной энергии взаимодействия налетающей частицы с атомом кристалла. В обзоре [11] рассмотрены парные межатомные потенциалы взаимодействия и взаимодействие ионов с атомами твердых тел. Актуальны вопросы, связанные с потенциалом взаимодействия ион-атом при произвольной степени ионизации, энергии налетающих ионов и при различных комбинациях партнеров соударения.

Прохождение заряженных частиц через кристалл сопровождается различными явлениями. В работе затрагиваются явления нагрева и охлаждения заряженных частиц в каналах кристалла и резонансное когерентное возбуждение орбитального электрона иона, движущегося в плоскостном канале.

В [12] представлено экспериментальное свидетельство перераспределения начального изотропного потока частиц после прохождения через тонкий кристалл. Наблюдалось увеличение и уменьшение потока частиц в осевых и плоскостных направлениях в зависимости от условий эксперимента. Для этих явлений были введены термины поперечное охлаждение и поперечный нагрев, отображающие тот факт, что увеличение потока вдоль осевого или плоскостного направлений вызывается уменьшением поперечной энергии иона и поток уменьшается в результате увеличения поперечной энергии (нагрев).

В [13] приведены экспериментальные данные, связанные с эффектами нагрева и охлаждения. Проведены измерения для различных ионов в большом диапазоне ионных энергий. Использование различных кристаллов позволяет изучить зависимость эффектов от атомного номера атомов кристалла. Изменение ориентации кристалла позволяет рассмотреть зависимость эффекта от размеров канала и интенсивности потенциала каналирования. Измерения, проводимые с кристаллами различной толщины, показывают усиление эффекта с увеличением длины пути иона в кристалле.

На начальном этапе эффекты нагрева и охлаждения не воспроизводились с помощью компьютерного моделирования. В [13] сообщается о компьютерном моделировании, результаты которого впервые демонстрировали эффекты нагрева и охлаждения. nN-СТМС моделирование описывает взаимодействие иона с двумя параллельными цепочками из N атомов кристалла, каждый из которых содержит n электронов. Введен учет многократных столкновений иона с атомом.

Качественное объяснение эффектов нагрева и охлаждения может быть получено на основе зарядово-обменной модели [12]. В [14] предлагается объяснение эффектов нагрева и охлаждения в рамках единых модельных представлений, связанных с перезарядкой.

В работе [15] разработана кинетическая теория прохождения многозарядных тяжелых ионов, учитывающая диффузию в пространстве

поперечных импульсов и обмен зарядом между кристаллом и ионом. В дальнейшем был проведен численный анализ кинетических уравнений [16]. Расчеты производились для изотропных пучков многозарядных ионов Al и Y каналированных в кристалле Si вдоль оси $\langle 100 \rangle$. Показано, что переход от охлаждения к нагреву изотропного пучка тяжелых многозарядных ионов зависит не только от энергии ионов, но и от глубины их проникновения в кристалл.

При каналировании ионов вдоль плоскостей или осей кристалла можно подобрать условия, при которых частота «соударений» иона с атомами кристалла равна частоте перехода между уровнями энергии орбитального электрона (или в целое число раз больше нее). В этом случае возможен резонансный переход электрона в соответствующее возбужденное состояние. Существование эффекта было предсказано В.В. О कोरोковым и носит название резонансного когерентного возбуждения (resonant coherent excitation, RCE) [17], [18].

Первые экспериментальные подтверждения эффекта связаны с каналированием нерелятивистских ионов. Сообщается о наблюдении когерентного резонансного возбуждения водородоподобного иона He^+ с переходом электрона из основного состояния с $n=1$ в возбужденное с $n=4$. Движение ионов происходило в монокристаллической пленке серебра [19]. Эксперименты по прохождению водородоподобных ионов с Z от 5 до 9 и гелийподобных ионов F^{7+} в различных осевых направлениях кристаллов Ag и Au описаны в [20] и [21]. Здесь осуществлялся переход орбитального электрона из основного состояния с $n=1$ в возбужденное с $n=2$.

С конца 90-ых годов прошлого столетия сообщается о резонансном когерентном возбуждении релятивистских водородоподобных ионов аргона в режиме плоскостного каналирования в кристалле кремния. Известны работы по резонансному возбуждению электрона из состояния $1s$ в состояние с $n=2$ [22], [23], из состояния $1s$ в состояние с $n=3$ [24]. Аналогичные эксперименты

проводились с гелийподобными ионами аргона. Так же известны работы с ионами Fe^{25+} и Fe^{24+} .

В экспериментах измерялись зарядовые распределения ионов, пролетевших кристалл и (или) интенсивность лучей, испускаемых ионами при высвечивании возбужденного состояния, возникающего внутри кристаллической мишени.

На протяжении всего времени изучения эффекта Окорокова развиваются методы вычисления функции вероятности резонансного когерентного возбуждения, и производится сравнение численных результатов с результатами экспериментов [25], [26], [27], [28]. Методами компьютерного моделирования произведено исследование влияния тонкой структуры энергетических уровней орбитальных электронов иона Ar^{17+} на вероятность резонансного когерентного возбуждения [29]. Произведен учет спиновых эффектов, возникающих при плоскостном каналировании позитронов [30].

В [31] сообщается о наблюдении резонансного когерентного возбуждения вне условий каналирования. Теперь для резонансного когерентного каналирования в условиях осевого каналирования используется термин 1D RCE, в условиях плоскостного каналирования — 2D RCE, вне условий каналирования — 3D RCE.

В обзоре [32] отмечается малая изученность каналирования отрицательно заряженных частиц как теоретически, так и экспериментально. Это связано с малой длиной деканалирования. Решение видится в использовании коротких кристаллов и пучков частиц с высокими энергиями. Информация о каналировании позитронов актуальна в виду запуска международного линейного коллайдера.

Задача вычисления квантовых поправок к классическим уравнениям движения быстрых заряженных частиц в кристаллах [33] и во внешних полях [34] — актуальная физическая задача настоящего времени.

Список литературы к введению

1. Линдхард Й. // УФН. 1969. Т. 99. №2. С. 249.
2. Bonderup E., Esbensen H., Andersen J.U. et al. // Rad. Effects. 1972. V.12. P. 261.
3. Sun C.R., Gibson W.M., Kim I.J. et al. // Nucl. Instrum. Methods. 1982. V. 194. P. 125
4. Fuschini E., Uguzzoni A., Gartner K. et al. // Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. 1985. B. 12. P. 334.
5. Uguzzoni A., Fuschini E., Gartner K. et al. // Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. 1986. B. 13. P. 32.
6. Мартыненко Ю.В. // ФТТ. 1971. Т. 13. №4. С. 1055.
7. Oshiyama T., Mannami M. // Phys. Lett. 1981. V. 81A. №1. P. 43.
8. Bater V.N., Katkov V.M., Strakhovenko V.M. // Phys. Stat. Sol. (b). 1983. V. 118. P. 499.
9. Кашлев Ю.А., Садыков Н.М. // Теоретическая и математическая физика. 1983. Т. 54. №3. С. 456.
10. Kitagava M., Ohtsuki Y.H. // Phys. Rev. B. 1973. V. 8. №7. P. 3117.
11. Дедков Г.В. // УФН. 1995. Т. 165. №8. С. 919.
12. Assmann W., Huber H., Karamian S.A. et al. // Phys. Rev. Lett. 1999. V. 83. №9. P. 1759.
13. Grüner F., Assmann W., Bell F. et al. // Phys. Rev. 2003. B 68. 174104.
14. Гранкина Т.В., Похил Г.П., Чердынцев В.В. // Поверхность. Рентген., синхротр. и нейтрон. исслед. 2005. №4. С. 22.
15. Малышевский В.С., Рахимов С.В. // ЖТФ. 2007. Т. 77. В. 4. С.1.
16. Малышевский В.С., Рахимов С.В. // ПЖТФ. 2007. Т. 33. В. 16. С.1.
17. Огороков В.В. // ПЖТФ. 1965. Т.2. №4. С. 175.
18. Огороков В.В. // УФН. 2003. Т. 173. №4. С. 447.

19. Огороков В.В., Толченков Д.Л., Хижняков И.С. и др. // ПЖТФ. 1972. Т.16. №11. С. 588
20. Datz S., Moak C.D., Crawford O.H. et al. // Phys. Rev. Lett. 1978. V. 40. №13. P. 843.
21. Moak C.D., Datz S., Crawford O.H. et al. // Phys. Rev.A. 1979. V. 19. P. 977.
22. Azuma T., Ito T., Yamazaki Y. et al. // Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. 1998. B 135. P. 61.
23. Ito T., Takabayashi Y., Komaki K. et al. // Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. 2000. B 164-165. P. 68.
24. Azuma T., Ito T., Takabayashi Y. et al. // Physica Scripta. 2001. T. 92. P. 61.
25. Shindo S., Ohtsuki Y.H. // Phys. Rev. B. 1976. V 14. №9. P. 3929.
26. Yamashita Y., Ohtsuki Y.H. // Phys. Rev. B. 1980. V 22. №3. P. 1183.
27. Кривошеев О.Э., Пивоваров Ю.Л. // ПЖТФ. 1992. Т.56. №5. С. 246.
28. Komaki K., Azuma T., Ito T. et al. // Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. 1998. B 146. 19.
29. Бабаев А.А., Пивоваров Ю.Л. // Поверхность. Рентген., синхротр. и нейтрон. исслед. 2008. №3. С. 87.
30. Кунашенко Ю.П. // Поверхность. Рентген., синхротр. и нейтрон. исслед. 2008. №10. С. 77.
31. Kondo C., Masugi S., Nakano Y. et al. // Phys. Rev. Lett. 2006. V. 97. 135503.
32. Richard A. Carrigan, Jr. // Fermilab, 2009. FERMILAB-CONF-09-618-AD, 2009. 15pp.
33. Uggerhoj U.I. // Rev.Mod.Phys. 2005. V. 77. P. 1131.
34. Mane S.R., Shatunov Yu.M., Yokoya K. // Rep.Prog.Phys. 2005. V. 68. P. 1997.

Глава 1

Теория плоскостного каналирования

1.1. Каналирование заряженных частиц

1.2. Геометрия кристаллов

1.3. Уравнения движения теории плоскостного каналирования

1.4. Уравнение эволюции флуктуаций поперечной энергии каналированных частиц

1.5. Уравнение Фоккера-Планка

1.6. Коэффициент диффузии

1.6.1. Усреднение корреляционной функции флуктуаций потенциальной энергии взаимодействия каналированной частицы с ядрами атомов кристалла

1.6.2. Усреднение корреляционной функции флуктуаций потенциальной энергии взаимодействия каналированной частицы с атомными электронами кристалла

1.6.3. Компонента $D_{xx}(x)$ коэффициента диффузии

1.6.4. Компонента D_{xy} x коэффициента диффузии

1.6.5. Компонента D_{yx} x коэффициента диффузии

1.6.6. Компонента D_{yy} x коэффициента диффузии

1.7 Моделирование процессов, связанных с каналированием

Глава 1

Теория плоскостного каналирования

1.1. Каналирование заряженных частиц

Каналирование заряженных частиц — движение заряженных частиц внутри монокристалла вдоль «каналов», образованных параллельными рядами атомов или плоскостей. Каналирование заряженных частиц было предсказано М. Т. Робинсоном (М. Т. Robinson) и О. С. Оэном (O. S. Oen) в 1961 и обнаружено в 1963 году. Различают осевое (аксиальное) и плоскостное каналирование.

Осевое каналирование наблюдается, когда пучок быстрых заряженных частиц падает на монокристалл под малым углом к одной из кристаллографических осей. При этом положительно заряженная быстрая частица, приближаясь к одной из цепочек атомов, параллельных кристаллографической оси, в результате серии последовательных актов слабого рассеяния на упорядоченно расположенных атомах как бы плавно искривляет свою траекторию так, что наблюдается почти зеркальное отражение частицы от цепочки ($\theta_1 \approx \theta_2$; рис. 1.1.1, кривая *a*). Из теории следует, что такого рода «зеркальность» наблюдается при $\theta_1 < \theta_L$, где θ_L — угол Линдхарда, который определяется соотношением:

$$\theta_L = \sqrt{\frac{2Z_1Z_2e^2}{El}}.$$

Здесь Z_1e , Z_2e — заряды движущейся частицы и ядра атома монокристалла, E — энергия частицы, l — расстояние между соседними атомами в цепочке. При таком движении частица в течение всего времени удерживается вдали от ядер, находящихся на оси цепочки. При увеличении θ_1 до значения $\theta_1 > \theta_L$ характер движения изменяется. Частица может испытывать близкие столкновения с ядрами, в результате которых она рассеивается на большой угол (рис. 1.1.1, кривая \bar{b}) и далее движется так же, как в неупорядоченной среде. Угол θ_L составляет величину порядка долей градуса. В толще кристалла частица, движущаяся в режиме осевого каналирования, испытывает последовательные акты «зеркального» отражения от разных цепочек. В поперечной плоскости движение такой частицы в общем случае представляет случайное блуждание (рис. 1.1.2).

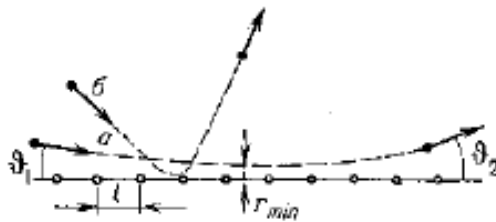


Рисунок 1.1.1. Траектории заряженных частиц в кристалле при угле падения на грань кристалла $\theta_1 < \theta_L$ (кривая a) и при $\theta_1 > \theta_L$ (кривая \bar{b})

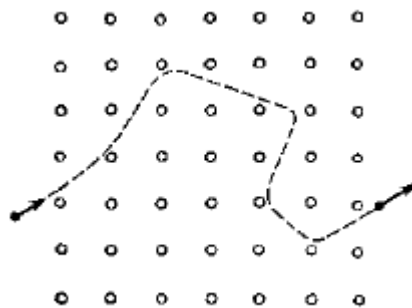


Рисунок 1.1.2. Движение частицы в режиме осевого каналирования в толще кристалла

Плоскостное каналирование наблюдается при падении пучка под малым углом к кристаллографической плоскости. В этом случае частицы попеременно отражаются от соседних плоскостей, их траектории

напоминают синусоиду (рис. 1.1.3). При этом частица также удерживается вдали от ядер.

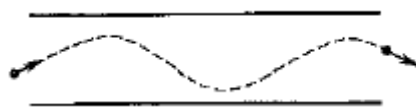


Рисунок 1.1.3. Плоскостное каналирование

Частица, находящаяся в режиме каналирования, теряет меньше энергии, так как она испытывает меньшее количество соударений с отдельными атомами. Траектория каналированной частицы гораздо ближе к прямой линии, чем траектория любой другой частицы движущейся в кристалле по зигзагообразному пути.

Наряду с каналированием может наблюдаться явление деканалирования — выход заряженной частицы из режима каналирования из-за многократного рассеяния на электронах и тепловых флуктуаций атомных ядер. В свою очередь, неканалированные частицы могут так же претерпевать случаи рассеяния и стать каналированными. Это явление называют реканалированием. Центральной точкой теории каналирования является так называемое правило обратимости, из которого следует что вероятности де- и реканалирования равны, если энергией потерь можно пренебречь. Это предсказание было подтверждено в экспериментах с ГэВ протонами, где условие пренебрежения энергией потери было соблюдено.

В работе [1] проведен теоретический анализ эффекта каналирования. Отклонение заряженной частицы в каналах кристалла происходит благодаря ядерным столкновениям, которые сопровождаются большей передачей энергии и импульса, чем при электронных столкновениях. Электронные соударения сопровождаются малой передачей импульса, так как электроны являются легкими частицами. При электронных соударениях частица возбуждает или вырывает электроны атомов, теряя при этом энергию. Рассмотрение эффекта каналирования производится в рамках малоуглового

рассеяния, так как рассеяние на большие углы приводит к полной потере первоначального направления. Движение частиц в кристалле под малыми углами к атомным рядам и плоскостям в первом приближении описывается непрерывным потенциалом. Основа непрерывного приближения заключается в предположении, что в отклонение траектории дают вклад много последовательных атомов. Непрерывный потенциал бесконечной атомной цепочки на расстоянии r от оси цепочки имеет вид:

$$\overline{U}_s(r) = \int_{-\infty}^{\infty} \left\langle V(R = \sqrt{z^2 + r^2}) \right\rangle_T \frac{dz}{d},$$

где $V(R)$ — потенциал взаимодействия ядро-атом, ион-атом или атом-атом, $r^2 = x^2 + y^2$, d — расстояние между атомами в цепочке. Здесь усреднение производится по независимым тепловым колебаниям атомов кристалла. Непрерывный потенциал как функция расстояния от плоскости имеет вид:

$$\overline{U}_p(r) = Nd_p \int_0^{\infty} 2\pi r \left\langle V(R = \sqrt{y^2 + r^2}) \right\rangle_T dr,$$

где Nd_p — среднее число атомов на единицу площади плоскости, d_p — расстояние между плоскостями, $r^2 = x^2 + z^2$.

Анализ движения каналированных частиц в каналах кристалла произведен в рамках классической механики. Многократное рассеяние описывается с помощью диффузионного уравнения. Исходя из различных подходов, коэффициенты диффузии получены, например, в [2] и [4].

1.2. Геометрия кристаллов

Идеальный кристалл определяют как тело, состоящее из атомов, расположенных в пространственной решетке так, что можно ввести три

вектора основных трансляций \vec{a} , \vec{b} , \vec{c} , обладающих следующим свойством. При рассмотрении этой атомной решетки из произвольной точки \vec{r} решетка имеет тот же вид, что и при рассмотрении из точки \vec{r}'

$$\vec{r}' = \vec{r} + n_1 \vec{a} + n_2 \vec{b} + n_3 \vec{c}, \quad (1.2.1)$$

где n_1 , n_2 , n_3 — произвольные целые числа. Основные векторы трансляции иногда обозначаются \vec{a}_1 , \vec{a}_2 , \vec{a}_3 .

Совокупность точек \vec{r}' при различных значениях чисел n_1 , n_2 , n_3 определяет кристаллическую решетку, представляющую собой регулярное периодическое расположение точек в пространстве.

Операцию перемещения кристалла как целого параллельно самому себе, описываемую вектором

$$\vec{T} = n_1 \vec{a} + n_2 \vec{b} + n_3 \vec{c} = n_1 \vec{a}_1 + n_2 \vec{a}_2 + n_3 \vec{a}_3$$

называют трансляцией. Вектор трансляции кристаллической решетки связывает любые две точки решетки.

Наименьший по объему параллелепипед, повторением которого можно составить всю кристаллическую решетку называют элементарной ячейкой кристалла. Этой ячейкой — ее размерами, формой и расположением атомов в ней — полностью определяется структура кристалла. Величины и направления трех ребер элементарной ячейки задают три вектора, которые называют основными периодами решетки; это — наименьшие расстояния, на которые можно сместить решетку так, чтобы она совместилась сама с собой.

Всё многообразие кристаллов может быть описано с помощью 14 типов кристаллических решёток (решёток Браве), различающихся соотношениями между величинами базисных векторов \vec{a} , \vec{b} , \vec{c} , и углов между ними (рис. 1.2.1).

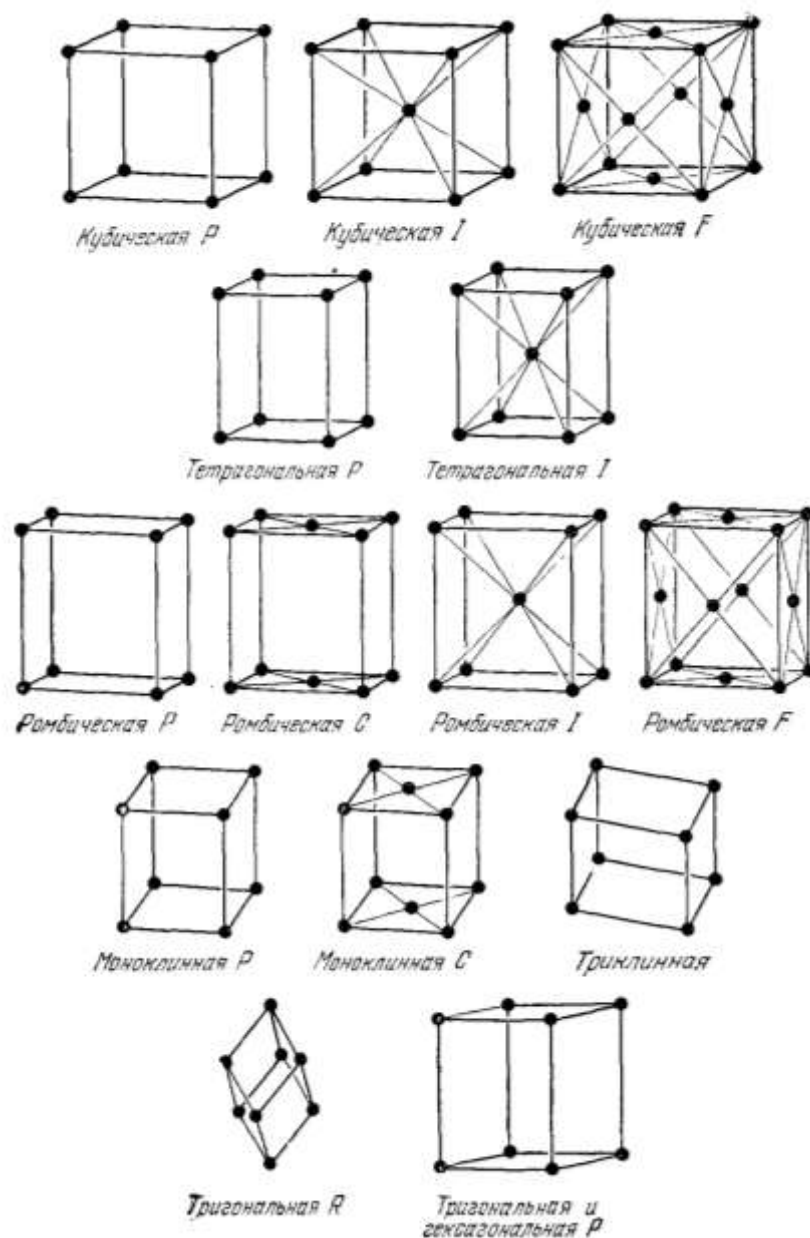


Рисунок 1.2.1. Четырнадцать пространственных решеток Браве. *P* — символ примитивной ячейки, *I* — объемноцентрированной, *F* — гранецентрированной, *C* — с центрированными основаниями, *R* — ромбоэдрической

Положение и ориентация плоскостей в кристаллах описываются с помощью индексов Миллера. Они определяются следующим образом:

1. определяются точки, в которых данная плоскость пересекает основные координатные оси, и их координаты записываются в единицах постоянной решетки;

2. берутся обратные значения полученных чисел и приводятся к наименьшему целому, кратному каждому из чисел. Результат заключается в круглые скобки.

Для плоскости, которая пересекает оси в точках с координатами 4, 1 и 2, обратные числа будут $1/4$, 1 и $1/2$; следовательно, индексы Миллера для этой плоскости есть (142) . Если плоскость пересекает данную координатную ось в бесконечности, то соответствующий индекс Миллера равен нулю. Индексы Миллера для наиболее важных плоскостей в кубических кристаллах иллюстрируются рис. 1.2.2.

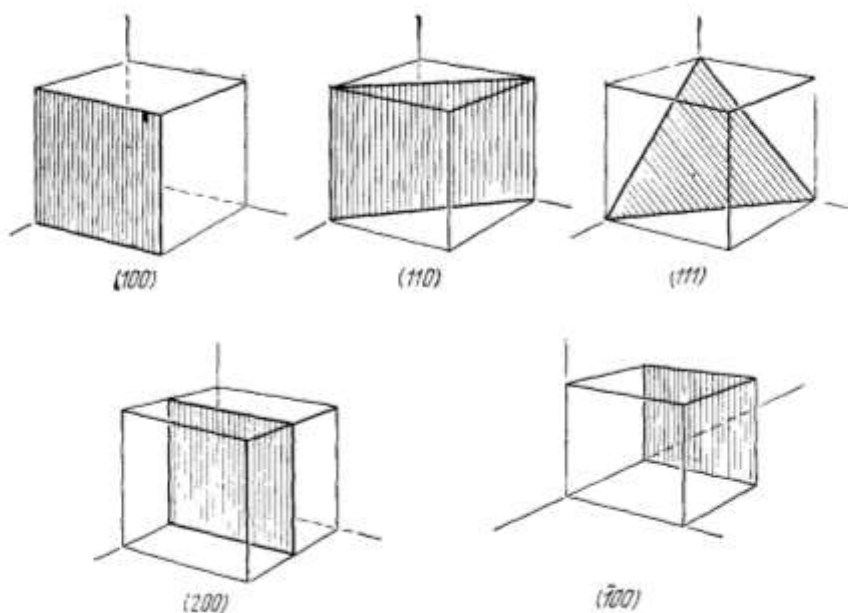


Рисунок 1.2.2. Индексы Миллера для наиболее важных плоскостей кубического кристалла

Набор индексов (hkl) может означать отдельную плоскость или семейство параллельных плоскостей. Если плоскость пересекает ось в области отрицательных значений координат, соответствующий индекс также будет отрицательным но знак минус в этом случае помещается не перед индексом, а над ним — например, $(h\bar{k}l)$. Плоскости, эквивалентные по характеру симметрии, обозначаются индексами, помещенными в фигурные

скобки; например все грани куба можно обозначить через $\{100\}$. Часто просто говорят — плоскости (100).

Для обозначения направлений в кристалле применяются индексы, представляющие собой набор наименьших целых чисел, относящихся между собой как компоненты вектора, параллельного данному направлению в соответствующей системе координат. Эти целые числа в случае направлений пишутся в квадратных скобках: $[hkl]$. В кубических кристаллах направление оси X запишется как $[100]$, отрицательное направление оси Y — как $[0\bar{1}0]$. Для описания семейства направлений используются треугольные скобки $\langle hkl \rangle$. Часто просто говорят — $[hkl]$ -направления.

В работе рассматривается кристалл кремния — алмазоподобный кристалл. Пространственная решетка алмаза является кубической гранецентрированной. Единственный параметр, которым характеризуются кубические решетки — длина ребра основного куба d , которая называется постоянной решетки. Для описания расположения атомов в кубических решетках используют прямоугольную систему координат с осями X , Y , Z вдоль трех ребер кубической ячейки, а в качестве единицы измерения координат выбирается постоянная d .

Элементарный куб алмазоподобного кристалла содержит восемь атомов. На рис. 1.2.3. представлено расположение атомов в элементарной кубической ячейке алмаза. Координаты восьми базисных атомов для основных плоскостных направлений алмазоподобных кристаллов приведены в таблице 1.2.1. Здесь координаты атомов приведены в единицах постоянной решетки a_x , a_y , a_z .

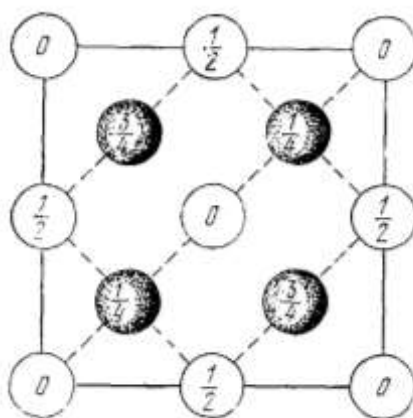


Рисунок 1.2.3. Расположение атомов в элементарной кубической ячейке алмаза (проекция на грань куба). Значения дробей указывают высоту атомов над базисной плоскостью (за единицу длины принято ребро куба)

Таблица 1.2.1. Координаты восьми базисных атомов для основных плоскостных направлений алмазоподобных кристаллов в единицах a_x , a_y , a_z

(100)	$a_x = d$, $a_y = d$, $a_z = d$	X_i	0	0	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{4}$	$\frac{1}{4}$	$\frac{3}{4}$	$\frac{3}{4}$
		Y_i	0	$\frac{1}{2}$	0	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{4}$	$\frac{3}{4}$	$\frac{1}{4}$	$\frac{3}{4}$
		Z_i	0	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$	0	$\frac{1}{4}$	$\frac{3}{4}$	$\frac{3}{4}$	$\frac{1}{4}$
(110)	$a_x = \frac{d}{\sqrt{2}}$, $a_y = \frac{d}{\sqrt{2}}$, $a_z = d$	X_i	0	$\frac{\sqrt{2}}{4}$	$\frac{\sqrt{2}}{4}$	$\frac{\sqrt{2}}{2}$	$\frac{\sqrt{2}}{4}$	$\frac{\sqrt{2}}{2}$	$\frac{\sqrt{2}}{2}$	$\frac{3\sqrt{2}}{4}$
		Y_i	0	$\frac{\sqrt{2}}{4}$	$-\frac{\sqrt{2}}{4}$	0	0	$\frac{\sqrt{2}}{4}$	$-\frac{\sqrt{2}}{4}$	0
		Z_i	0	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$	0	$\frac{1}{4}$	$\frac{3}{4}$	$\frac{3}{4}$	$\frac{1}{4}$
(111)	$a_x = \frac{d}{\sqrt{3}}$, $a_y = \frac{d}{\sqrt{2}}$, $a_z = \sqrt{\frac{2}{3}}d$	X_i	0	$\frac{1}{\sqrt{3}}$	$\frac{1}{\sqrt{3}}$	$\frac{1}{\sqrt{3}}$	$\frac{3}{4\sqrt{3}}$	$\frac{7}{4\sqrt{3}}$	$\frac{7}{4\sqrt{3}}$	$\frac{7}{4\sqrt{3}}$
		Y_i	0	$\frac{\sqrt{2}}{4}$	$-\frac{\sqrt{2}}{4}$	0	0	$\frac{\sqrt{2}}{4}$	$-\frac{\sqrt{2}}{4}$	0
		Z_i	0	$\frac{1}{4}$	$\frac{1}{4}$	$-\frac{1}{2}$	0	$\frac{1}{4}$	$\frac{3}{4}$	$-\frac{1}{2}$

Тетраэдрическое расположение связей в структуре алмаза иллюстрируется схемой приведенной на рис. 1.2.4. В структуре алмаза атомы связаны между собой ковалентными связями.

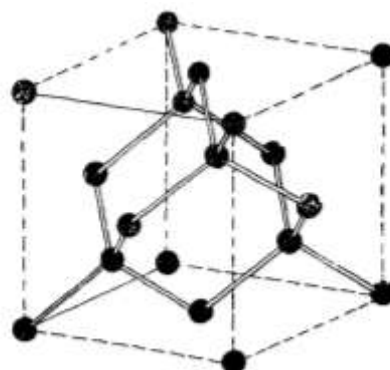


Рисунок 1.2.4. Изображение кристаллической структуры алмаза, показывающее тетраэдрическое расположение связей

1.3. Уравнения движения теории плоскостного каналирования

Рассмотрим движение частицы в плоскостном канале. Систему координат выберем таким образом, чтобы ось OX была перпендикулярна, а ось OY параллельна атомным плоскостям, но перпендикулярна направлению падения ионов на кристалл, которое происходит в направлении оси OZ . Будем использовать малоугловое приближение [8], которое говорит о том, что в процессе движения существуют только поперечные силы, продольные же отсутствуют, то есть

$$F_z = 0.$$

Это условие обеспечивает движение частицы с постоянной скоростью на небольших отрезках траектории в направлении оси OZ .

Движение одной быстрой частицы будем описывать с помощью классического уравнения движения

$$m \frac{d^2 x}{dt^2} = F_x, \quad (1.3.1)$$

где $m = \gamma m_0$ — релятивистская масса, $\gamma = \frac{1}{\sqrt{1-\beta^2}}$ — лоренц-фактор, $\beta = \frac{v}{c}$, v — скорость заряженной частицы в направлении оси OZ , c — скорость света, m_0 — масса покоя; $F_x = -\frac{\partial U}{\partial x}$, $U_x = \frac{\partial U}{\partial x}$, $U = U(x)$ — потенциальная энергия взаимодействия каналированной частицы с атомами кристалла.

Потенциальная энергия взаимодействия каналированной частицы может быть представлена в виде суммы своего среднего значения и флуктуации

$$U = \bar{U} + \delta U, \quad (1.3.2)$$

где $\bar{U} = \bar{U}(x)$ — непрерывный потенциал плоскостного канала. Нелинейное стохастическое уравнение движения (1.3.1) может быть линеаризовано с помощью разложения в ряд по малому параметру, роль которого играет флуктуация потенциала.

Решение уравнения (1.3.1) будем искать в виде

$$x = \bar{x} + \delta x. \quad (1.3.3)$$

Слагаемые в выражении для потенциала (1.3.2) разложим в ряд по степеням δx , в окрестностях регулярной траектории, учитывая только линейные по δx члены

$$\begin{aligned} \bar{U} = \bar{U}(x) &= \bar{U}(\bar{x} + \delta x) \approx \bar{U}(\bar{x}) + \bar{U}_x(\bar{x})\delta x, \\ \delta U &= \delta U(x) = \delta U(\bar{x} + \delta x) \approx \delta U(\bar{x}). \end{aligned} \quad (1.3.4)$$

Теперь проекция силы может быть записана в виде:

$$F_x = -\frac{\partial U(x)}{\partial x} = -\frac{\partial \bar{U}(\bar{x})}{\partial x} - \frac{\partial \bar{U}_x(\bar{x})}{\partial x} \delta x - \frac{\partial \delta U(\bar{x})}{\partial x},$$

или же

$$F_x = -\bar{U}_x(\bar{x}) - \bar{U}_{xx}(\bar{x})\delta x - \delta U_x(\bar{x}),$$

где $\delta F_x = -\delta U_x(\bar{x})$, — флуктуации проекции силы.

С учетом выше сказанного, уравнение (1.3.1) переписывается в виде:

$$m(\ddot{\bar{x}} + \delta\ddot{x}) = -\bar{U}_x(\bar{x}) - \bar{U}_{xx}(\bar{x})\delta x - \delta U_x(\bar{x}).$$

Из данного уравнения можно выделить уравнение, описывающее движение по регулярной траектории (члены нулевого порядка малости) и уравнение, описывающее движение по хаотической траектории (члены первого порядка малости):

$$m\ddot{\bar{x}} = -\bar{U}_x(\bar{x}), \quad (1.3.5)$$

$$m\delta\ddot{x} + \bar{U}_{xx}(\bar{x})\delta x = \delta F_x(\bar{x}). \quad (1.3.6)$$

С помощью линеаризованного стохастического уравнения движения (1.3.6) составим систему уравнений для средних квадратов флуктуаций динамических величин:

$$\begin{cases} \frac{d}{dt} \overline{\delta x^2} = 2\overline{\delta x \delta \dot{x}}, \\ \frac{d}{dt} \overline{\delta x \delta \dot{x}} = \overline{\delta \dot{x}^2} + \overline{\delta x \delta \ddot{x}} = \overline{\delta \dot{x}^2} + \frac{1}{m} \overline{\delta x \delta F_x} - \bar{U}_{xx} \overline{\delta x^2}, \\ \frac{d}{dt} \overline{\delta \dot{x}^2} = 2\overline{\delta \dot{x} \delta \ddot{x}} = \frac{2}{m} \overline{\delta \dot{x} \delta F_x} - \bar{U}_{xx} \overline{\delta x \delta \dot{x}}. \end{cases}$$

Корреляции поперечной координаты и флуктуации силы, скорости и флуктуации силы определим, решив уравнение (1.3.6). Для этого используем метод вариации произвольной постоянной. Решение будем искать в виде

$$\delta x = C_1 \delta x_1 + C_2 \delta x_2,$$

полагая, что коэффициенты C_1 и C_2 являются функциями времени. Здесь δx_1 и δx_2 — решения соответствующего однородного уравнения

$$\delta\ddot{x} + \frac{\bar{U}_{xx}(\bar{x})}{m} \delta x = 0.$$

Составим систему уравнений для определения неизвестных коэффициентов C_1 и C_2

$$\begin{cases} \dot{C}_1 \delta x_1 + \dot{C}_2 \delta x_2 = 0, \\ \dot{C}_1 \delta \dot{x}_1 + \dot{C}_2 \delta \dot{x}_2 = \frac{\delta F_x}{m}. \end{cases}$$

Теперь, согласно методу Крамера, искомые коэффициенты определяются как

$$\dot{C}_1 = \frac{\Delta_1}{\Delta} = -\frac{1}{m} \frac{\delta x_2 \delta F_x}{\delta x_1 \delta \dot{x}_2 - \delta \dot{x}_1 \delta x_2},$$

$$\dot{C}_2 = \frac{\Delta_2}{\Delta} = \frac{1}{m} \frac{\delta x_1 \delta F_x}{\delta x_1 \delta \dot{x}_2 - \delta \dot{x}_1 \delta x_2},$$

где

$$\Delta_1 = \begin{vmatrix} 0 & \delta x_2 \\ \frac{\delta F_x}{m} & \delta \dot{x}_2 \end{vmatrix} = -\delta x_2 \frac{\delta F_x}{m}, \quad \Delta_2 = \begin{vmatrix} \delta x_1 & 0 \\ \delta \dot{x}_1 & \frac{\delta F_x}{m} \end{vmatrix} = \delta x_1 \frac{\delta F_x}{m},$$

$$\Delta = \begin{vmatrix} \delta x_1 & \delta x_2 \\ \delta \dot{x}_1 & \delta \dot{x}_2 \end{vmatrix} = \delta x_1 \delta \dot{x}_2 - \delta \dot{x}_1 \delta x_2.$$

Отсюда имеем

$$C_1 = -\frac{1}{m} \int_0^t \frac{\delta x_2 \delta F_x}{\delta x_1 \delta \dot{x}_2 - \delta \dot{x}_1 \delta x_2} dt',$$

$$C_2 = \frac{1}{m} \int_0^t \frac{\delta x_1 \delta F_x}{\delta x_1 \delta \dot{x}_2 - \delta \dot{x}_1 \delta x_2} dt'.$$

Таким образом, окончательно решение уравнения (1.3.6) может быть записано в виде:

$$\delta x = -\frac{1}{m} \int_0^t \frac{\delta F_x}{\delta x_1 \delta \dot{x}_2 - \delta \dot{x}_1 \delta x_2} dt'.$$

Составим корреляционные функции

$$\overline{\delta x \delta F_x} = -\frac{1}{m} \int_0^t \frac{\delta F_x \delta F_x}{\delta x_1 \delta \dot{x}_2 - \delta \dot{x}_1 \delta x_2} dt',$$

$$\overline{\delta \dot{x} \delta F_x} = -\frac{1}{m} \int_0^t \frac{\delta \dot{x}_1 \delta F_x}{\delta x_1 \delta \dot{x}_2 - \delta \dot{x}_1 \delta x_2} dt'.$$

Если корреляционная функция флуктуаций случайной силы является дельта-коррелированной

$$\overline{\delta F_x(t) \delta F_x(t')} = D_{xx} \delta(t - t'),$$

то получим следующий результат:

$$\overline{\delta x \delta F_x} = 0, \quad \overline{\delta \dot{x} \delta F_x} = \frac{D_{xx}}{2m}, \quad (1.3.7)$$

где $D_{xx} = \int_{-\infty}^{\infty} \overline{\delta F_x(t) \delta F_x(t')} dt'$ — компонента коэффициента диффузии в направлении оси OX . Окончательно, система уравнений для средних квадратов флуктуаций динамических величин перепишется в виде:

$$\begin{cases} \frac{d}{dt} \overline{\delta x^2} = 2 \overline{\delta x \delta \dot{x}}, \\ \frac{d}{dt} \overline{\delta x \delta \dot{x}} = \overline{\delta \dot{x}^2} - \frac{1}{m} \bar{U}_{xx} \overline{\delta x^2}, \\ \frac{d}{dt} \overline{\delta \dot{x}^2} = \frac{2}{m} \left(\frac{D_{xx}}{2m} - \bar{U}_{xx} \overline{\delta x \delta \dot{x}} \right). \end{cases} \quad (1.3.8)$$

Уравнение (1.3.5) и система уравнений (1.3.8) решают задачу описания процесса многократного рассеяния каналированных частиц в плоскостных каналах кристалла.

1.4. Уравнение эволюции флуктуаций поперечной энергии каналированных частиц

Найдем решение линеаризованного стохастического уравнения движения (1.3.6) в пространстве поперечных энергий. Поперечную энергию каналированной частицы запишем в виде

$$E_{\perp} = \frac{m}{2} \dot{x}^2 + \bar{U}(x). \quad (1.4.1)$$

Используя выражения (1.3.3), (1.3.4), можно записать

$$E_{\perp} = \frac{m}{2} \bar{x} + \delta \dot{x}^2 + \bar{U} \bar{x} + \delta x = \frac{m}{2} \bar{x}^2 + 2 \bar{x} \delta \dot{x} + \delta \dot{x}^2 + \bar{U} \bar{x} + \bar{U}_x \bar{x} \delta x,$$

где

$$\bar{E}_{\perp} = \frac{m}{2} \bar{\dot{x}}^2 + \bar{U} \bar{x} ,$$

определяет среднее значение, а

$$\delta E_{\perp} = m \bar{\dot{x}} \delta \dot{x} + \bar{U}_x \bar{x} \delta x$$

определяет флуктуацию поперечной энергии каналированной частицы.

Скорость изменения флуктуации поперечной энергии со временем дается выражением

$$\delta \dot{E}_{\perp} = m \bar{\ddot{x}} \delta \dot{x} + \bar{\dot{x}} \delta \ddot{x} + \frac{d}{dt} \bar{U}_x \bar{x} \delta x .$$

С учетом (1.3.5) и (1.3.6) перепишем:

$$\begin{aligned} \delta \dot{E}_{\perp} &= m \left(-\frac{\bar{U}_x}{m} \delta \dot{x} + \frac{\bar{\dot{x}}}{m} \delta F_x - \bar{U}_{xx} \delta x \right) + \frac{d}{dt} \bar{U}_x \bar{x} \delta x = \\ &= -\bar{U}_x \delta \dot{x} + \bar{\dot{x}} \delta F_x - \bar{\dot{x}} \bar{U}_{xx} \delta x + \bar{U}_{xx} \bar{x} \bar{\dot{x}} \delta x + \bar{U}_x \bar{x} \delta \dot{x} = \bar{\dot{x}} \delta F_x, \\ \delta \dot{E}_{\perp} &= \bar{\dot{x}} \delta F_x. \end{aligned} \quad (1.4.2)$$

Эволюция среднего квадрата флуктуаций поперечной энергии описывается уравнением

$$\frac{d \overline{\delta E_{\perp}^2}}{dt} = 2 \overline{\delta E_{\perp} \delta \dot{E}_{\perp}} = 2 m \bar{\dot{x}}^2 \overline{\delta \dot{x} \delta F_x} + 2 \bar{U}_x \bar{\dot{x}} \overline{\delta x \delta F_x}.$$

Принимая во внимание (1.3.7), перепишем:

$$\frac{d \overline{\delta E_{\perp}^2}}{dt} = \bar{\dot{x}}^2 D_{xx}. \quad (1.4.3)$$

Совместное интегрирование классического уравнения движения (1.3.5) и уравнения (1.4.3) позволяет построить зависимость среднего квадрата флуктуации поперечной энергии как функции от глубины проникновения в кристалл, начальных значений поперечной координаты и скорости.

1.5. Уравнение Фоккера-Планка

Уравнение Фоккера-Планка в пространстве поперечной энергии E_{\perp} может быть записано в следующем виде

$$\frac{\partial p}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial E_{\perp}} A p + \frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial E_{\perp}^2} B p,$$

где $p = p(E_{\perp}, t)$ — функция распределения, зависящая от поперечной энергии и времени, $A = A(E_{\perp}, t)$ — коэффициент сноса (дрейфовый коэффициент)

$$A = \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{\overline{\Delta E_{\perp}}}{\Delta t},$$

$B = B(E_{\perp}, t)$ — коэффициент диффузии

$$B = \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{\overline{\Delta E_{\perp}^2}}{\Delta t}$$

[11].

Определим скорость изменения поперечной энергии со временем. Для этого продифференцируем (1.4.1) по времени и воспользуемся уравнением движения (1.3.1). Получим:

$$\frac{dE_{\perp}}{dt} = m\dot{x}\ddot{x} + \bar{U}_x(x)\dot{x} = \dot{x}(m\ddot{x} + \bar{U}_x(x)) = \dot{x}\delta F_x.$$

Вдоль классических траекторий будет выполняться соотношение

$$\frac{dE_{\perp}}{dt} = \bar{x}\delta F_x,$$

где \bar{x} — решение уравнения Ньютона в отсутствии флуктуаций

$$m\ddot{\bar{x}} = -\bar{U}_x(\bar{x}).$$

Теперь изменение поперечной энергии определяется как

$$\Delta E_{\perp} = \int_t^{t+\Delta t} dt' \dot{x}(t') \delta F_x(t').$$

Коэффициент сноса A перепишется в виде:

$$A = \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{1}{\Delta t} \int_t^{t+\Delta t} dt' \dot{x}(t') \overline{\delta F_x(t')}.$$

Так как среднее от флуктуации силы равно нулю, то окончательно получим равенство нулю и дрейфового коэффициента

$$A = 0.$$

Определим диффузионный коэффициент B

$$B = \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{1}{\Delta t} \int_t^{t+\Delta t} dt' \int_t^{t+\Delta t} dt'' \overline{\dot{x}(t') \dot{x}(t'')} \delta F_x(t') \delta F_x(t'').$$

Здесь $\delta F_x(t') \delta F_x(t'') = D_{xx}(t', t'') \delta(t' - t'')$ — компонента диффузионной матрицы. Выражение для диффузионного коэффициента перепишется в виде:

$$B = \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{1}{\Delta t} \int_t^{t+\Delta t} dt' D(t') \overline{\dot{x}(t')^2}$$

или же окончательно

$$B = D(x) \overline{\dot{x}(t')^2}.$$

Определив коэффициенты сноса и диффузии, уравнение Фоккера-Планка примет вид уравнения диффузии

$$\frac{\partial p}{\partial t} = \frac{D(x)}{2} \overline{\dot{x}(t)^2} \frac{\partial^2 p}{\partial E_{\perp}^2}.$$

Решением уравнения диффузии является функция распределения Гаусса

$$p = \frac{1}{\sqrt{2\pi \overline{\delta E_{\perp}^2}}} \exp\left(-\frac{(E_{\perp} - E_{\perp 0})^2}{2 \overline{\delta E_{\perp}^2}}\right),$$

где для среднего квадрата флуктуации поперечной энергии $\overline{\delta E_{\perp}^2}$ справедливо

соотношение (1.4.3), $E_{\perp 0} = \frac{m v_{x0}^2}{2} + U(x_0)$ — поперечная энергия в момент

времени t_0 , $E_{\perp} = \frac{mv_x^2}{2} + U(x) = \frac{mv^2}{2} + U(x_0)$ — поперечная энергия в момент времени t .

1.6. Коэффициент диффузии

Столкновения каналированных частиц с ядрами атомов кристалла и их электронами описываются с помощью компонент диффузионной матрицы

$$D \vec{r} = \begin{pmatrix} D_{xx} \vec{r} & D_{xy} \vec{r} \\ D_{yx} \vec{r} & D_{yy} \vec{r} \end{pmatrix}.$$

В случае если корреляционная функция флуктуаций случайной силы является дельта-коррелированной, то эти компоненты определяется как

$$D_{ij} \vec{r} = \int dt_2 \overline{\delta f_i \vec{r}_1 \delta f_j \vec{r}_2},$$

где $i, j = (x; y)$. Так как сила связана с потенциальной энергией

$\delta f_i(\vec{r}) = -\frac{\partial \delta U(\vec{r})}{\partial i}$, то компоненты коэффициента диффузии могут быть

переписаны в виде

$$D_{ij} \vec{r} = \int dt_2 \frac{\overline{\partial \delta U \vec{r}_1 \partial \delta U \vec{r}_2}}{\partial i_1 \partial j_2}. \quad (1.6.1)$$

Потенциальная энергия взаимодействия $U \vec{r}$ быстрой частицы с атомами кристалла представляет собой сумму потенциальной энергии взаимодействия быстрой частицы с ядрами атомов кристалла $U_{nucl} \vec{r}$ и потенциальной энергии взаимодействия быстрой частицы с атомными электронами кристалла $U_{el} \vec{r}$:

$$U \vec{r} = U_{nucl} \vec{r} + U_{el} \vec{r}.$$

Потенциальная энергия взаимодействия быстрой частицы с ядрами атомов кристалла имеет вид:

$$U_{nuc}(\vec{r}) = \sum_n \frac{Z_1 Z_2 e^2}{|\vec{r} - \vec{r}_n|}, \quad (1.6.2)$$

где $Z_1 e$, $Z_2 e$ — заряды быстрой частицы и атомов кристалла соответственно; \vec{r} — вектор, определяющий положение ядра налетающей частицы; \vec{r}_n — вектор, определяющий положение n -го ядра кристалла. Вектор \vec{r}_n может быть представлен как $\vec{r}_n = \vec{r}_{n_0} + \delta\vec{r}_n$, где $\vec{r}_{n_0} = a_x n_x, a_y n_y, a_z n_z$ — вектор, определяющий положение n -го узла кристаллической решетки; a_x, a_y, a_z — периоды кристаллической решетки в направлении осей OX, OY, OZ соответственно; n_x, n_y, n_z — целые числа; $\delta\vec{r}_n$ — вектор смещения n -го атома из узла кристаллической решетки.

Потенциальная энергия взаимодействия быстрой частицы с атомными электронами кристалла имеет вид:

$$U_{el}(\vec{r}) = - \sum_n \sum_{j=1}^{Z_2} \frac{Z_1 e^2}{|\vec{r} - \vec{r}_{n_j}|}, \quad (1.6.3)$$

где \vec{r}_{n_j} — вектор, определяющий положение j -го электрона n -го атома кристалла, причем $\vec{r}_{n_j} = \vec{r}_n + \delta\vec{r}_{n_j}$, $\delta\vec{r}_{n_j}$ — вектор, определяющий смещение j -го электрона n -го атома кристалла.

Принимая во внимание выше сказанное, можно выделить ядерный коэффициент диффузии, ответственный за рассеяние на тепловых флуктуациях атомов и электронный коэффициент диффузии, ответственный за рассеяние на квантовых флуктуациях атомных электронов:

$$D(\vec{r}) = D^{nuc}(\vec{r}) + D^{el}(\vec{r}).$$

Аналогичное разделение может быть произведено и для компонент диффузионной матрицы:

$$D_{ij}(\vec{r}) = D_{ij}^{nuc}(\vec{r}) + D_{ij}^{el}(\vec{r}), \quad (1.6.4)$$

где

$$D_{ij}^{nucl} \vec{r} = \int dt_2 \frac{\overline{\partial \delta U_{nucl} \vec{r}_1 \partial \delta U_{nucl} \vec{r}_2}}{\partial i_1 \partial j_2},$$

$$D_{ij}^{el} \vec{r} = \int dt_2 \frac{\overline{\partial \delta U_{el} \vec{r}_1 \partial \delta U_{el} \vec{r}_2}}{\partial i_1 \partial j_2}.$$

1.6.1. Усреднение корреляционной функции флуктуаций потенциальной энергии взаимодействия каналированной частицы с ядрами атомов кристалла

Определим флуктуацию потенциальной энергии взаимодействия быстрой частицы с ядрами атомов кристалла $\delta U_{nucl} \vec{r}$ как разность между средним значением потенциальной энергии $\langle U_{nucl} \vec{r} \rangle$ и потенциальной энергией $U_{nucl} \vec{r}$:

$$\delta U_{nucl} \vec{r} = \langle U_{nucl} \vec{r} \rangle - U_{nucl} \vec{r}.$$

В данном случае под средним значением потенциальной энергии $\langle U_{nucl} \vec{r} \rangle$ будем понимать усреднение (1.6.2) по независимым тепловым колебаниям атомов кристалла. Соответствующее среднее будем обозначать символом $\langle \dots \rangle_T$. Таким образом, $\langle U_{nucl} \vec{r} \rangle \equiv \langle U_{nucl} \vec{r} \rangle_T$.

Разложение потенциальной энергии взаимодействия $U_{nucl}(\vec{r})$ в интеграл Фурье имеет вид (см. приложение 5):

$$U_{nucl}(\vec{r}) = \sum_n \int \frac{d^3 \vec{g}}{2\pi^3} \frac{4\pi Z_1 Z_2 e^2}{g^2} \exp i \vec{g} \cdot \vec{r} - \vec{r}_n.$$

Усреднение последнего выражения будем производить с помощью функции распределения Гаусса:

$$f(\delta \vec{r}_n) = \left(2\pi \langle (\delta \vec{r}_n)^2 \rangle \right)^{\frac{3}{2}} \exp \left(- \frac{(\delta \vec{r}_n)^2}{2 \langle (\delta \vec{r}_n)^2 \rangle} \right),$$

где $\vec{\delta r}_n$ — вектор смещения n -го атома из узла кристаллической решетки, $\langle (\vec{\delta r}_{nx})^2 \rangle = \langle (\vec{\delta r}_{ny})^2 \rangle = \langle (\vec{\delta r}_{nz})^2 \rangle = \sigma_n^2$ — средний квадрат флуктуаций тепловых колебаний атомов кристалла n -сорта в расчете на одну степень свободы. Будем считать, что тепловые колебания в трех пространственных направлениях независимы, то есть

$$f(\vec{\delta r}_n) = f(\delta x_n) f(\delta y_n) f(\delta z_n),$$

где $f(\delta x_n) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} \exp\left(-\frac{\delta x_n^2}{2\sigma^2}\right)$; аналогично определяются $f(\delta y_n)$ и $f(\delta z_n)$.

Таким образом, получаем

$$\begin{aligned} \langle U_{nucl}(\vec{r}) \rangle_T &= \int_{-\infty}^{\infty} d(\vec{\delta r}_n) f(\vec{\delta r}_n) U_{nucl}(\vec{g}), \\ \langle U_{nucl} \vec{r} \rangle_T &= \sum_n \int \frac{d^3 \vec{g}}{2\pi^3} \frac{4\pi Z_1 Z_2 e^2}{g^2} \exp i \vec{g} \cdot \vec{r} - \vec{r}_{n0} \times \\ &\times \int_{-\infty}^{\infty} d \delta x_n f(\delta x_n) \exp -ig_x \delta x_n \int_{-\infty}^{\infty} d \delta y_n f(\delta y_n) \exp -ig_y \delta y_n \times \\ &\times \int_{-\infty}^{\infty} d \delta z_n f(\delta z_n) \exp -ig_z \delta z_n. \end{aligned}$$

Возьмем один из интегралов, например:

$$\begin{aligned} &\int_{-\infty}^{\infty} d \delta x_n f(\delta x_n) \exp -ig_x \delta x_n = \\ &= \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma_x^2}} \int_{-\infty}^{\infty} d \delta x_n \exp \left(-ig_x \delta x_n - \frac{\delta x_n^2}{2\sigma_x^2} \right) = \exp \left(-\frac{g_x^2 \sigma_x^2}{2} \right). \end{aligned}$$

Аналогично берутся интегралы по δy_n и δz_n . Учитывая, что $g_x^2 \sigma_x^2 + g_y^2 \sigma_y^2 + g_z^2 \sigma_z^2 = g^2 \sigma^2$, окончательно получим

$$\langle U_{nucl} \vec{r} \rangle_T = \sum_n \int \frac{d^3 \vec{g}}{2\pi^3} \frac{4\pi Z_1 Z_2 e^2}{g^2} \exp i \vec{g} \cdot \vec{r} - \vec{r}_{n0} \exp \left(-\frac{g^2 \sigma^2}{2} \right).$$

Теперь флуктуация потенциальной энергии взаимодействия быстрой частицы с ядрами атомов кристалла запишется в виде:

$$\delta U_{nucl}(\vec{r}) = \sum_n \int \frac{d^3 \vec{g}}{(2\pi)^3} \frac{4\pi Z_1 Z_2 e^2}{g^2} \exp(i\vec{g} \cdot \vec{r} - \vec{r}_{n0}) \left(\exp(-i\vec{g} \delta \vec{r}_n) - \exp\left(-\frac{g^2 \sigma^2}{2}\right) \right). \quad (1.6.5)$$

Используя выражение (1.6.5), составим корреляционную функцию флуктуаций потенциальной энергии взаимодействия каналированной частицы с ядрами атомов кристалла

$$\begin{aligned} \delta U_{nucl}(\vec{r}_1) \delta U_{nucl}(\vec{r}_2) &= \sum_{n_1, n_2} \int \frac{d^3 \vec{g}}{(2\pi)^3} \int \frac{d^3 \vec{q}}{(2\pi)^3} \frac{(4\pi Z_1 Z_2 e^2)^2}{g^2 q^2} \exp(i\vec{g}(\vec{r}_1 - \vec{r}_{n_0})) \times \\ &\times \exp(-i\vec{q}(\vec{r}_2 - \vec{r}_{n_0})) \left(\exp(-i\vec{g} \delta \vec{r}_{n_1}) - \exp\left(-\frac{g^2 \sigma^2}{2}\right) \right) \left(\exp(i\vec{q} \delta \vec{r}_{n_2}) - \exp\left(-\frac{q^2 \sigma^2}{2}\right) \right). \end{aligned}$$

Произведем усреднение данного выражения по независимым тепловым колебаниям атомов кристалла

$$\begin{aligned} \langle \delta U_{nucl}(\vec{r}_1) \delta U_{nucl}(\vec{r}_2) \rangle_T &= \sum_{n_1, n_2} \int \frac{d^3 \vec{g}}{(2\pi)^3} \int \frac{d^3 \vec{q}}{(2\pi)^3} \frac{(4\pi Z_1 Z_2 e^2)^2}{g^2 q^2} \exp(i\vec{g}(\vec{r}_1 - \vec{r}_{n_0})) \times \\ &\times \exp(-i\vec{q}(\vec{r}_2 - \vec{r}_{n_0})) \int_{-\infty}^{\infty} d(\delta \vec{r}_{n_1}) f(\delta \vec{r}_{n_1}) \left(\exp(-i\vec{g} \delta \vec{r}_{n_1}) - \exp\left(-\frac{g^2 \sigma^2}{2}\right) \right) \times \\ &\times \int_{-\infty}^{\infty} d(\delta \vec{r}_{n_2}) f(\delta \vec{r}_{n_2}) \left(\exp(i\vec{q} \delta \vec{r}_{n_2}) - \exp\left(-\frac{q^2 \sigma^2}{2}\right) \right). \end{aligned}$$

Вычислим один из интегралов, например,

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{\infty} d(\delta x_{n_1}) f(\delta x_{n_1}) \left(\exp(-i\vec{g} \delta x_{n_1}) - \exp\left(-\frac{g_x^2 \sigma_x^2}{2}\right) \right) &= \\ &= \exp\left(-\frac{g_x^2 \sigma_x^2}{2}\right) - \exp\left(-\frac{g_x^2 \sigma_x^2}{2}\right) = 0. \end{aligned}$$

Таким образом, при $n_1 \neq n_2$ рассматриваемый коррелятор равен нулю:

$$\langle \delta U_{nucl}(\vec{r}_1) \delta U_{nucl}(\vec{r}_2) \rangle_T = 0, \text{ при } n_1 \neq n_2.$$

Рассмотрим случай $n_1 = n_2 = n$. В этом случае среднее от корреляционной функции запишется следующим образом:

$$\begin{aligned} \langle \delta U_{nucl}(\vec{r}_1) \delta U_{nucl}(\vec{r}_2) \rangle_T &= \sum_n \int \frac{d^3 \vec{g}}{(2\pi)^3} \int \frac{d^3 \vec{q}}{(2\pi)^3} \frac{(4\pi Z_1 Z_2 e^2)^2}{g^2 q^2} \times \\ &\times \exp(i\vec{g}(\vec{r}_1 - \vec{r}_{n_0})) \exp(-i\vec{q}(\vec{r}_2 - \vec{r}_{n_0})) \times \\ &\times \int_{-\infty}^{\infty} d(\delta \vec{r}_n) f(\delta \vec{r}_n) \left(\exp(-i\vec{g}\delta \vec{r}_n) - \exp\left(-\frac{g^2 \sigma^2}{2}\right) \right) \left(\exp(i\vec{q}\delta \vec{r}_n) - \exp\left(-\frac{q^2 \sigma^2}{2}\right) \right). \end{aligned}$$

В полученном выражении вычислим интегралы по $d(\delta \vec{r}_n)$, получим:

$$\begin{aligned} \langle \delta U_{nucl}(\vec{r}_1) \delta U_{nucl}(\vec{r}_2) \rangle_T &= \sum_n \int \frac{d^3 \vec{g}}{(2\pi)^3} \int \frac{d^3 \vec{q}}{(2\pi)^3} \frac{(4\pi Z_1 Z_2 e^2)^2}{g^2 q^2} \exp(i\vec{g}\vec{r}_1 - i\vec{q}\vec{r}_2) \times \\ &\times \exp(i\vec{r}_{n_0}(\vec{q} - \vec{g})) \left(\exp\left(-\frac{(\vec{g} - \vec{q})^2 \sigma^2}{2}\right) - \exp\left(-\frac{(g^2 + q^2) \sigma^2}{2}\right) \right). \end{aligned}$$

Бесконечные суммы в последнем выражении являются дельта-функциями Дирака

$$\begin{aligned} \sum_n \exp(i\vec{r}_{n_0}(\vec{q} - \vec{g})) &= \sum_{n_y} \exp(in_y a_y (q_y - g_y)) \sum_{n_z} \exp(in_z a_z (q_z - g_z)) = \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} dn_y \exp(in_y a_y (q_y - g_y)) \int_{-\infty}^{\infty} dn_z \exp(in_z a_z (q_z - g_z)) = \frac{(2\pi)^2}{a_y a_z} \delta(q_y - g_y) \delta(q_z - g_z). \end{aligned}$$

В свою очередь дельта-функции снимут интегрирование по dg_y и dg_z

$$\begin{aligned} \langle \delta U_{nucl}(\vec{r}_1) \delta U_{nucl}(\vec{r}_2) \rangle_T &= \int \frac{dg_x}{(2\pi)^3} \int \frac{dq_x dq_y dq_z}{(2\pi)^3} \frac{(4\pi Z_1 Z_2 e^2)^2}{(g_x^2 + q_y^2 + q_z^2)(q_x^2 + q_y^2 + q_z^2)} \times \\ &\times \frac{(2\pi)^2}{a_y a_z} \exp(i(g_x x_1 - q_x x_2) + iq_y(y_1 - y_2) + iq_z(z_1 - z_2)) \times \\ &\times \left(\exp\left(-\frac{(g_x - q_x)^2 \sigma_x^2}{2}\right) - \exp\left(-\frac{(g_x^2 + q_x^2) \sigma_x^2}{2} - q_y^2 \sigma_y^2 - q_z^2 \sigma_z^2\right) \right). \end{aligned}$$

Заменим регулярное расположение атомов в кристаллографической плоскости на хаотическое, устремив σ_y и σ_z к бесконечности. В этом случае второе слагаемое в скобках будет равно нулю. Малоугловой характер рассеяния каналированных частиц обеспечивается условием:

$$g_x^2 + g_y^2 + g_z^2 \approx g_x^2 + g_y^2,$$

$$q_x^2 + q_y^2 + q_z^2 \approx q_x^2 + q_y^2.$$

Далее для простоты положим $\sigma_x = \sigma_y = \sigma$. С учетом этого последнее выражение переписывается в виде

$$\begin{aligned} \langle \delta U_{nucl}(\vec{r}_1) \delta U_{nucl}(\vec{r}_2) \rangle_T &= \int \frac{dg_x}{(2\pi)^3} \int \frac{dq_x dq_y dq_z}{(2\pi)^3} \frac{(4\pi Z_1 Z_2 e^2)^2}{(g_x^2 + q_y^2)(q_x^2 + q_y^2)} \times \\ &\times \frac{(2\pi)^2}{a_y a_z} \exp(i(g_x x_1 - q_x x_2) + i q_y (y_1 - y_2) + i q_z (z_1 - z_2)) \exp\left(-\frac{(g_x - q_x)^2 \sigma^2}{2}\right). \end{aligned}$$

Вычислим интеграл по dq_z , принимая во внимание, что $z = vt$,

$$\int dq_z \exp(i q_z (z_1 - z_2)) = \int dq_z \exp(i v q_z (t_1 - t_2)) = \frac{2\pi}{v} \delta(t_1 - t_2),$$

получим:

$$\begin{aligned} \langle \delta U_{nucl}(x_1, y_1, t_1) \delta U_{nucl}(x_2, y_2, t_2) \rangle_T &= \int \frac{dg_x}{(2\pi)^3} \int \frac{dq_x dq_y}{(2\pi)^3} \frac{(4\pi Z_1 Z_2 e^2)^2}{(g_x^2 + q_y^2)(q_x^2 + q_y^2)} \times \\ &\times \frac{(2\pi)^3}{v a_y a_z} \delta(t_1 - t_2) \exp(i(g_x x_1 - q_x x_2) + i q_y (y_1 - y_2)) \exp\left(-\frac{(g_x - q_x)^2 \sigma^2}{2}\right). \end{aligned} \quad (1.6.6)$$

1.6.2. Усреднение корреляционной функции флуктуаций потенциальной энергии взаимодействия каналированной частицы с атомными электронами кристалла

Флуктуацию потенциальной энергии взаимодействия быстрого иона с атомными электронами кристалла $\delta U_{el} \vec{r}$ положим равной разности между средним значением потенциальной энергии $\langle U_{el} \vec{r} \rangle$ и потенциальной энергией $U_{el} \vec{r}$:

$$\delta U_{el} \vec{r} = \langle U_{el} \vec{r} \rangle - U_{el} \vec{r}.$$

Определим $\langle U_{el} \vec{r} \rangle$. Флуктуации потенциальной энергии $U_{el} \vec{r}$ вызываются квантовыми флуктуациями, которые испытывают атомные электроны, и тепловыми колебаниям ядер атомов кристалла. Произведем усреднение (1.6.3) по квадрату модуля волновой функций атома кристалла и по независимым тепловым колебаниям атомов кристалла. Соответствующие средние будем обозначать $\langle \dots \rangle_e$ и $\langle \dots \rangle_T$. Таким образом, $\langle U_{el} \vec{r} \rangle \equiv \langle U_{el} \vec{r} \rangle_{e,T}$.

Разложим в интеграл Фурье потенциальную энергию взаимодействия $U_{el}(\vec{r})$ (см. приложение 5):

$$U_{el}(\vec{r}) = - \sum_n \sum_{j=1}^{Z_2} \int \frac{d^3 \vec{g}}{2\pi^3} \frac{4\pi Z_1 e^2}{g^2} \exp i \vec{g} \cdot \vec{r} - \vec{r}_{n_j} .$$

Усреднение $U_{el}(\vec{r})$ по квадрату модуля волновой функции атома кристалла будем производить аналогично [14].

$$\langle U_{el}(\vec{r}) \rangle_e = - \sum_n \int \frac{d^3 \vec{g}}{2\pi^3} \frac{4\pi Z_1 e^2}{g^2} \left\langle \sum_{j=1}^{Z_2} \exp i \vec{g} \cdot \vec{r} - \vec{r}_{n_j} \right\rangle_e .$$

Рассмотрим сомножитель $\left\langle \sum_{j=1}^{Z_2} \exp i \vec{g} \cdot \vec{r} - \vec{r}_{n_j} \right\rangle_e$. Если волновая функция

налетающей частицы, находящейся в основном квантовом состоянии $\Psi_0 = \Psi_0(\delta \vec{r}_{j_1}, \dots, \delta \vec{r}_{j_{Z_1}})$ нормирована на единицу $\int d\tau_{j_1} \dots d\tau_{j_{Z_2}} |\Psi_0|^2 = 1$, где $d\tau_{j_1} = d(\delta x_{j_1}) d(\delta y_{j_1}) d(\delta z_{j_1})$ — элемент объема j_1 -го электрона налетающей частицы, то этот сомножитель можно переписать в виде:

$$\left\langle \sum_{j=1}^{Z_2} \exp i \vec{g} \cdot \vec{r} - \vec{r}_{n_j} \right\rangle_e = \sum_{j=1}^{Z_2} \int d\tau_{j_1} \dots d\tau_{j_{Z_2}} |\Psi_0|^2 \exp i \vec{g} \cdot \vec{r} - \vec{r}_{n_j} .$$

Последнее выражение можно преобразовать следующим образом:

$$\left\langle \sum_{j=1}^{Z_2} \exp i \vec{g} \cdot \vec{r} - \vec{r}_{n_j} \right\rangle_e = \sum_{j=1}^{Z_2} \int d\tau_{j_1} \left(\int \prod_{i \neq j_1}^{Z_2} d\tau_{ji} |\Psi_0|^2 \right) \exp i \vec{g} \cdot \vec{r} - \vec{r}_{n_j} .$$

В фигурных скобках стоит плотность вероятности для j_1 -го электрона:

$$\rho(\delta\vec{r}_{j_1}) = Z_2 \int \prod_{i \neq j_1}^{Z_2} d\tau_{ji} |\Psi_0|^2.$$

Электронная плотность $\rho(\delta\vec{r}_{j_1})$ нормирована на полное число электронов атома кристалла:

$$\int d\tau_{j_1} \rho(\delta\vec{r}_{j_1}) = Z_2.$$

С учетом того, что $\vec{r}_{n_j} = \vec{r}_n + \delta\vec{r}_{n_j}$, рассматриваемый сомножитель запишется в виде:

$$\left\langle \sum_{j=1}^{Z_2} \exp i\vec{g} \cdot \vec{r} - \vec{r}_{n_j} \right\rangle_e = \exp i\vec{g} \cdot \vec{r} - \vec{r}_n \sum_{j_1=1}^{Z_2} \frac{1}{Z_2} \int d\tau_{j_1} \rho(\delta\vec{r}_{j_1}) \exp -i\vec{g} \cdot \delta\vec{r}_{j_1}.$$

Величину

$$F(g) = \int d\tau_{j_1} \rho(\delta\vec{r}_{j_1}) \exp(-i\vec{g} \cdot \delta\vec{r}_{j_1})$$

назовем форм-фактором атома кристалла. Таким образом, потенциальная энергия взаимодействия быстрой частицы с атомами кристалла, усредненная по квадрату модуля волновой функции атомов кристалла равна:

$$\langle U_{el}(\vec{r}) \rangle_e = - \sum_n \int \frac{d^3\vec{g}}{2\pi^3} \frac{4\pi Z_1 e^2}{g^2} F(g) \exp i\vec{g} \cdot \vec{r} - \vec{r}_n.$$

Как и в предыдущем пункте, усреднение $\langle U_{el}(\vec{r}) \rangle_e$ по независимым тепловым колебаниям атома кристалла произведем с помощью функции распределения Гаусса:

$$\langle U_{el}(\vec{r}) \rangle_{e,T} = \int_{-\infty}^{\infty} d(\delta\vec{r}_n) f(\delta\vec{r}_n) \langle U_{nucl}(\vec{g}) \rangle_e.$$

Принимая во внимание, что $\vec{r}_n = \vec{r}_{n_0} + \delta\vec{r}_n$, выражение для $\langle U_{el}(\vec{r}) \rangle_{e,T}$ переписывается в виде:

$$\begin{aligned}
\langle U_{el} \vec{r} \rangle_{e,T} = & - \sum_n \int \frac{d^3 \vec{g}}{2\pi^3} \frac{4\pi Z_1 e^2}{g^2} F(g) \exp i \vec{g} \cdot \vec{r} - \vec{r}_{n_0} \times \\
& \times \int_{-\infty}^{\infty} d \delta x_n f(\delta x_n) \exp -i g_x \delta x_n \int_{-\infty}^{\infty} d \delta y_n f(\delta y_n) \exp -i g_y \delta y_n \times \\
& \times \int_{-\infty}^{\infty} d \delta z_n f(\delta z_n) \exp -i g_z \delta z_n .
\end{aligned}$$

Интегрирование приведет к следующему результату:

$$\langle U_{el} \vec{r} \rangle_{e,T} = - \sum_n \int \frac{d^3 \vec{g}}{2\pi^3} \frac{4\pi Z_1 e^2}{g^2} F(g) \exp i \vec{g} \cdot \vec{r} - \vec{r}_{n_0} \exp \left(-\frac{g^2 \sigma^2}{2} \right).$$

Таким образом, выражение для флуктуации потенциальной энергии взаимодействия быстрой частицы с электронами атомов кристалла имеет следующий вид:

$$\begin{aligned}
\delta U_{el}(\vec{r}) = & - \sum_n \int \frac{d^3 \vec{g}}{2\pi^3} \frac{4\pi Z_1 e^2}{g^2} \exp i \vec{g} \cdot \vec{r} - \vec{r}_{n_0} \times \\
& \times \left(\sum_{j=1}^{Z_2} \exp -i \vec{g} \cdot \delta \vec{r}_n + \delta \vec{r}_{n_j} - F(g) \exp \left(-\frac{g^2 \sigma^2}{2} \right) \right). \tag{1.6.7}
\end{aligned}$$

Используя выражение (1.6.7), составим корреляционную функцию флуктуаций потенциальной энергии взаимодействия каналированной частицы с электронами атомов кристалла:

$$\begin{aligned}
\delta U_{el}(\vec{r}_1) \delta U_{el}(\vec{r}_2) = & \sum_{n_1, n_2} \int \frac{d^3 \vec{g}}{2\pi^3} \int \frac{d^3 \vec{q}}{2\pi^3} \frac{4\pi Z_1 e^2}{g^2 q^2} \exp i \vec{g} \cdot \vec{r}_1 - \vec{r}_{n_0} \exp -i \vec{q} \cdot \vec{r}_2 - \vec{r}_{n_0} \times \\
& \times \left(\sum_{j_1=1}^{Z_2} \exp -i \vec{g} \cdot \delta \vec{r}_{n_1} + \delta \vec{r}_{n_{j_1}} - F(g) \exp \left(-\frac{g^2 \sigma^2}{2} \right) \right) \times \\
& \times \left(\sum_{j_2=1}^{Z_2} \exp i \vec{q} \cdot \delta \vec{r}_{n_2} + \delta \vec{r}_{n_{j_2}} - F(q) \exp \left(-\frac{q^2 \sigma^2}{2} \right) \right).
\end{aligned}$$

Произведем усреднение данной корреляционной функции по квадрату модуля волновой функций атома кристалла:

$$\begin{aligned} \langle \delta U_{el}(\vec{r}_1) \delta U_{el}(\vec{r}_2) \rangle_e &= \sum_{n_1, n_2} \int \frac{d^3 \vec{g}}{2\pi^3} \int \frac{d^3 \vec{q}}{2\pi^3} \frac{4\pi Z_1 e^2}{g^2 q^2} \exp i\vec{g} \cdot \vec{r}_1 - \vec{r}_{n_0} \exp -i\vec{q} \cdot \vec{r}_2 - \vec{r}_{n_0} \times \\ &\times \left\langle \left(\sum_{j_1=1}^{Z_2} \exp \left[-i\vec{g} \cdot \delta \vec{r}_{n_1} + \delta \vec{r}_{n_{j_1}} \right] - F(g) \exp \left(-\frac{g^2 \sigma^2}{2} \right) \right) \right\rangle_{e_1} \times \\ &\times \left\langle \left(\sum_{j_2=1}^{Z_2} \exp \left[i\vec{q} \cdot \delta \vec{r}_{n_2} + \delta \vec{r}_{n_{j_2}} \right] - F(q) \exp \left(-\frac{q^2 \sigma^2}{2} \right) \right) \right\rangle_{e_2}. \end{aligned}$$

Сомножитель $\left\langle \left(\sum_{j_1=1}^{Z_2} \exp -i\vec{g} \cdot \delta \vec{r}_{n_1} + \delta \vec{r}_{n_{j_1}} - F(g) \exp \left(-\frac{g^2 \sigma^2}{2} \right) \right) \right\rangle_{e_1}$ после

процедуры усреднения примет вид:

$$\begin{aligned} &\left\langle \left(\sum_{j_1=1}^{Z_2} \exp -i\vec{g} \cdot \delta \vec{r}_{n_1} + \delta \vec{r}_{n_{j_1}} - F(g) \exp \left(-\frac{g^2 \sigma^2}{2} \right) \right) \right\rangle_{e_1} = \\ &= F(g) \left(\sum_{j_1=1}^{Z_2} \exp -i\vec{g} \cdot \delta \vec{r}_{n_1} - \exp \left(-\frac{g^2 \sigma^2}{2} \right) \right). \end{aligned}$$

Аналогичное выражение получим и для второго сомножителя. Окончательно среднее запишется в виде:

$$\begin{aligned} \langle \delta U_{el}(\vec{r}_1) \delta U_{el}(\vec{r}_2) \rangle_e &= \sum_{n_1, n_2} \int \frac{d^3 \vec{g}}{2\pi^3} \int \frac{d^3 \vec{q}}{2\pi^3} \frac{4\pi Z_1 e^2}{g^2 q^2} \exp i\vec{g} \cdot \vec{r}_1 - \vec{r}_{n_0} \exp -i\vec{q} \cdot \vec{r}_2 - \vec{r}_{n_0} \times \\ &\times F(g) F(q) \left(\sum_{j_1=1}^{Z_2} \exp -i\vec{g} \cdot \delta \vec{r}_{n_1} - \exp \left(-\frac{g^2 \sigma^2}{2} \right) \right) \left(\sum_{j_2=1}^{Z_2} \exp i\vec{q} \cdot \delta \vec{r}_{n_2} - \exp \left(-\frac{q^2 \sigma^2}{2} \right) \right). \end{aligned}$$

Произведем усреднение $\langle \delta U_{el}(\vec{r}_1) \delta U_{el}(\vec{r}_2) \rangle_e$ по независимым тепловым колебаниям атома кристалла:

$$\begin{aligned} \langle \delta U_{el}(\vec{r}_1) \delta U_{el}(\vec{r}_2) \rangle_{e,T} &= \sum_{n_1, n_2} \int \frac{d^3 \vec{g}}{2\pi^3} \int \frac{d^3 \vec{q}}{2\pi^3} \frac{4\pi Z_1 e^2}{g^2 q^2} \exp i\vec{g} \cdot \vec{r}_1 - \vec{r}_{n_0} \times \\ &\times \exp -i\vec{q} \cdot \vec{r}_2 - \vec{r}_{n_0} F(g) F(q) \int_{-\infty}^{\infty} d \delta \vec{r}_{n_1} f(\delta \vec{r}_{n_1}) \left(\sum_{j_1=1}^{Z_2} \exp -i\vec{g} \cdot \delta \vec{r}_{n_1} - \exp \left(-\frac{g^2 \sigma^2}{2} \right) \right) \times \\ &\times \int_{-\infty}^{\infty} d \delta \vec{r}_{n_2} f(\delta \vec{r}_{n_2}) \left(\sum_{j_2=1}^{Z_2} \exp i\vec{q} \cdot \delta \vec{r}_{n_2} - \exp \left(-\frac{q^2 \sigma^2}{2} \right) \right). \end{aligned}$$

Интеграл $\int_{-\infty}^{\infty} d\vec{r}_{n_1} f(\delta\vec{r}_{n_1}) \left(\sum_{j_1=1}^{Z_2} \exp \left[-i\vec{g} \delta\vec{r}_{n_1} \right] - \exp \left(-\frac{g^2 \sigma^2}{2} \right) \right) = 0$, поэтому

$$\langle \delta U_{el}(\vec{r}_1) \delta U_{el}(\vec{r}_2) \rangle_{e,T} = 0 \text{ при } n_1 \neq n_2, j_1 \neq j_2.$$

Рассмотрим случай $n_1 = n_2 = n$, $j_1 = j_2 = j$:

$$\begin{aligned} \delta U_{el}(\vec{r}_1) \delta U_{el}(\vec{r}_2) = & \sum_n \int \frac{d^3 \vec{g}}{2\pi^3} \int \frac{d^3 \vec{q}}{2\pi^3} \frac{4\pi Z_1 e^2}{g^2 q^2} \exp \left[i\vec{g} \cdot \vec{r}_1 - \vec{r}_{n_0} \right] \exp \left[-i\vec{q} \cdot \vec{r}_2 - \vec{r}_{n_0} \right] \times \\ & \times \left(\sum_{j=1}^{Z_2} \exp \left[-i\vec{g} \cdot \delta\vec{r}_n + \delta\vec{r}_{n_j} \right] - F(g) \exp \left(-\frac{g^2 \sigma^2}{2} \right) \right) \times \\ & \times \left(\sum_{j=1}^{Z_2} \exp \left[i\vec{q} \cdot \delta\vec{r}_n + \delta\vec{r}_{n_j} \right] - F(q) \exp \left(-\frac{q^2 \sigma^2}{2} \right) \right). \end{aligned}$$

Произведем операции усреднения данной корреляционной функции:

$$\begin{aligned} \langle \delta U_{el}(\vec{r}_1) \delta U_{el}(\vec{r}_2) \rangle_e = & \sum_n \int \frac{d^3 \vec{g}}{2\pi^3} \int \frac{d^3 \vec{q}}{2\pi^3} \frac{4\pi Z_1 e^2}{g^2 q^2} \exp \left[i\vec{g} \cdot \vec{r}_1 - \vec{r}_{n_0} \right] \exp \left[-i\vec{q} \cdot \vec{r}_2 - \vec{r}_{n_0} \right] \times \\ & \times \left\langle \left(\sum_{j=1}^{Z_2} \exp \left[-i\vec{g} \cdot \delta\vec{r}_n + \delta\vec{r}_{n_j} \right] - F(g) \exp \left(-\frac{g^2 \sigma^2}{2} \right) \right) \times \right. \\ & \left. \times \left(\sum_{j=1}^{Z_2} \exp \left[i\vec{q} \cdot \delta\vec{r}_n + \delta\vec{r}_{n_j} \right] - F(q) \exp \left(-\frac{q^2 \sigma^2}{2} \right) \right) \right\rangle_e. \end{aligned}$$

Проведем необходимые вычисления, получим:

$$\begin{aligned} \langle \delta U_{el}(\vec{r}_1) \delta U_{el}(\vec{r}_2) \rangle_{e,T} = & \sum_n \int \frac{d^3 \vec{g}}{2\pi^3} \int \frac{d^3 \vec{q}}{2\pi^3} \frac{4\pi Z_1 e^2}{g^2 q^2} \exp \left[i\vec{g} \cdot \vec{r}_1 - \vec{r}_{n_0} \right] \times \\ & \times \exp \left[-i\vec{q} \cdot \vec{r}_2 - \vec{r}_{n_0} \right] \left(F \left| \vec{g} - \vec{q} \right| \exp \left(-\frac{(\vec{g} - \vec{q})^2 \sigma^2}{2} \right) + F(g) F(q) \exp \left(-\frac{g^2 + q^2 \sigma^2}{2} \right) \right). \end{aligned}$$

Как и в предыдущем пункте, заменим бесконечную сумму дельта-функцией Дирака, проинтегрируем по dg_y и dg_z , устремим σ_y и σ_z к бесконечности, применим условие малоуглового рассеяния, и вычислим интеграл по dq_z . Так же для простоты положим $\sigma_x = \sigma_y = \sigma$. В итоге получим:

$$\begin{aligned}
\langle \delta U_{el}(x_1, y_1, t_1) \delta U_{el}(x_1, y_1, t_1) \rangle_{e,T} &= \int \frac{dg_x}{2\pi^3} \int \frac{dq_x dq_y}{2\pi^3} \frac{4\pi Z_1 e^2}{g_x^2 + q_y^2} \frac{2\pi^3}{q_x^2 + q_y^2} \frac{1}{v a_y a_z} \times \\
&\times \delta(t_1 - t_2) \exp i(g_x x_1 - q_x x_2 + i q_y (y_1 - y_2)) F(|\vec{g} - \vec{q}|) \exp\left(-\frac{(g_x - q_x)^2 \sigma^2}{2}\right), \\
F(|\vec{g} - \vec{q}|) &= F(g_x, q_x).
\end{aligned}
\tag{1.6.8}$$

1.6.3. Компонента $D_{xx}(x)$ коэффициента диффузии

Согласно (1.6.4) рассматриваемая компонента диффузионной матрицы состоит из двух слагаемых:

$$\begin{aligned}
D_{xx}^{nucl}(x) &= \int dt_2 \frac{\partial}{\partial x_1} \frac{\partial}{\partial x_2} \overline{\delta U_{nucl}(x_1, y_1, t_1) \delta U_{nucl}(x_2, y_2, t_2)}, \\
D_{xx}^{el}(x) &= \int dt_2 \frac{\partial}{\partial x_1} \frac{\partial}{\partial x_2} \overline{\delta U_{el}(x_1, y_1, t_1) \delta U_{el}(x_2, y_2, t_2)}.
\end{aligned}$$

Определим $D_{xx}^{nucl}(x)$. Используя (1.6.6) запишем:

$$\begin{aligned}
D_{xx}^{nucl}(x) &= \int dt_2 \frac{\partial}{\partial x_1} \frac{\partial}{\partial x_2} \int \frac{dg_x}{(2\pi)^3} \int \frac{dq_x dq_y}{(2\pi)^3} \frac{(4\pi Z_1 Z_2 e^2)^2}{(g_x^2 + q_y^2)(q_x^2 + q_y^2)} \frac{(2\pi)^3}{v a_y a_z} \delta(t_1 - t_2) \times \\
&\times \exp(i(g_x x_1 - q_x x_2) + i q_y (y_1 - y_2)) \exp\left(-\frac{(g_x - q_x)^2 \sigma^2}{2}\right).
\end{aligned}$$

Возьмем производные $\frac{\partial}{\partial x_1}$ и $\frac{\partial}{\partial x_2}$. Так как $x_1 = x_1(t_1)$, $x_2 = x_2(t_2)$, $y_1 = y_1(t_1)$, $y_2 = y_2(t_2)$, то после интегрирования по dt_2 получим, что $x_1 = x_2 = x$, $y_1 = y_2 = y$. Компонента $D_{xx}^{nucl}(x)$ коэффициента диффузии перепишется в следующем виде

$$D_{xx}^{nucl}(x) = \int \frac{dg_x}{(2\pi)^3} \int \frac{dq_x dq_y}{(2\pi)^3} \frac{(4\pi Z_1 Z_2 e^2)^2}{(g_x^2 + q_y^2)(q_x^2 + q_y^2)} \frac{(2\pi)^3}{\nu a_y a_z} \times \\ \times g_x q_x \exp(ix(g_x - q_x)) \exp\left(-\frac{(g_x - q_x)^2 \sigma^2}{2}\right).$$

Вычислим интеграл по dq_y аналогично следующему

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx \frac{1}{(a^2 + x^2)(b^2 + x^2)} = \frac{\pi}{ab(a+b)},$$

получим

$$D_{xx}^{nucl}(x) = \int \frac{dg_x}{(2\pi)^3} \int \frac{dq_x}{(2\pi)^3} (4\pi Z_1 Z_2 e^2)^2 \frac{\pi}{(g_x + q_x)} \frac{(2\pi)^3}{\nu a_y a_z} \times \\ \times \exp(ix(g_x - q_x)) \exp\left(-\frac{(g_x - q_x)^2 \sigma^2}{2}\right).$$

Перейдем к переменным Вигнера:

$$g_x + q_x = Q, \quad g_x - q_x = q, \quad dg_x dq_x = \frac{dQ dq}{2},$$

$$D_{xx}^{nucl}(x) = \int \frac{dQ}{Q} \int \frac{dq}{(2\pi)^3} (4\pi Z_1 Z_2 e^2)^2 \frac{\pi}{2\nu a_y a_z} \exp(ixq) \exp\left(-\frac{q^2 \sigma^2}{2}\right).$$

Величина $L_n = \int \frac{dQ}{Q}$ — это, так называемый, ядерный кулоновский логарифм.

Ядерный кулоновский логарифм в случае релятивистских энергий равен

$$L_n = 2 \ln \left(\frac{138}{Z_2^{1/3}} \right),$$

в случае МэВ-энергий —

$$L_n = \ln \left(\frac{1,29 a E M_2}{Z_1 Z_2 e^2 (M_1 + M_2)} \right),$$

где E — энергия частицы; M_1 , M_2 — массы быстрой частицы и ядра атома кристалла.

Вычислим оставшийся интеграл

$$\int dq \exp(ixq) \exp\left(-\frac{q^2 \sigma^2}{2}\right) = \frac{\sqrt{2\pi}}{\sigma} \exp\left(-\frac{x^2}{2\sigma^2}\right).$$

В результате получим компоненту $D_{xx}^{nucl}(x)$ коэффициента диффузии в направлении оси OX :

$$D_{xx}^{nucl}(x) = \frac{(Z_1 Z_2 e^2)^2}{\nu a_y a_z} \frac{\sqrt{2\pi}}{\sigma} \exp\left(-\frac{x^2}{2\sigma^2}\right) L_n. \quad (1.6.9)$$

Определим D_{xx}^{el} x . Используя (1.6.8) запишем:

$$D_{xx}^{el}(x) = \int dt_2 \frac{\partial}{\partial x_1} \frac{\partial}{\partial x_2} \int \frac{dg_x}{(2\pi)^3} \int \frac{dq_x dq_y}{(2\pi)^3} \frac{(4\pi Z_1 e^2)^2}{(g_x^2 + q_y^2)(q_x^2 + q_y^2)} \frac{(2\pi)^3}{\nu a_y a_z} \delta(t_1 - t_2) \times \\ \times \exp\left(i(g_x x_1 - q_x x_2) + i q_y (y_1 - y_2)\right) F(|\vec{g} - \vec{q}|) \exp\left(-\frac{(g_x - q_x)^2 \sigma^2}{2}\right),$$

где $F(|\vec{g} - \vec{q}|) = F(g_x, q_x)$. Так как форм-фактор связан с электронной плотностью $\rho(\vec{r})$

$$F(|\vec{g} - \vec{q}|) = \int d^3 \vec{r} \rho(\vec{r}) \exp i (\vec{g} - \vec{q}) \vec{r} ,$$

можем записать:

$$F(g_x, q_x) = \int dx \frac{\rho(x)}{a_y a_z} \exp i (g_x - q_x) x .$$

Возьмем производные $\frac{\partial}{\partial x_1}$, $\frac{\partial}{\partial x_2}$ и интеграл по времени. Коэффициент

диффузии перепишется в следующем виде:

$$D_{xx}^{el}(x) = \int \frac{dg_x}{(2\pi)^3} \int \frac{dq_x dq_y}{(2\pi)^3} \frac{(4\pi Z_1 e^2)^2}{(g_x^2 + q_y^2)(q_x^2 + q_y^2)} \frac{(2\pi)^3}{\nu a_y a_z} \times \\ \times g_x q_x \exp(ix(g_x - q_x)) F(|\vec{g} - \vec{q}|) \exp\left(-\frac{(g_x - q_x)^2 \sigma^2}{2}\right),$$

Вычислим интеграл по dq_y , получим

$$D_{xx}^{el}(x) = \int \frac{dg_x}{(2\pi)^3} \int \frac{dq_x}{(2\pi)^3} (4\pi Z_1 e^2)^2 \frac{\pi}{(g_x + q_x) v a_y a_z} \times \\ \times \exp(ix(g_x - q_x)) F(|\vec{g} - \vec{q}|) \exp\left(-\frac{(g_x - q_x)^2 \sigma^2}{2}\right).$$

Перейдем к переменным Вигнера

$$D_{xx}^{el}(x) = \int \frac{dQ}{Q} \int \frac{dq}{(2\pi)^3} (4\pi Z_1 e^2)^2 \frac{\pi}{2v a_y a_z} \exp(ixq) F(|\vec{g} - \vec{q}|) \exp\left(-\frac{q^2 \sigma^2}{2}\right),$$

где $F(q) = \int dx \frac{\rho(x)}{a_y a_z} \exp(iqx)$. Величину $L_e = \int \frac{dQ}{Q}$ называют электронным

кулоновским логарифмом. Электронный кулоновский логарифм равен

$$L_e = \ln\left(\frac{2m_e c^2 \beta^2 \gamma^2}{I}\right) - \beta^2,$$

где m_e — масса электрона; c — скорость света; $E_{0e} = m_e c^2$ — энергия покоя

электрона, $E_{0e} = 0,511$ МэВ; $\gamma = \frac{1}{\sqrt{1 - \beta^2}}$ — лоренц-фактор, $\beta = \frac{v}{c}$; I —

средний ионизационный потенциал кристалла, $I = 11,5 Z_2$.

Вычислим интеграл $\int dq F(q) \exp(ixq) \exp\left(-\frac{q^2 \sigma^2}{2}\right)$. Представим

последнюю экспоненту в интеграле как

$$\exp\left(-\frac{q^2 \sigma^2}{2}\right) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} \int_{-\infty}^{\infty} d(\delta x) \exp\left(-\frac{(\delta x)^2}{2\sigma^2} - iq\delta x\right).$$

Таким образом, имеем:

$$\int dq F(q) \exp(ixq) \exp\left(-\frac{q^2 \sigma^2}{2}\right) = \\ = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} \int_{-\infty}^{\infty} d(\delta x) \exp\left(-\frac{(\delta x)^2}{2\sigma^2}\right) \int dq F(q) \exp(iq(x - \delta x)).$$

Применив к последнему выражению для форм-фактора обратное преобразование Фурье, получим:

$$\rho(x) = \frac{1}{2\pi} \int dq \frac{F(q)}{a_y a_z} \exp(iqx),$$

то есть внутренний интеграл представляет собой электронную плотность:

$$\int dq F(q) \exp(iqx) \exp\left(-\frac{q^2 \sigma^2}{2}\right) = \frac{2\pi a_y a_z}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} \int_{-\infty}^{\infty} d(\delta x) \exp\left(-\frac{(\delta x)^2}{2\sigma^2}\right) \rho(x - \delta x).$$

Оставшийся интеграл — это усреднение электронной плотности по тепловым колебаниям. Теперь интересующий нас интеграл переписывается в виде:

$$\int dq F(q) \exp(iqx) \exp\left(-\frac{q^2 \sigma^2}{2}\right) = 2\pi a_y a_z \langle \rho(x) \rangle_T.$$

Окончательно компонента $D_{xx}^{el}(x)$ коэффициента диффузии запишется в виде

$$D_{xx}^{el}(x) = (Z_1 e^2)^2 \frac{2\pi}{v} \langle \rho(x) \rangle_T L_e. \quad (1.6.10)$$

Электронную плотность изолированной атомной цепочки в плоскостном канале представим в виде разложения в тригонометрический ряд Фурье:

$$\rho(x) = \frac{1}{d^3} \sum_{n_x} \sum_{i=1}^8 F(g) \exp\left(-\frac{\sigma^2 g^2}{2}\right) \cos\left(2\pi \left(\frac{n_x}{a_x} (x - x_i)\right)\right),$$

где d — период решетки кристалла; $F(g)$ — форм-фактор атомов кристалла; σ — средняя амплитуда тепловых колебаний атомов кристалла;

\vec{g} — вектор обратной решетки, $g = \frac{2\pi n_x}{a_x}$, n_x — целое число, a_x — период

кристаллической решетки в направлении оси OX ; x_i — координаты атомов элементарной ячейки кристалла.

Итак, компонента $D_{xx}(x, y)$ коэффициента диффузии имеет вид

$$D_{xx}(x) = \frac{(Z_1 Z_2 e^2)^2}{v a_y a_z} \frac{\sqrt{2\pi}}{\sigma} \exp\left(-\frac{x^2}{2\sigma^2}\right) L_n + (Z_1 e^2)^2 \frac{2\pi}{v} \langle \rho(x) \rangle_T L_e. \quad (1.6.11)$$

1.6.4. Компонента D_{xy} x коэффициента диффузии

Согласно (1.6.4) рассматриваемая компонента диффузионной матрицы состоит из двух слагаемых:

$$D_{xy}^{nucl}(x) = \int dt_2 \frac{\partial}{\partial x_1} \frac{\partial}{\partial y_1} \overline{\delta U_{nucl}(x_1, y_1, t_1) \delta U_{nucl}(x_2, y_2, t_2)},$$

$$D_{xy}^{el}(x) = \int dt_2 \frac{\partial}{\partial x_1} \frac{\partial}{\partial y_1} \overline{\delta U_{el}(x_1, y_1, t_1) \delta U_{el}(x_2, y_2, t_2)}.$$

Определим компоненту $D_{xy}^{nucl}(x)$ коэффициента диффузии. С учетом (1.6.6) имеем:

$$D_{xy}^{nucl}(x) = - \int \frac{dg_x}{(2\pi)^3} \int \frac{dq_x dq_y}{(2\pi)^3} \frac{(4\pi Z_1 Z_2 e^2)^2}{(g_x^2 + q_y^2)(q_x^2 + q_y^2)} \frac{(2\pi)^3}{\nu a_y a_z} g_x q_y \times \\ \times \exp(ix(g_x - q_x)) \exp\left(-\frac{(g_x - q_x)^2 \sigma^2}{2}\right).$$

Далее проинтегрируем по dq_y . Для этого введем новые переменные

$$t = q_x^2, \quad dt = 2q_y dq_y.$$

Получим

$$\int_{-\infty}^{\infty} dq_y \frac{q_y}{(g_x^2 + q_y^2)(q_x^2 + q_y^2)} = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dt}{2} \frac{1}{(t + g_y^2)(t + g_x^2)}.$$

Так как пределы интегрирования совпадают, то данный интеграл равен нулю, следовательно, равна нулю и компонента $D_{xy}^{nucl}(x)$ коэффициента диффузии

$$D_{xy}^{nucl}(x) = 0. \quad (1.6.12)$$

Определим компоненту D_{xy}^{el} x коэффициента диффузии. С учетом (1.6.8) имеем:

$$D_{xy}^{el}(x) = \int dt_2 \frac{\partial}{\partial x_1} \frac{\partial}{\partial y_1} \int \frac{dg_x}{(2\pi)^3} \int \frac{dq_x dq_y}{(2\pi)^3} \frac{(4\pi Z_1 e^2)^2}{(g_x^2 + q_y^2)(q_x^2 + q_y^2)} \frac{(2\pi)^3}{v a_y a_z} \delta(t_1 - t_2) \times \\ \times \exp(i(g_x x_1 - q_x x_2) + i q_y (y_1 - y_2)) F(|\vec{g} - \vec{q}|) \exp\left(-\frac{(g_x - q_x)^2 \sigma^2}{2}\right).$$

Возьмем производные $\frac{\partial}{\partial x_1}, \frac{\partial}{\partial y_1}$, проинтегрируем по dt_2 ,

$$D_{xy}^{el}(x) = - \int \frac{dg_x}{(2\pi)^3} \int \frac{dq_x dq_y}{(2\pi)^3} \frac{(4\pi Z_1 e^2)^2}{(g_x^2 + q_y^2)(q_x^2 + q_y^2)} \frac{(2\pi)^3}{v a_y a_z} \times \\ \times g_x q_y \exp(ix(g_x - q_x)) F(|\vec{g} - \vec{q}|) \exp\left(-\frac{(g_x - q_x)^2 \sigma^2}{2}\right),$$

где $F(|\vec{g} - \vec{q}|) = F(g_x, q_x)$.

Проинтегрируем по dq_y . Как показано выше,

$$\int_{-\infty}^{\infty} dq_y \frac{q_y}{(g_x^2 + q_y^2)(q_x^2 + q_y^2)} = 0,$$

поэтому

$$D_{xy}^{el}(x) = 0. \quad (1.6.13)$$

Итак, компонента D_{xy} x коэффициента диффузии равна нулю

$$D_{xy} x = 0. \quad (1.6.14)$$

1.6.5. Компонента D_{yx} x коэффициента диффузии

Слагаемые, составляющие, данную компоненту отличаются от слагаемых рассмотренных в предыдущем пункте только порядком дифференцирования. Так как смешанные производные равны, то можем записать:

$$D_{yx}^{nuc} x = 0, \quad (1.6.15)$$

$$D_{yx}^{el} x = 0. \quad (1.6.16)$$

Компонента D_{yx} x коэффициента диффузии равна нулю

$$D_{yx} x = 0. \quad (1.6.17)$$

1.6.6. Компонента D_{yy} x коэффициента диффузии

Аналогично выше приведенной процедуре определим компоненту $D_{yy}^{nucl}(x)$ коэффициента диффузии. Учитывая (1.6.6) имеем:

$$D_{yy}^{nucl}(x) = \int \frac{dg_x}{(2\pi)^3} \int \frac{dq_x dq_y}{(2\pi)^3} \frac{(4\pi Z_1 Z_2 e^2)^2}{(g_x^2 + q_y^2)(q_x^2 + q_y^2)} \times \\ \times \frac{(2\pi)^3}{\nu a_y a_z} q_y^2 \exp(ix(g_x - q_x)) \exp\left(-\frac{(g_x - q_x)^2 \sigma^2}{2}\right).$$

Вычислим интеграл по dq_y аналогично следующему

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx \frac{x^2}{(a^2 + x^2)(b^2 + x^2)} = \frac{\pi}{a + b},$$

перейдем к переменным Вигнера, введем ядерный кулоновский логарифм и проинтегрируем по dq . После проделанных операций получим:

$$D_{yy}^{nucl}(x) = \frac{(Z_1 Z_2 e^2)^2}{\nu a_y a_z} \frac{\sqrt{2\pi}}{\sigma} \exp\left(-\frac{x^2}{2\sigma^2}\right) L_n. \quad (1.6.18)$$

Определим составляющую $D_{yy}^{el}(x)$ коэффициента диффузии:

$$D_{yy}^{el} x = \int dt_2 \frac{\partial}{\partial y_1} \frac{\partial}{\partial y_2} \int \frac{dg_x}{2\pi^3} \int \frac{dq_x dq_y}{2\pi^3} \frac{4\pi Z_1 e^2}{g_x^2 + q_y^2} \frac{2\pi^3}{q_x^2 + q_y^2} \frac{2\pi^3}{\nu a_y a_z} \times \\ \times \delta(t_1 - t_2) \exp i(g_x x_1 - q_x x_2 + i q_y y_1 - y_2) F(|\vec{g} - \vec{q}|) \exp\left(-\frac{g_x - q_x}{2} \sigma^2\right),$$

где $F |\vec{g} - \vec{q}| = F g_x, q_x = \int dx \frac{\rho}{a_y a_z} \exp i g_x - q_x x$. Как и прежде,

проделаем следующие операции: возьмем производные $\frac{\partial}{\partial y_1}$, $\frac{\partial}{\partial y_2}$,

проинтегрируем по dt_2 , проинтегрируем по dq_y , перейдем к переменным Вигнера, введем электронный кулоновский логарифм, вычислим интеграл по dq . В итоге получим следующее выражение для $D_{yy}^{el} x$

$$D_{yy}^{el} x = Z_1 e^2 \frac{2\pi}{v} \langle \rho x \rangle_T L_e. \quad (1.6.19)$$

Итак, компонента $D_{yy} x$ коэффициента диффузии имеет вид

$$D_{yy} x = \frac{Z_1 Z_2 e^2}{v a_y a_z} \frac{\sqrt{2\pi}}{\sigma} \exp\left(-\frac{x^2}{2\sigma^2}\right) L_n + Z_1 e^2 \frac{2\pi}{v} \langle \rho x \rangle_T L_e. \quad (1.6.20)$$

Так как мы имеем только две ненулевые компоненты коэффициента диффузии, то в дальнейшем будем использовать следующее обозначение

$$D x = D_{xx} x = D_{yy} x. \quad (1.6.21)$$

Таким образом, стохастический подход к теории каналирования привел к выражениям для ядерного коэффициента диффузии, который с логарифмической точностью совпадает с тем, что был предложен Линхардом [2], а для электронного — с тем, что был предложен Китагавой и Оцуки [4].

1.7 Моделирование процессов, связанных с каналированием

Ранее была разработана компьютерная программа моделирования траекторий быстрых заряженных частиц в плоскостных каналах алмазоподобных кристаллов, названная PST (the Phase Space of Transversal coordinates and velocities), т.к. моделирование производится в фазовом

пространстве поперечных координат и скоростей [15]. Применяемый для расчёта траекторий численный метод основан на решении системы дифференциальных уравнений Рунге-Кутты 4 порядка. Программа PST позволяет вести расчёт для положительно и отрицательно заряженных частиц (протоны, ионы, тяжёлые отрицательно заряженные частицы) в одном из трех плоскостных направлений (100), (110) и (111) кристаллов кремния, германия и алмаза. Возможен выбор потенциала изолированного атома и электронной плотности в приближении Мольера или Дойля-Тёрнера. С помощью программы PST можно получить следующие результаты: траектории, фазовые траектории, угловые и пространственные распределения для любого сечения кристалла, спектры потерь энергии на электронах, вероятности деканалирования (выходы частиц) и ориентационные зависимости.

В приложениях 1, 2, 3, 4 приведены уравнения движения теории осевого каналирования в пространстве поперечных координат и скоростей, в пространстве поперечных энергий и уравнение Фокера-Планка в пространстве поперечных энергий, а так же получены компоненты коэффициента диффузии, исходя из стохастического подхода к теории каналирования. К настоящему времени подготовлены все данные для модификации выше указанной программы для случая осевого каналирования. В дальнейшем планируется реализация программы на основе уравнений движения осевого каналирования.

Список литературы к главе 1

35. Физическая энциклопедия // Гл. ред. Прохоров А.М., М.: Советская энциклопедия, 1990. Т2, с. 235-236.
36. Линдхард Й. // УФН. 1969. Т. 99. №2. С. 249.
37. Таратин А.М. // Физика элементарных частиц и атомного ядра. 1998. Т.25. Вып.5. С.1063
38. Kitagawa M., Ohtsuki Y.H. // Phys. Rev. B. 1973. V. 8. №7. P. 3117.
39. Китель Ч. // Введение в физику твёрдого тела. М.: Наука, 1978. 789 с.
40. Ландау Л.Д., Ахиезер А.И., Лифшиц Е.М. // Курс общей физики. Механика и молекулярная физика. М.: Наука, 1969. С. 131-139.
41. Кощеев В.П. Ланжевеновский подход к теории каналирования. Сургут: Изд-во СурГУ. 2001. 85с.
42. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. // Теоретическая физика. Механика. Т1. М.: Наука, 1988. С. 66-68.
43. Матвеев Н.М. // Обыкновенные дифференциальные уравнения. Санкт-Петербург: Специальная литература. 1996. С. 165-166.
44. Баврин И.И., Матросов В.Л. Высшая математика. М.: ВЛАДОС. 2002. 398 с.
45. Рытов С.М. // Введение в статистическую радиофизику. Т1. М: Наука. 1976. 491 с.
46. Двайт Г.Б. Таблицы интегралов и другие математические формулы. М: Наука. 1964.
47. Градштейн И.С., Рыжик И.М. Таблицы интегралов, сумм, рядов и произведений. М.: Изд-во физико-математической литературы. 1963. 1108 с.
48. Бете Г. Квантовая механика. М: Мир. 1965.
49. Кощеев В.П., Моргун Д.А., Сафин Н.В. и др. // Письма в ЖТФ. 2006. Т. 32. №. 9. С. 1.

Список приложений к главе 1

ПРИЛОЖЕНИЕ 1. Уравнения движения теории осевого каналирования

ПРИЛОЖЕНИЕ 2. Уравнение эволюции флуктуаций поперечной энергии каналированных частиц для случая осевого каналирования

ПРИЛОЖЕНИЕ 3. Уравнение Фоккера-Планка для случая осевого каналирования

ПРИЛОЖЕНИЕ 4. Коэффициент диффузии для случая осевого каналирования

П.4.1. Усреднение корреляционной функции флуктуаций потенциальной энергии взаимодействия каналированной частицы с ядрами атомов кристалла

П.4.2. Усреднение корреляционной функции флуктуаций потенциальной энергии взаимодействия каналированной частицы с атомными электронами кристалла

П.4.3. Компонента D_{xx} x, y коэффициента диффузии

П.4.4. Компонента $D_{xy}(x, y)$ коэффициента диффузии

П.4.5. Компонента $D_{yx}(x, y)$ коэффициента диффузии

П.4.6. Компонента $D_{yy}(x, y)$ коэффициента диффузии

Глава 2

Потенциальная энергия взаимодействия быстрой налетающей частицы с атомом кристалла

- 2.1. Фурье-компонента потенциальной энергии взаимодействия налетающего атома с атомом кристалла
- 2.2. Потенциальная энергия взаимодействия налетающего атома с атомом кристалла
- 2.3. Потенциальная энергия взаимодействия налетающего атома с атомом кристалла с учетом принципа Паули
- 2.4. Потенциальная энергия взаимодействия иона с атомом кристалла
- 2.5. Потенциальная энергия взаимодействия иона с атомом кристалла с учетом принципа Паули

Глава 2

Потенциальная энергия взаимодействия быстрой налетающей частицы с атомом кристалла

2.1. Фурье-компонента потенциальной энергии взаимодействия налетающего атома с атомом кристалла

Рассмотрим процесс столкновения атома с зарядом Z_1e с кристаллом, заряд атомов, которого Z_2e . Будем говорить о быстром атоме, подразумевая, что скорость налетающего атома больше скоростей атомных электронов. Другими словами, распределение электронов в атоме за время взаимодействия не изменяется. Это приближение теоретически и экспериментально подтверждено для систем двигающихся с околосветовой скоростью. Так согласно [1] в системе координат, двигающейся со скоростью, соответствующей лоренц-фактору $\gamma \sim 1,4 - 1,6$ с точностью порядка $10^{-4} - 10^{-5}$ наблюдается замедление времени. Данное приближение применимо и к инертным газам. В [2] полагается, что электронные оболочки атомов инертных газов при взаимодействии искажаются незначительно.

Потенциальная энергия взаимодействия налетающего атома с атомом кристалла складывается из кулоновского потенциала атомных ядер, кулоновских потенциалов атомных электронов, кулоновских потенциалов ядра налетающего атома с атомными электронами кристалла и кулоновских потенциалов атомных ядер кристалла с электронами налетающего атома:

$$V = \frac{Z_1 Z_2 e^2}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|} + \sum_{j_1=1}^{Z_1} \sum_{j_2=1}^{Z_2} \frac{e^2}{|\vec{r}_{1j_1} - \vec{r}_{2j_2}|} - \sum_{j_2=1}^{Z_2} \frac{Z_1 e^2}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_{2j_2}|} - \sum_{j_1=1}^{Z_1} \frac{Z_2 e^2}{|\vec{r}_2 - \vec{r}_{1j_1}|}, \quad (2.1.1)$$

где \vec{r}_1 и \vec{r}_2 — векторы, определяющие положение ядра налетающего атома и атома кристалла; \vec{r}_{1j_1} и \vec{r}_{2j_2} — векторы, определяющие положение j_1 -го электрона налетающего атома и j_2 -го электрона атома кристалла, причем $\vec{r}_{1j_1} = \vec{r}_1 + \delta\vec{r}_{j_1}$, $\vec{r}_{2j_2} = \vec{r}_2 + \delta\vec{r}_{j_2}$, $\delta\vec{r}_{j_1}$, $\delta\vec{r}_{j_2}$ — векторы смещения j_1 -го электрона налетающего атома и j_2 -го электрона атома кристалла.

Флуктуации потенциальной энергии взаимодействия (2.1.1) вызываются квантовыми флуктуациями, которые испытывают атомные электроны, и тепловыми колебаниями ядра атома кристалла. Произведем усреднение (2.1.1) по квадратам модулей волновых функций налетающего атома, атома кристалла и по независимым тепловым колебаниям атома кристалла. Соответствующие средние будем обозначать $\langle \dots \rangle_{e1}$, $\langle \dots \rangle_{e2}$, $\langle \dots \rangle_T$.

Разложение потенциальной энергии взаимодействия (2.1.1) в интеграл Фурье имеет вид (см. приложение 5):

$$V = \int \frac{d^3 \vec{g}}{2\pi^3} \left(\frac{4\pi Z_1 Z_2 e^2}{g^2} \exp i\vec{g} \cdot \vec{r}_1 - \vec{r}_2 + \frac{4\pi e^2}{g^2} \sum_{j_1=1}^{Z_1} \sum_{j_2=1}^{Z_2} \exp i\vec{g} \cdot \vec{r}_{1j_1} - \vec{r}_{2j_2} - \right. \\ \left. - \frac{4\pi Z_2 e^2}{g^2} \sum_{j_1=1}^{Z_1} \exp i\vec{g} \cdot \vec{r}_2 - \vec{r}_{1j_1} - \frac{4\pi Z_1 e^2}{g^2} \sum_{j_2=1}^{Z_2} \exp i\vec{g} \cdot \vec{r}_1 - \vec{r}_{2j_2} \right).$$

Усредним последнее выражение по квадрату модуля волновой функции налетающего атома:

$$\langle V \rangle_{e1} = \int \frac{d^3 \vec{g}}{2\pi^3} \left(\frac{4\pi Z_1 Z_2 e^2}{g^2} \exp i\vec{g} \cdot \vec{r}_1 - \vec{r}_2 + \frac{4\pi e^2}{g^2} \left\langle \sum_{j_1=1}^{Z_1} \sum_{j_2=1}^{Z_2} \exp i\vec{g} \cdot \vec{r}_{1j_1} - \vec{r}_{2j_2} \right\rangle_{e1} - \right. \\ \left. - \frac{4\pi Z_2 e^2}{g^2} \left\langle \sum_{j_1=1}^{Z_1} \exp i\vec{g} \cdot \vec{r}_2 - \vec{r}_{1j_1} \right\rangle_{e1} - \frac{4\pi Z_1 e^2}{g^2} \sum_{j_2=1}^{Z_2} \exp i\vec{g} \cdot \vec{r}_1 - \vec{r}_{2j_2} \right).$$

Процедура усреднения по квадрату модуля волновой функции рассмотрена в п. 1.6.2. Запишем лишь окончательные результаты:

$$\left\langle \sum_{j_1=1}^{Z_1} \sum_{j_2=1}^{Z_2} \exp i \vec{g} \cdot \vec{r}_{1j_1} - \vec{r}_{2j_2} \right\rangle_{e1} = F_1(g) \sum_{j_2=1}^{Z_2} \exp i \vec{g} \cdot \vec{r}_1 - \vec{r}_{2j_2} ,$$

$$\left\langle \sum_{j_1=1}^{Z_1} \exp i \vec{g} \cdot \vec{r}_2 - \vec{r}_{1j_1} \right\rangle_{e1} = F_1(g) \exp i \vec{g} \cdot \vec{r}_1 - \vec{r}_2 ,$$

где $F_1(g)$ — форм-фактор налетающего атома. Таким образом, запишем:

$$\langle V \rangle_{e1} = \int \frac{d^3 \vec{g}}{2\pi^3} \left(\frac{4\pi Z_2 e^2}{g^2} Z_1 - F_1(g) \exp i \vec{g} \cdot \vec{r}_1 - \vec{r}_2 - \right. \\ \left. - \frac{4\pi e^2}{g^2} Z_1 - F_1(g) \sum_{j_2=1}^{Z_2} \exp i \vec{g} \cdot \vec{r}_1 - \vec{r}_{2j_2} \right).$$

Произведем усреднение $\langle V \rangle_{e1}$ по квадрату модуля волновой функции атома кристалла, получим:

$$\langle V \rangle_{e1,e2} = \int \frac{d^3 \vec{g}}{2\pi^3} \left(\frac{4\pi Z_2 e^2}{g^2} Z_1 - F_1(g) \exp i \vec{g} \cdot \vec{r}_1 - \vec{r}_2 - \right. \\ \left. - \frac{4\pi e^2}{g^2} Z_1 - F_1(g) \left\langle \sum_{j_2=1}^{Z_2} \exp i \vec{g} \cdot \vec{r}_1 - \vec{r}_{2j_2} \right\rangle_{e2} \right),$$

$$\left\langle \sum_{j_2=1}^{Z_2} \exp i \vec{g} \cdot \vec{r}_1 - \vec{r}_{2j_2} \right\rangle_{e2} = F_2(g) \exp i \vec{g} \cdot \vec{r}_1 - \vec{r}_2 ,$$

где $F_2(g)$ — форм-фактор атома кристалла. Таким образом, потенциальная энергия взаимодействия налетающего атома с атомом кристалла, усредненная по квадратам модулей волновых функций налетающего атома и атома кристалла, имеет вид:

$$\langle V \rangle_{e1,e2} = \int \frac{d^3 \vec{g}}{2\pi^3} \frac{4\pi e^2}{g^2} Z_1 - F_1(g) Z_2 - F_2(g) \exp i \vec{g} \cdot \vec{r}_1 - \vec{r}_2 .$$

Последнее выражение представляет собой разложение в интеграл Фурье. Оно может быть переписано в виде:

$$\langle V \rangle_{e1,e2} = \int \frac{d^3 \vec{g}}{2\pi^3} V(g) \exp i \vec{g} \cdot \vec{r}_1 - \vec{r}_2 ,$$

где

$$V(\vec{g}) = \frac{4\pi e^2}{g^2} \left[Z_1 - F_1(\vec{g}) \right] \left[Z_2 - F_2(\vec{g}) \right]. \quad (2.1.2)$$

фурье-компонента потенциальной энергии взаимодействия налетающего атома с атомом кристалла.

Введем обозначения

$$\vec{r}_1 = \vec{r}, \quad \vec{r}_2 = \vec{r}_{n0} + \vec{\delta r}_n,$$

$$\vec{r}_{n0} = a_x n_x, a_y n_y, a_z n_z,$$

где \vec{r}_{n0} — вектор, определяющий положение элементарной ячейки кристалла, a_x, a_y, a_z — периоды кристаллической решетки в направлениях осей OX, OY, OZ ; n_x, n_y, n_z — целые числа; $\vec{\delta r}_n$ — вектор смещения n -го атома из узла кристаллической решетки. С учетом переобозначений выражение для $\langle V \rangle_{e1,e2}$ примет вид:

$$\langle V \rangle_{e1,e2} = \int \frac{d^3 \vec{g}}{(2\pi)^3} V(\vec{g}) \exp \left(i \vec{g} \cdot \vec{r} - \vec{r}_{n0} - \vec{\delta r}_n \right).$$

Усреднение полученного соотношения по независимым тепловым колебаниям атома кристалла (см. п. 1.6.1) приведет к следующему результату:

$$\langle V \rangle_{e1,e2,T} = \int \frac{d^3 \vec{g}}{(2\pi)^3} V(\vec{g}) \exp \left(i \vec{g} \cdot \vec{r} - \vec{r}_{n0} - \frac{g^2 \sigma^2}{2} \right),$$

где σ^2 — средний квадрат флуктуаций тепловых колебаний атома кристалла в расчете на одну степень свободы. Если $\sigma_x = \sigma_y = \sigma_z$, то можно записать $g_x^2 \sigma_x^2 + g_y^2 \sigma_y^2 + g_z^2 \sigma_z^2 = g^2 \sigma^2$.

Рассмотрим фурье-компоненту потенциальной энергии взаимодействия налетающего атома с атомом кристалла

$$V(\vec{g}) = \frac{4\pi e^2}{g^2} \left[Z_1 - F_1(\vec{g}) \right] \left[Z_2 - F_2(\vec{g}) \right].$$

Введя потенциалы налетающего атома

$$V_1(g) = \frac{4\pi e}{g^2} Z_1 - F_1(g)$$

и атома кристалла

$$V_2(g) = \frac{4\pi e}{g^2} Z_2 - F_2(g),$$

можем записать:

$$V(g) = \frac{g^2}{4\pi} V_1(g) V_2(g). \quad (2.1.3)$$

В работе потенциалы изолированных атомов выбирались в приближении экранированного кулоновского потенциала и приближении Мольера. Первый из них дается выражением

$$V^K(r) = \frac{Ze}{r} \exp(-\mu r),$$

где Ze — заряд атома; $\mu = \frac{1}{a}$, $a = 0,88534 a_0 Z^{-1/3}$ — радиус экранирования,

$a_0 = 0,529 \text{ \AA}$ — радиус Бора. Фурье-компонента потенциала в приближении Кулона имеет вид:

$$V^K(g) = \frac{4\pi Ze}{g^2 + \mu^2}.$$

Потенциал Мольера определяется как

$$V^M(r) = \frac{Ze}{r} \sum_{i=1}^3 \alpha_i \exp\left(-\frac{\beta_i r}{a}\right),$$

где α_i , β_i — безразмерные коэффициенты приближения Мольера, $\alpha_i = (0,35; 0,55; 0,10)$, $\beta_i = (0,3; 1,2; 6,0)$. Фурье-компонента потенциала в приближении Мольера имеет вид:

$$V^M(g) = 4\pi Ze \sum_{i=1}^3 \frac{\alpha_i}{\left(\frac{\beta_i}{a}\right)^2 + g^2}.$$

Для потенциалов взаимодействия ион-атом и атом-атом наиболее употребимы следующие аппроксимации:

1. приближение Мольер

$$V^M(r) = \frac{Z_1 Z_2 e^2}{r} \sum_{i=1}^3 \alpha_i \exp\left(-\frac{\beta_i r}{a}\right),$$

где $Z_1 e$, $Z_2 e$ — заряды быстрого иона (атома) и атома кристалла соответственно; a — радиус экранирования. Компонента Фурье потенциала взаимодействия в приближении Мольер определяется выражением

$$V^M(g) = 4\pi Z_1 Z_2 e^2 \sum_{i=1}^3 \frac{\alpha_i}{\left(\frac{\beta_i}{a}\right)^2 + g^2}.$$

2. приближение Дойля-Тернера

$$V^{D-T}(r) = 2a_0 Z_1 e^2 \sum_{i=1}^4 \frac{a_i}{\sqrt{2\pi B_i^3}} \exp\left(-\frac{r^2}{B_i}\right),$$

где $B_i = \frac{b_i}{4\pi^2}$. В таблице 1 приведены значения параметров a_i , b_i для кремния и германия.

Таблица 2.1.1. Значения параметров a_i , b_i потенциала Дойля-Тернера для кремния и германия.

Si		Ge	
$a_i, \text{\AA}$	$b_i, \text{\AA}^2$	$a_i, \text{\AA}$	$b_i, \text{\AA}^2$
2,1293	57,7748	2,4467	55,8930
2,5333	16,4756	2,7015	14,393
0,8349	2,8796	1,6157	2,4461
0,3216	0,3860	0,6009	0,3415

Компонента Фурье потенциала изолированного атома в приближении Дойля-Тернера имеет вид:

$$V^{D-T}(g) = 2\pi a_0 Z_1 e^2 \sum_{i=1}^4 a_i \exp\left(-\frac{B_i g^2}{4}\right).$$

3. потенциал Линдхарда

$$V^L(r) = \frac{Z_1 Z_2 e^2}{r} \left[1 - \left(1 + \frac{3a^2}{r^2} \right) \right]^{-1/2}.$$

Наиболее часто радиус экранирования выбирается в виде, предложенном Фирсовым и Линдхардом:

$$a_\phi = 0,88534 a_0 \left(Z_1^{1/2} + Z_2^{1/2} \right)^{-2/3},$$

$$a_L = 0,88534 a_0 \left(Z_1^{2/3} + Z_2^{2/3} \right)^{-1/2}.$$

Так же используются и другие аппроксимации потенциала изолированного атома и потенциала взаимодействия налетающей частицы с атомами кристалла, см., например, [2], [5], [6], [7], [8], [9], [10] и др.

2.2. Потенциальная энергия взаимодействия налетающего атома с атомом кристалла

Рассмотрим (2.1.3) в случае экранированного кулоновского потенциала. Имеем:

$$V_{at.-at.}(g) = \frac{4\pi Z_1 Z_2 e^2 g^2}{(g^2 + \mu_1^2)(g^2 + \mu_2^2)}.$$

Разложим фурье-компоненту потенциальной энергии взаимодействия $V_{at.-at.}(g)$ в интеграл Фурье

$$V_{at.-at.}(\vec{r}) = \int V_{at.-at.}(\vec{g}) \exp(-i\vec{g}\vec{r}) \frac{d^3\vec{g}}{(2\pi)^3},$$

$$V_{at.-at.}(\vec{r}) = \int \frac{4\pi Z_1 Z_2 e^2 g^2}{(g^2 + \mu_1^2)(g^2 + \mu_2^2)} \exp(-i\vec{g}\vec{r}) \frac{d^3\vec{g}}{(2\pi)^3}.$$

Вычислив интеграл (см. приложение 6), окончательно получим:

$$V_{at.-at.}(r) = \frac{Z_1 Z_2 e^2}{r} \frac{\mu_1^2 \exp(-\mu_1 r) - \mu_2^2 \exp(-\mu_2 r)}{\mu_1^2 - \mu_2^2}. \quad (2.2.1)$$

Рассмотрим взаимодействие двух одинаковых атомов с зарядом Ze . Потенциал изолированного атома также выберем в приближении экранированного кулоновского потенциала. В этом случае фурье-компонента потенциальной энергии взаимодействия (2.1.3) переписывается в виде:

$$V_{at.-at.}(g) = \frac{4\pi(Ze)^2 g^2}{(g^2 + \mu^2)^2}.$$

Разложим это выражение в интеграл Фурье

$$V_{at.-at.}(\vec{r}) = \int \frac{4\pi(Ze)^2 g^2}{(g^2 + \mu^2)^2} \exp(-i\vec{g}\vec{r}) \frac{d^3\vec{g}}{(2\pi)^3}.$$

Вычислив интегралы (см. приложение 7), $V_{at.-at.}(r)$ для двух одинаковых атомов переписывается в виде:

$$V_{at.-at.}(r) = \frac{(Ze)^2}{2r} (2 - \mu r) \exp(-\mu r). \quad (2.2.2)$$

Экранированный кулоновский потенциал является наиболее простым видом приближения. Приведем результат потенциальной энергии взаимодействия налетающего атома с атомом кристалла, выбрав потенциалы изолированных атомов в приближении Мольера

$$V_{at.-at.}(g) = 4\pi Z_1 Z_2 e^2 g^2 \sum_{i=1}^3 \sum_{j=1}^3 \frac{\alpha_i \alpha_j}{(g^2 + \mu_i^2)(g^2 + \mu_j^2)},$$

где введены обозначения $\mu_i = \frac{\beta_i}{a_1}$, $a_1 = 0,88534 a_0 Z_1^{-1/3}$ — радиус

экранирования, $a_0 = 0,529 \text{ \AA}$ — радиус Бора, $\mu_j = \frac{\beta_j}{a_2}$, $a_2 = 0,88534 a_0 Z_2^{-1/3}$.

Как и в случае экранированного кулоновского потенциала, полученное выражение разложим в интеграл Фурье. В итоге получим (см. приложение 8):

$$V_{at.-at.}(r) = \frac{Z_1 Z_2 e^2}{r} \sum_{i=1}^3 \sum_{j=1}^3 \alpha_i \alpha_j \frac{\mu_i^2 \exp -\mu_i r - \mu_j^2 \exp -\mu_j r}{\mu_i^2 - \mu_j^2}. \quad (2.2.3)$$

Последнее выражение несложно преобразовать для случая взаимодействия двух одинаковых атомов с зарядом ядра Ze

$$V_{at.-at.}(r) = \frac{Ze^2}{r} \sum_{i=1}^3 \sum_{j=1}^3 \alpha_i \alpha_j \frac{\mu_i^2 \exp -\mu_i r - \mu_j^2 \exp -\mu_j r}{\mu_i^2 - \mu_j^2}. \quad (2.2.4)$$

Здесь $\mu_i = \frac{\beta_i}{a}$, $\mu_j = \frac{\beta_j}{a}$, $a = 0,88534 a_0 Z^{-1/3}$ — радиус экранирования, $a_0 = 0,529 \text{ \AA}$ — радиус Бора.

На рис. 2.2.1 изображены потенциальные энергии взаимодействия быстрых атомов серебра и кремния, определяемые выражениями (2.2.1) и (2.2.3). Для сравнения на этом же рисунке приведены потенциальные энергии взаимодействия атомов в приближении Мольер (использовался радиус экранирования Фирсова) и Дойля-Тернера. На рис. 2.2.2 изображены потенциальные энергии взаимодействия быстрых атомов углерода, определяемые выражениями (2.2.2) и (2.2.4), и потенциальная энергия взаимодействия атомов в приближении Мольер. Из рисунков видно, что потенциальная энергия взаимодействия быстрых атомов чувствительна к выбору потенциала изолированного атома. В случае выбора потенциалов изолированных атомов в приближении экранированного кулоновского потенциала и приближении Мольер наблюдаются потенциальные ямы, соответствующие притяжению атомов. При выборе потенциальных энергии взаимодействия атомов в приближениях Мольер и Дойля-Тернера наблюдается только отталкивание.

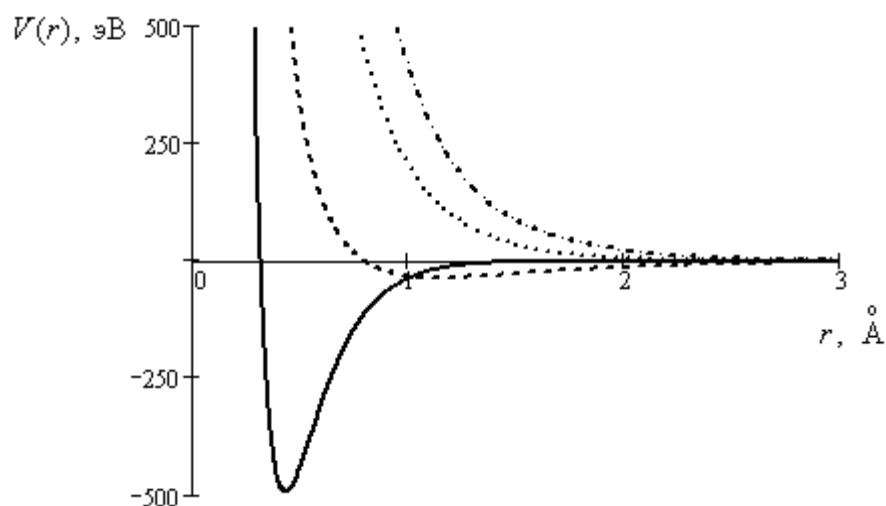


Рисунок 2.2.1. Потенциальные энергии взаимодействия быстрых атомов серебра и кремния без учета принципа Паули: сплошная линия — потенциалы изолированных атомов выбраны в приближении экранированного кулоновского потенциала (2.2.1); пунктирная — в приближении Мольер (2.2.3); точки — потенциальная энергия взаимодействия атомов выбрана в приближении Мольер; штрихпунктирная линия — потенциальная энергия взаимодействия атомов выбрана в приближении Дойля-Тернера

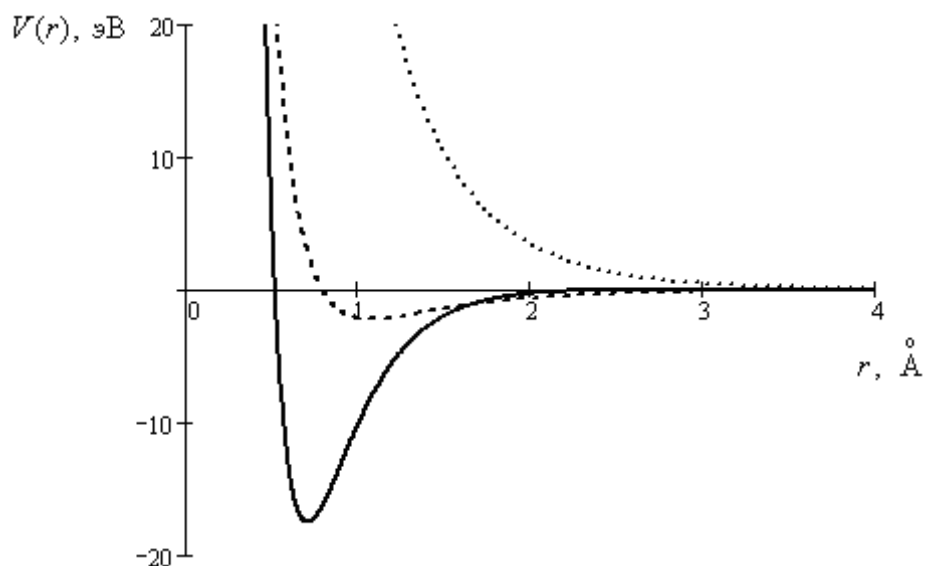


Рисунок 2.2.2. Потенциальные энергии взаимодействия быстрых атомов углерода без учета принципа Паули: сплошная линия — потенциалы изолированных атомов выбраны в приближении экранированного кулоновского потенциала (2.2.2); пунктирная — в приближении Мольер (2.2.4); точки — потенциальная энергия взаимодействия атомов выбрана в приближении Мольер

2.3. Потенциальная энергия взаимодействия налетающего атома с атомом кристалла с учетом принципа Паули

Аналогично тому, как это делается в кинетической теории [13] добавим к выражению для потенциала взаимодействия (2.1.3) множитель $\left(1 - \frac{F_{\min}(g)}{Z_{\min}}\right)$, с помощью которого будем учитывать принцип Паули, — переход электронов может произойти лишь в незанятые состояния

$$V_{at.-at.}^*(g) = \frac{g^2}{4\pi} V_1(g) V_2(g) \left(1 - \frac{F_{\min}(g)}{Z_{\min}}\right),$$

где Z_{\min} — минимальное значение из зарядовых чисел Z_1 и Z_2 , $F_{\min}(g)$ — соответствующий форм-фактор. Потенциалы налетающего атома $V_1(g)$ и атома кристалла $V_2(g)$ выберем в приближении экранированного кулоновского потенциала.

Рассмотрим случай $Z_{\min} = Z_1$, тогда

$$V_{at.-at.}^*(g) = \frac{g^2}{4\pi} V_1(g) V_2(g) \left(1 - \frac{F_1(g)}{Z_1}\right).$$

Определим форм-фактор из выражения для потенциала

$$V(g) = \frac{4\pi e}{g^2} [Z - F(g)]:$$

$$F(g) = Z - \frac{V(g)g^2}{4\pi e} = Z - \frac{g^2}{4\pi e} \frac{4\pi Ze}{g^2 + \mu^2} = Z \left(1 - \frac{g^2}{g^2 + \mu^2}\right) = \frac{Z\mu^2}{g^2 + \mu^2}.$$

Получим

$$V_{at.-at.}^*(g) = \frac{4\pi Z_1 Z_2 e^2 g^2}{(g^2 + \mu_1^2)(g^2 + \mu_2^2)} \left(1 - \frac{\mu_1^2}{g^2 + \mu_1^2}\right).$$

Разложим это выражение в интеграл Фурье

$$V_{at.-at.}^*(\vec{r}) = \int \frac{4\pi Z_1 Z_2 e^2 g^2}{(g^2 + \mu_1^2)(g^2 + \mu_2^2)} \left(1 - \frac{\mu_1^2}{g^2 + \mu_1^2}\right) \exp(-i\vec{g}\vec{r}) \frac{d^3\vec{g}}{(2\pi)^3}.$$

Вычислив интегралы (см. приложение 9), выражение для потенциальной энергии взаимодействия налетающего атома с зарядом $Z_1 e$ с атомом кристалла с зарядом $Z_2 e$ с учетом принципа Паули при условии, что $Z_{\min} = Z_1$ переписывается в виде:

$$V_{at.-at.}^*(r) = \frac{Z_1 Z_2 e^2}{r} \frac{\mu_1^2 \exp(-\mu_1 r) - \mu_2^2 \exp(-\mu_2 r)}{\mu_1^2 - \mu_2^2} - \frac{Z_1 Z_2 e^2}{2r} \frac{\mu_1^2}{(\mu_1^2 - \mu_2^2)^2} \left((\mu_1^3 r - \mu_1 \mu_2^2 r + 2\mu_2^2) \exp(-\mu_1 r) - 2\mu_2^2 \exp(-\mu_2 r) \right). \quad (2.3.1)$$

Рассмотрим случай $Z_{\min} = Z_2$, тогда

$$V_{at.-at.}^*(g) = \frac{g^2}{4\pi} V_1(g) V_2(g) \left(1 - \frac{F_2(g)}{Z_2}\right).$$

Используя выражение для форм-фактора, запишем

$$V_{at.-at.}^*(g) = \frac{4\pi Z_1 Z_2 e^2 g^2}{(g^2 + \mu_1^2)(g^2 + \mu_2^2)} \left(1 - \frac{\mu_2^2}{g^2 + \mu_2^2}\right).$$

Разложение этого выражения в интеграл Фурье приведет к следующему результату:

$$V_{at.-at.}^*(\vec{r}) = \int \frac{4\pi Z_1 Z_2 e^2 g^2}{(g^2 + \mu_1^2)(g^2 + \mu_2^2)} \left(1 - \frac{\mu_2^2}{g^2 + \mu_2^2}\right) \exp(-i\vec{g}\vec{r}) \frac{d^3\vec{g}}{(2\pi)^3}.$$

Вычислив интегралы (см. приложение 10), выражение для $V_{at.-at.}^*(r)$ для взаимодействия налетающего атома с зарядом $Z_1 e$ с атомами кристалла с зарядом $Z_2 e$ с учетом принципа Паули при условии, что $Z_{\min} = Z_2$ переписывается в виде:

$$V_{at.-at.}^*(r) = \frac{Z_1 Z_2 e^2}{r} \frac{\mu_1^2 \exp(-\mu_1 r) - \mu_2^2 \exp(-\mu_2 r)}{\mu_1^2 - \mu_2^2} +$$

$$+ \frac{Z_1 Z_2 e^2}{2r} \frac{\mu_2^2}{(\mu_1^2 - \mu_2^2)^2} \left(2\mu_1^2 \exp(-\mu_1 r) + (\mu_1^2 \mu_2 r - \mu_2^3 r - 2\mu_1^2) \exp(-\mu_2 r) \right). \quad (2.3.2)$$

На рис. 2.3.1 изображены потенциальные энергии взаимодействия быстрых атомов серебра и кремния, без учета и с учетом принципа Паули (выражения (2.2.1) и (2.3.2) соответственно).

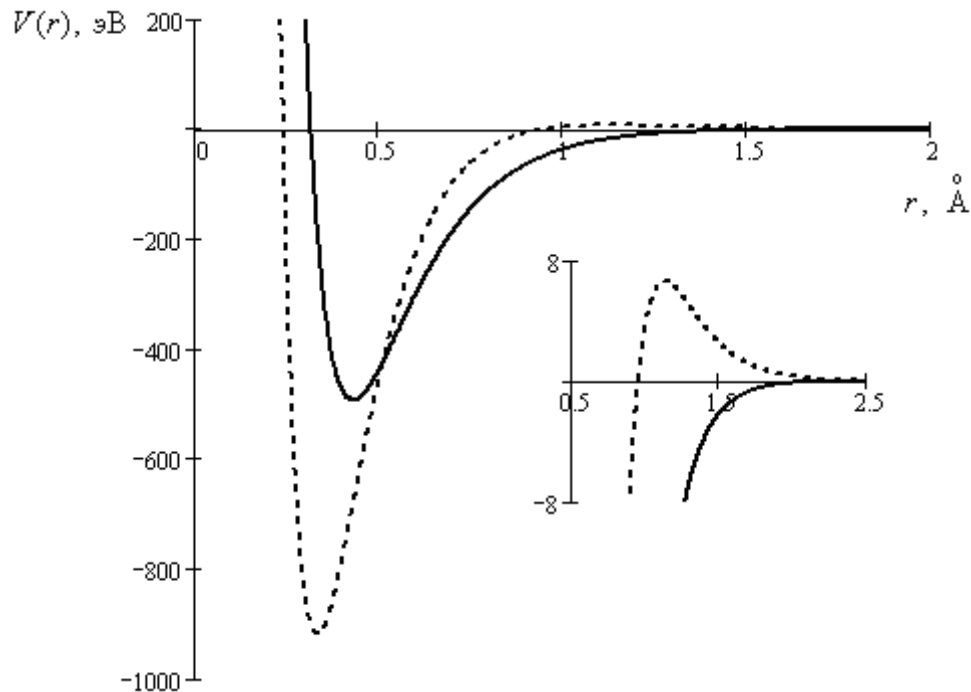


Рисунок 2.3.1. Потенциальные энергии взаимодействия быстрых атомов серебра и кремния без учета (сплошная линия) и с учетом (пунктирная линия) принципа Паули.

Потенциалы изолированных атомов выбраны в приближении экранированного кулоновского потенциала

Рассмотрим взаимодействие двух одинаковых атомов с зарядом Ze , учитывая принцип Паули. В этом случае фурье-компонента потенциальной энергии взаимодействия запишется в виде:

$$V_{at.-at.}^*(g) = \frac{g^2}{4\pi} (V(g))^2 \left(1 - \frac{F(g)}{Z} \right).$$

Выбрав потенциал изолированного атома в приближении экранированного кулоновского потенциала, имеем:

$$V_{at.-at.}^*(g) = \frac{4\pi(Ze)^2 g^2}{(g^2 + \mu^2)^2} \left(1 - \frac{\mu^2}{g^2 + \mu^2}\right).$$

Разложение последнего выражения в интеграл Фурье

$$V_{at.-at.}^*(\vec{r}) = \int \frac{4\pi(Ze)^2 g^2}{(g^2 + \mu^2)^2} \left(1 - \frac{\mu^2}{g^2 + \mu^2}\right) \exp(-i\vec{g}\vec{r}) \frac{d^3\vec{g}}{(2\pi)^3}$$

приведет к следующему результату (см. приложение 11):

$$V_{at.-at.}^*(r) = \frac{(Ze)^2}{8r} (\mu^2 r^2 - 7\mu r + 8) \exp(-\mu r). \quad (2.3.3)$$

На рис. 2.3.2 представлены потенциальные энергии взаимодействия двух быстрых атомов углерода, определяемые выражениями (2.2.2) и (2.3.3).

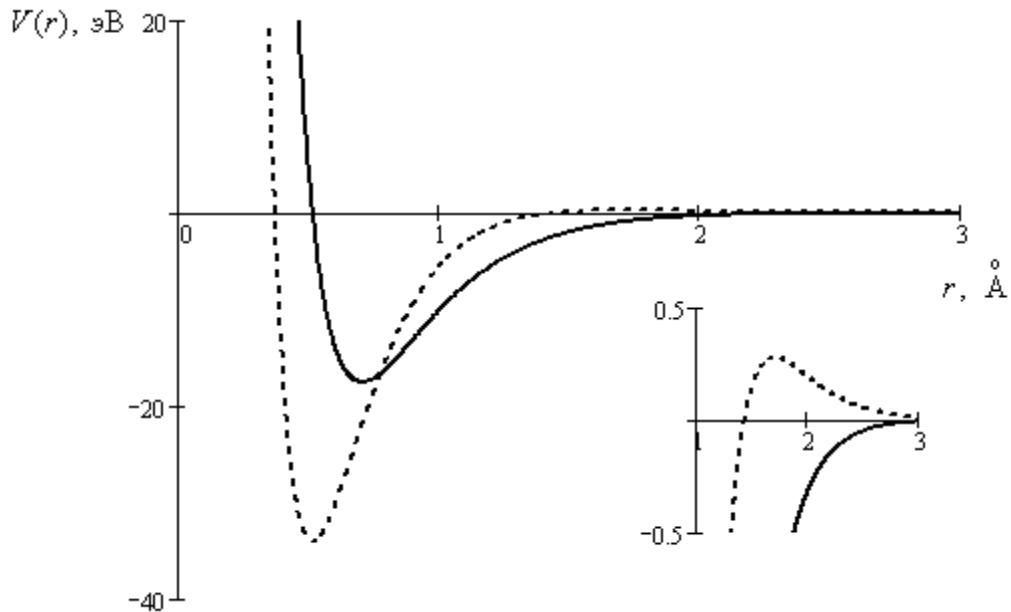


Рисунок 2.3.2. Потенциальные энергии взаимодействия двух быстрых атомов углерода без учета (сплошная линия) и с учетом (пунктирная линия) принципа Паули. Потенциалы изолированных атомов выбраны в приближении экранированного кулоновского потенциала

Для сравнения произведем учет принципа Паули в наиболее простом выражении для потенциальной энергии взаимодействия двух одинаковых атомов, где потенциалы изолированных атомов выбраны в приближении Мольер. В этом случае фурье-компонента потенциальной энергии взаимодействия запишется в виде:

$$V_{at.-at.}^*(g) = 4\pi(Ze)^2 g^2 \sum_{i=1}^3 \sum_{j=1}^3 \frac{\alpha_i \alpha_j}{(g^2 + \mu_i^2)(g^2 + \mu_j^2)} \left(1 - \frac{F(g)}{Z}\right).$$

Выражение для форм-фактора определим следующим образом. Потенциал изолированного атома представим в виде:

$$V(g) = \frac{4\pi e}{g^2} (Z - F(g)).$$

$V(g)$ выберем в приближении Мольер

$$4\pi Ze \sum_{i=1}^3 \frac{\alpha_i}{g^2 + \mu_i^2} = \frac{4\pi e}{g^2} (Z - F(g)),$$

и из полученного соотношения выразим форм-фактор

$$F(g) = Z \left(1 - g^2 \sum_{i=1}^3 \frac{\alpha_i}{g^2 + \mu_i^2}\right).$$

Обратив внимание на то, что сумма коэффициентов α_i приближения Мольер равна 1, последнее выражение может быть преобразовано к виду:

$$F(g) = Z \left(\sum_{i=1}^3 \alpha_i - g^2 \sum_{i=1}^3 \frac{\alpha_i}{g^2 + \mu_i^2}\right).$$

Таким образом, форм-фактор определяется выражением:

$$F(g) = Z \sum_{i=1}^3 \frac{\alpha_i \mu_i^2}{g^2 + \mu_i^2}.$$

Теперь фурье-компонента потенциальной энергии взаимодействия переписывается следующим образом:

$$V_{at.-at.}^*(g) = 4\pi(Ze)^2 g^2 \sum_{i=1}^3 \sum_{j=1}^3 \frac{\alpha_i \alpha_j}{(g^2 + \mu_i^2)(g^2 + \mu_j^2)} \left(1 - \sum_{i=1}^3 \frac{\alpha_i \mu_i^2}{g^2 + \mu_i^2}\right).$$

Разложение последнего выражения в интеграл Фурье

$$V_{at.-at.}^*(\vec{r}) = \int 4\pi (Ze)^2 g^2 \sum_{i=1}^3 \sum_{j=1}^3 \frac{\alpha_i \alpha_j}{(g^2 + \mu_i^2)(g^2 + \mu_j^2)} \left(1 - \sum_{i=1}^3 \frac{\alpha_i \mu_i^2}{g^2 + \mu_i^2} \right) \exp(-i\vec{g}\vec{r}) \frac{d^3 \vec{g}}{(2\pi)^3}$$

приведет к следующему результату (см. приложение 12):

$$V_{at.-at.}^*(r) = \frac{Ze^2}{r} \sum_{i=1}^3 \sum_{j=1}^3 \alpha_i \alpha_j \frac{\mu_i^2 \exp -\mu_i r - \mu_j^2 \exp -\mu_j r}{\mu_i^2 - \mu_j^2} - \frac{Ze^2}{2r} \sum_{i=1}^3 \sum_{i=1}^3 \sum_{j=1}^3 \alpha_i^2 \alpha_j \mu_i^2 \frac{\mu_i^3 r - \mu_i \mu_j^2 r + 2\mu_j^2 \exp -\mu_i r - 2\mu_j^2 \exp -\mu_j r}{\mu_i^2 - \mu_j^2} \quad (2.3.4)$$

На рис. 2.3.3 представлены потенциальные энергии взаимодействия двух быстрых атомов углерода без учета и с учетом принципа Паули в случае выбора потенциалов изолированных атомов в приближении Мольер (выражения (2.2.4) и (2.3.4) соответственно).

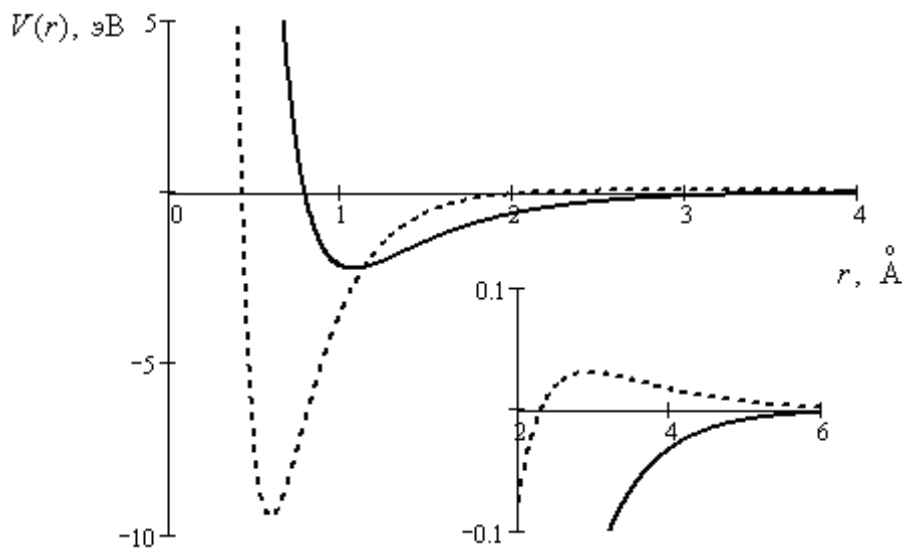


Рисунок 2.3.3. Потенциальные энергии взаимодействия двух быстрых атомов углерода без учета (сплошная линия) и с учетом (пунктирная линия) принципа Паули.

Потенциалы изолированных атомов выбраны в приближении Мольер

Из рис. 2.3.1-2.3.3 видно, что учет принципа Паули в выражении для потенциальной энергии взаимодействия привел к увеличению глубины потенциальной ямы, уменьшению расстояния между атомами, соответствующего минимуму потенциальной ямы и появлению области отталкивания. Можно показать, что увеличение зарядового числа

налетающего атома приведет к увеличению глубины потенциальной ямы и высоты потенциального барьера. Так же увеличение Z приведет к тому, что ширина области отталкивания увеличится, и максимум области отталкивания будет приходиться на меньшие расстояния.

Из рис. 2.3.4, который является объединением результатов рис. 2.3.2 и 2.3.3, следует, что при выборе потенциалов взаимодействия изолированных атомов в приближении Мольера глубина потенциальной ямы и высота потенциального барьера меньше, чем в случае выбора потенциалов изолированных атомов в приближении кулоновского экранированного потенциала. Таким образом, функция экранирования существенно влияет на конечный результат.

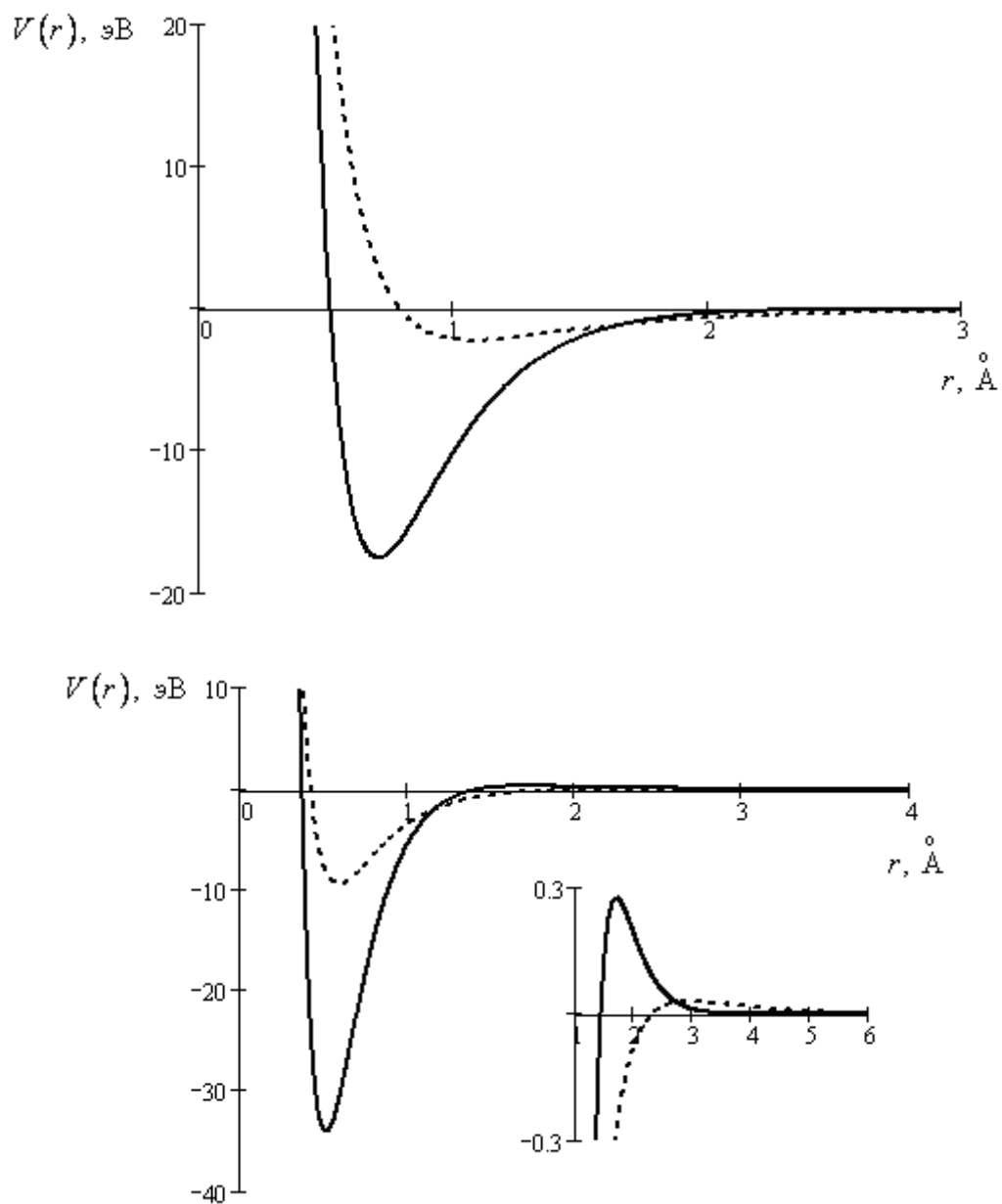


Рисунок 2.3.4. Потенциальные энергии взаимодействия двух быстрых атомов углерода без учета (вверху) и с учетом принципа Паули (внизу). Сплошная линия — потенциалы изолированных атомов выбраны в приближении экранированного кулоновского потенциала; пунктирная — в приближении Мольер

2.4. Потенциальная энергия взаимодействия иона с атомом кристалла

Определим потенциальную энергию взаимодействия налетающего иона с атомом кристалла. Для этого преобразуем фурье-компоненту потенциала налетающего атома, выраженную через атомный форм-фактор $F(g)$, добавив и отняв величину Z_e , которая будет определять, число электронов, оставшихся в атоме после ионизации:

$$V_1(g) = \frac{4\pi e}{g^2} Z_1 - F_1(g) = \frac{4\pi e}{g^2} Z_1 - Z_e + Z_e - F_1(g) = \frac{4\pi e}{g^2} Q + V_e(g),$$

где $V_e(g) = \frac{4\pi e(Z_e - F_e(g))}{g^2}$ — фурье-компонента потенциала налетающего иона с зарядом атомного ядра $Z_e e$. Величину $Q = Z_1 - Z_e$ назовем зарядовым состоянием налетающего иона.

Выражение (2.1.3) в случае взаимодействия налетающего иона с атомом кристалла $V_{ion-at.}(g)$ будет иметь вид:

$$V_{ion-at.}(g) = QeV_2(g) + \frac{g^2}{4\pi} V_e(g)V_2(g). \quad (2.4.1)$$

Выберем потенциалы $V_e(g)$ и $V_2(g)$ в виде экранированного кулоновского потенциала. Теперь последнее выражение переписывается в виде:

$$V_{ion-at.}(g) = \frac{4\pi QZ_2 e^2}{g^2 + \mu_2^2} + \frac{4\pi(Z_1 - Q)Z_2 e^2 g^2}{(g^2 + \mu_e^2)(g^2 + \mu_2^2)}.$$

Разложим полученное выражение в интеграл Фурье

$$V_{ion-at.}(\vec{r}) = \int \left(\frac{4\pi QZ_2 e^2}{g^2 + \mu_2^2} + \frac{4\pi(Z_1 - Q)Z_2 e^2 g^2}{(g^2 + \mu_e^2)(g^2 + \mu_2^2)} \right) \exp(-i\vec{g}\vec{r}) \frac{d^3\vec{g}}{(2\pi)^3}.$$

Вычислив интегралы (см. приложение 13), окончательно получим:

$$V_{ion-at.}(r) = \frac{QZ_2e^2}{r} \exp(-\mu_2 r) + \frac{(Z_1 - Q)Z_2e^2}{r} \frac{1}{\mu_e^2 - \mu_2^2} (\mu_e^2 \exp(-\mu_e r) - \mu_2^2 \exp(-\mu_2 r)). \quad (2.4.2)$$

Рассмотрим выражение (2.4.1) так же и в случае выбора потенциалов взаимодействия изолированных атомов в приближении Мольер

$$V(g) = 4\pi QZ_2e^2 \sum_{j=1}^3 \frac{\alpha_j}{\mu_j^2 + g^2} + 4\pi g^2 (Z_1 - Q)Z_2e^2 \sum_{i,j=1}^3 \frac{\alpha_i \alpha_j}{(\mu_i^2 + g^2)(\mu_j^2 + g^2)}.$$

Здесь $\mu_i = \frac{\beta_i}{a_e}$, $\mu_j = \frac{\beta_j}{a_2}$. Разложение последнего выражения в интеграл Фурье

приведет к следующему результату (см. приложение 14):

$$V(r) = \frac{QZ_2e^2}{r} \sum_{j=1}^3 \alpha_j \exp(-\mu_j r) + \frac{(Z_1 - Q)Z_2e^2}{r} \sum_{i,j=1}^3 \frac{\alpha_i \alpha_j}{\mu_i^2 - \mu_j^2} (\mu_i^2 \exp(-\mu_i r) - \mu_j^2 \exp(-\mu_j r)). \quad (2.4.3)$$

На рис. 2.4.1 представлены потенциальные энергии взаимодействия быстрого иона серебра при различных зарядовых состояниях Q с атомом кремния в случае выбора потенциалов изолированных иона и атома в приближении экранированного кулоновского потенциала и приближении Мольер. В случае выбора потенциалов изолированных иона и атома в приближении экранированного кулоновского потенциала увеличение зарядового состояния налетающего иона ведет к уменьшению глубины потенциальной ямы и увеличению расстояния, соответствующего минимуму потенциальной ямы. В случае выбора потенциалов изолированных иона и атома в приближении Мольер наблюдается только отталкивание; увеличение зарядового состояния иона ведет к увеличению расстояния, на которое могут сближаться ион и атом. Так же, как и в случае взаимодействия нейтральных атомов серебра и кремния (рис. 2.2.1), получили, что потенциальная энергия

взаимодействия налетающего иона с атомом кристалла чувствительна к выбору потенциала изолированных иона и атома.

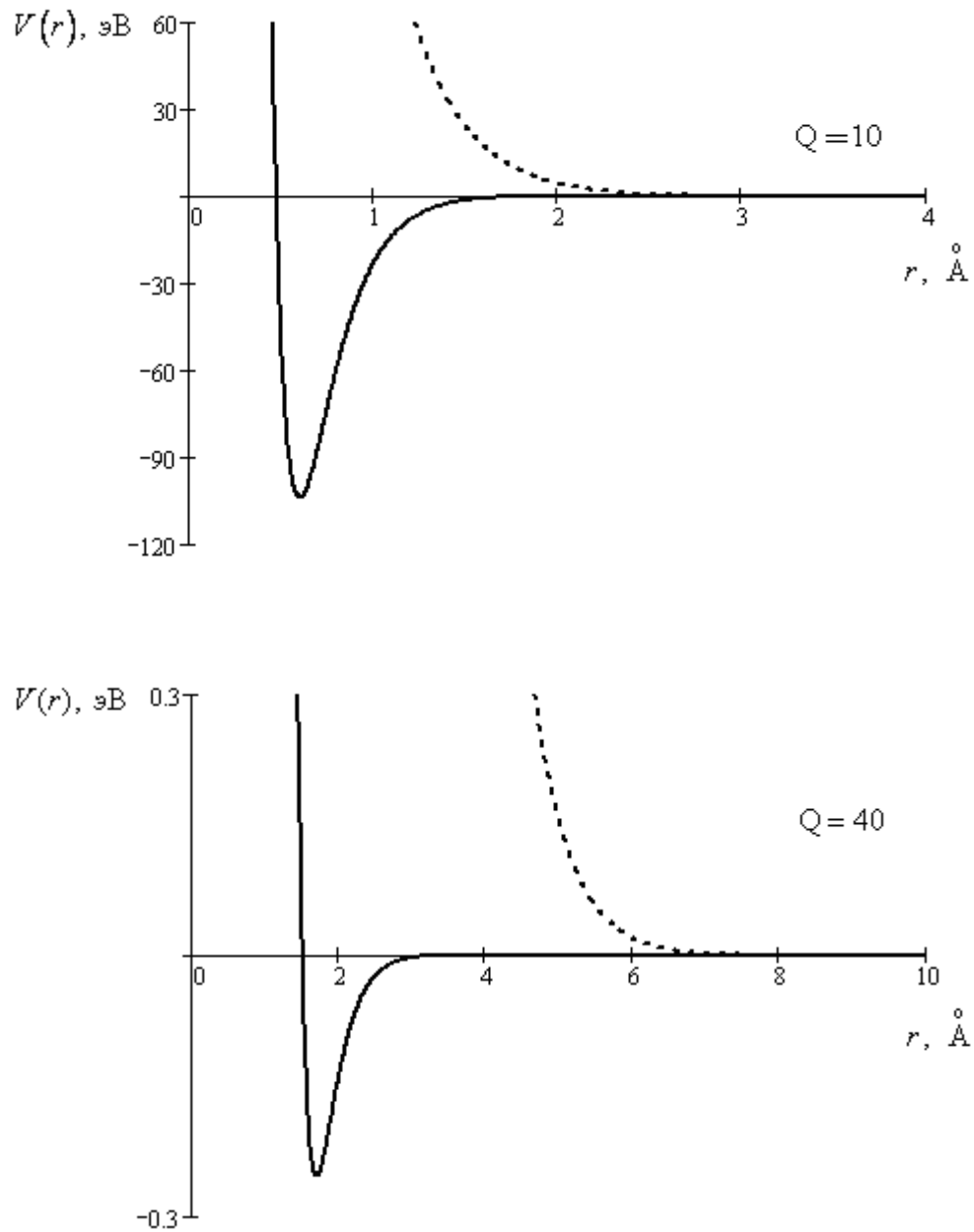


Рисунок 2.4.1. Потенциальные энергии взаимодействия быстрого иона серебра при различных зарядовых состояниях Q с атомом кремния без учета принципа Паули. Сплошная линия — потенциалы изолированных иона и атома выбраны в приближении экранированного кулоновского потенциала; пунктирная — в приближении Мольер

В [10] приведены некоторые потенциалы взаимодействия ион-атом, полученные на основе обработки экспериментальных данных. В этой работе потенциальная энергия взаимодействия представлена в виде:

$$U(R) = \frac{Z_1 Z_2 e^2}{R} \exp(-x B(x)), \quad x = \frac{R}{a_f},$$

где Z_1, Z_2 — атомные номера ядер партнеров соударения, $a_f = \varepsilon (Z_1^\alpha + Z_2^\alpha)^{-\beta}$ — длина экранирования, $\varepsilon = 0,8853$, $\alpha = \frac{2}{3}$, $\beta = 0,5$. Обработка экспериментальных данных показала, что функцию $B(x)$ удобно искать в виде:

$$B(x) = \frac{1}{c_1 + c_2 x^{1/2} + c_3 x}.$$

Значения коэффициентов c_1 , c_2 и c_3 приведены в указанной работе для различных партнеров соударения.

На рис. 2.4.2 изображена потенциальная энергия взаимодействия быстрого иона углерода C^+ с атомом ксенона Xe . Здесь приведены результаты для случаев выбора потенциалов взаимодействия изолированных иона и атома в приближения экранированного кулоновского потенциала (2.4.2), в приближении Мольер (2.4.3) и с использованием аппроксимации, приведенной в [10]. На рис. 2.4.3 приведены потенциальные энергии взаимодействия быстрого иона аргона Ag^+ с атомом аргона Ag с использованием тех же приближений. Из рисунков видно, потенциальная энергия взаимодействия в случае выбора потенциалов взаимодействия в приближении Мольер лучше описывает реальную систему, чем в случае приближения экранированного кулоновского потенциала. Абсолютного согласия с экспериментальными результатами не получено, так как в [10] приведены результаты для частиц с энергиями 1-300 кэВ. В работе же рассматриваем быстрые частицы, энергия которых порядка МэВ.

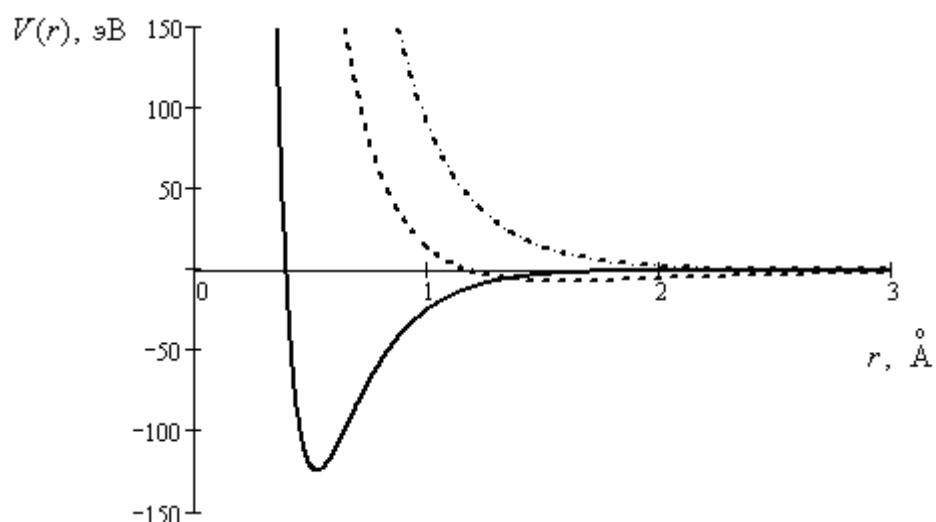


Рисунок 2.4.2. Потенциальная энергия взаимодействия иона углерода C^+ с атомом ксенона без учета принципа Паули: сплошная линия — потенциалы изолированных иона и атома выбраны в приближении экранированного кулоновского потенциала; пунктирная — в приближении Мольер; штрихпунктирная — результат, приведенный в [10]

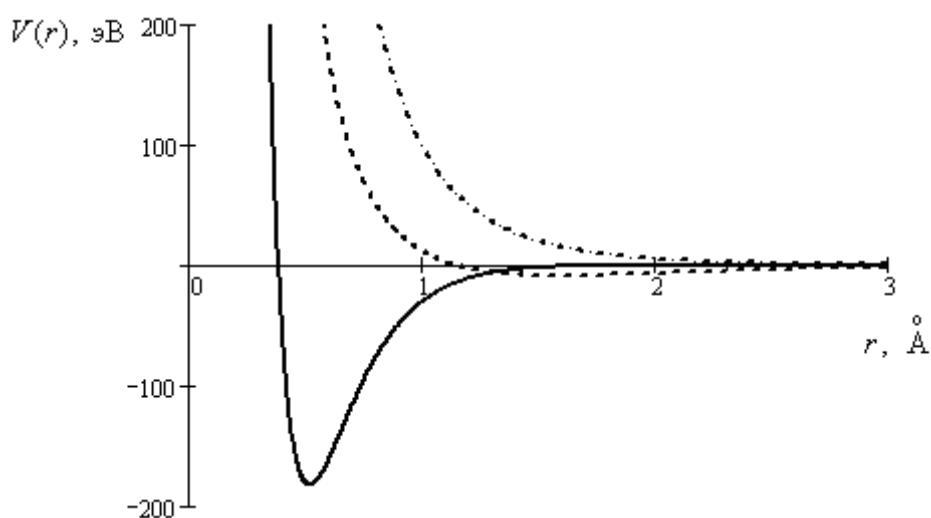


Рисунок 2.4.3. Потенциальная энергия взаимодействия иона аргона Ag^+ с атомом аргона без учета принципа Паули: сплошная линия — потенциалы изолированных иона и атома выбраны в приближении экранированного кулоновского потенциала; пунктирная — в приближении Мольер; штрихпунктирная — результат, приведенный в [10]

2.5. Потенциальная энергия взаимодействия иона с атомом кристалла с учетом принципа Паули

Добавим к выражению для потенциальной энергии взаимодействия налетающего иона с атомом кристалла (2.4.1) множитель $\left(1 - \frac{F_{\min}(g)}{Z_{\min}}\right)$, с помощью которого будем учитывать принцип Паули

$$V_{ion-at.}^*(g) = QeV_2(g) + \frac{g^2}{4\pi} V_e(g)V_2(g) \left(1 - \frac{F_{\min}(g)}{Z_{\min}}\right), \quad (2.5.1)$$

где Z_{\min} — минимальное значение из зарядовых чисел Z_e и Z_2 , $F_{\min}(g)$ — соответствующий форм-фактор.

Рассмотрим выражение (2.5.1) в случае $Z_{\min} = Z_e$, тогда

$$V_{ion-at.}^*(g) = QeV_2(g) + \frac{g^2}{4\pi} V_e(g)V_2(g) \left(1 - \frac{F_e(g)}{Z_e}\right).$$

Выберем потенциалы $V_e(g)$ и $V_2(g)$ в приближении экранированного кулоновского потенциала. Выражение для форм-фактора получено в п. 2.3

$$F(g) = \frac{Z\mu^2}{g^2 + \mu^2},$$

таким образом, получим:

$$V_{ion-at.}^*(g) = \frac{4\pi QZ_2 e^2}{g^2 + \mu_2^2} + \frac{4\pi(Z_1 - Q)Z_2 e^2 g^2}{(g^2 + \mu_e^2)(g^2 + \mu_2^2)} \left(1 - \frac{\mu_e^2}{g^2 + \mu_e^2}\right).$$

Разложим полученное выражение в интеграл Фурье

$$V_{ion-at.}^*(g) = \int \left(\frac{4\pi QZ_2 e^2}{g^2 + \mu_2^2} + \frac{4\pi(Z_1 - Q)Z_2 e^2 g^2}{(g^2 + \mu_e^2)(g^2 + \mu_2^2)} \left(1 - \frac{\mu_e^2}{g^2 + \mu_e^2}\right) \right) \exp(-i\vec{g}\vec{r}) \frac{d^3\vec{g}}{(2\pi)^3}.$$

Интегралы вычислим с помощью теории вычетов (см. приложение 15), окончательно потенциальная энергия взаимодействия налетающего иона с зарядом $Z_e e$ с атомом кристалла с зарядом $Z_2 e$ с учетом принципа Паули в случае $Z_{\min} = Z_e$ примет вид:

$$\begin{aligned}
 V_{ion-at.}^*(r) = & \frac{QZ_2 e^2}{r} \exp(-\mu_2 r) + \\
 & + \frac{(Z_1 - Q)Z_2 e^2}{r} \frac{1}{\mu_e^2 - \mu_2^2} (\mu_e^2 \exp(-\mu_e r) - \mu_2^2 \exp(-\mu_2 r)) - \\
 & - \frac{(Z_1 - Q)Z_2 e^2}{2r} \frac{\mu_e^2}{(\mu_e^2 - \mu_2^2)^2} ((\mu_e^3 r - \mu_e \mu_2^2 r + 2\mu_2^2) \exp(-\mu_e r) - 2\mu_2^2 \exp(-\mu_2 r)).
 \end{aligned}
 \tag{2.5.2}$$

Рассмотрим выражение (2.5.1) в случае $Z_{\min} = Z_2$, тогда

$$V_{ion-at.}^*(g) = QeV_2(g) + \frac{g^2}{4\pi} V_e(g)V_2(g) \left(1 - \frac{F_2(g)}{Z_2} \right)$$

или же, выбрав потенциалы налетающего иона и атома в приближении экранированного кулоновского потенциала, запишем:

$$V_{ion-at.}^*(g) = \frac{4\pi QZ_2 e^2}{g^2 + \mu_2^2} + \frac{4\pi(Z_1 - Q)Z_2 e^2 g^2}{(g^2 + \mu_e^2)(g^2 + \mu_2^2)} \left(1 - \frac{\mu_2^2}{g^2 + \mu_2^2} \right).$$

Разложение полученного выражения в интеграл Фурье

$$V_{ion-at.}^*(g) = \int \left(\frac{4\pi QZ_2 e^2}{g^2 + \mu_2^2} + \frac{4\pi(Z_1 - Q)Z_2 e^2 g^2}{(g^2 + \mu_e^2)(g^2 + \mu_2^2)} \left(1 - \frac{\mu_2^2}{g^2 + \mu_2^2} \right) \right) \exp(-i\vec{g}\vec{r}) \frac{d^3\vec{g}}{(2\pi)^3},$$

интегралы вычислим с помощью теории вычетов (см. приложение 16). Окончательно выражение для потенциальной энергии взаимодействия налетающего иона с зарядом $Z_e e$ с атомом кристалла с зарядом $Z_2 e$ с учетом принципа Паули в случае $Z_{\min} = Z_2$ примет вид:

$$\begin{aligned}
V_{ion-at.}^*(r) = & \frac{QZ_2e^2}{r} \exp(-\mu_2 r) + \\
& + \frac{(Z_1 - Q)Z_2e^2}{r} \frac{1}{\mu_e^2 - \mu_2^2} (\mu_e^2 \exp(-\mu_e r) - \mu_2^2 \exp(-\mu_2 r)) + \\
& + \frac{(Z_1 - Q)Z_2e^2}{2r} \frac{\mu_2^2}{(\mu_e^2 - \mu_2^2)^2} (2\mu_e^2 \exp(-\mu_e r) - (\mu_2^3 r - \mu_e^2 \mu_2 r + 2\mu_e^2) \exp(-\mu_2 r)).
\end{aligned}
\tag{2.5.3}$$

На рис. 2.5.1 изображена потенциальная энергия взаимодействия иона серебра при различных зарядовых состояниях Q с атомом кремния без учета и с учетом принципа Паули. Потенциалы изолированных иона и атома выбирались в приближении экранированного кулоновского потенциала.

В случае, не учитывающем принцип Паули в выражении для потенциальной энергии взаимодействия иона серебра с атомом кремния, увеличение зарядового состояния ведет к уменьшению глубины потенциальной ямы и увеличению расстояния, соответствующего минимуму потенциальной ямы.

Учет принципа Паули в выражении для потенциальной энергии взаимодействия иона с атомом кристалла ведет к тому, что в диапазоне зарядовых значений от 0 до 12 наблюдается и область притяжения, и область отталкивания. Увеличение Q в указанном диапазоне ведет к уменьшению глубины потенциальной ямы, увеличению высоты потенциального барьера и увеличению ширины области отталкивания. Начиная со значения $Q=13$, наблюдается только отталкивание налетающего иона и атома. Увеличение зарядового состояния приведет к увеличению расстояния, на которое могут сближаться ион и атом.

На рис. 2.5.2 представлены несколько этапов эволюции потенциальной энергии взаимодействия иона с атомом кристалла с учетом принципа Паули при изменении зарядового состояния. Потенциалы изолированных иона и атома выбирались в приближении экранированного кулоновского потенциала.

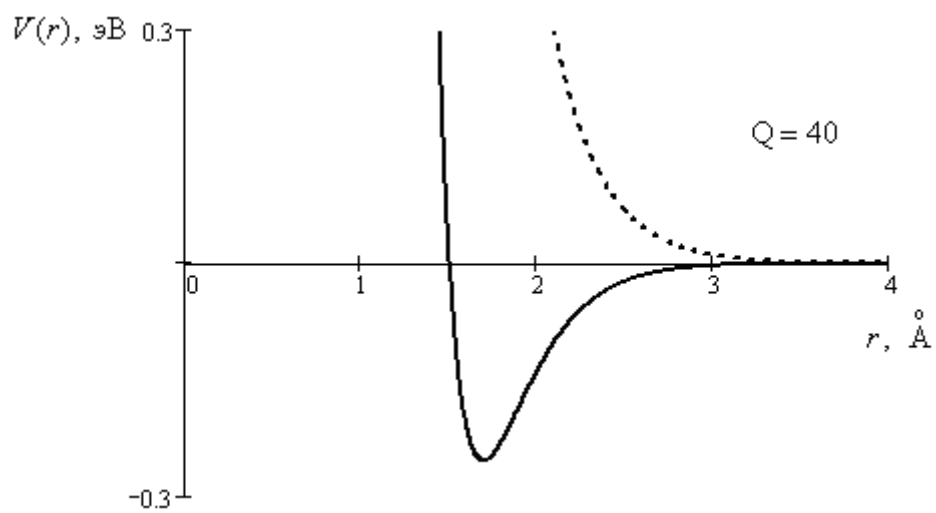
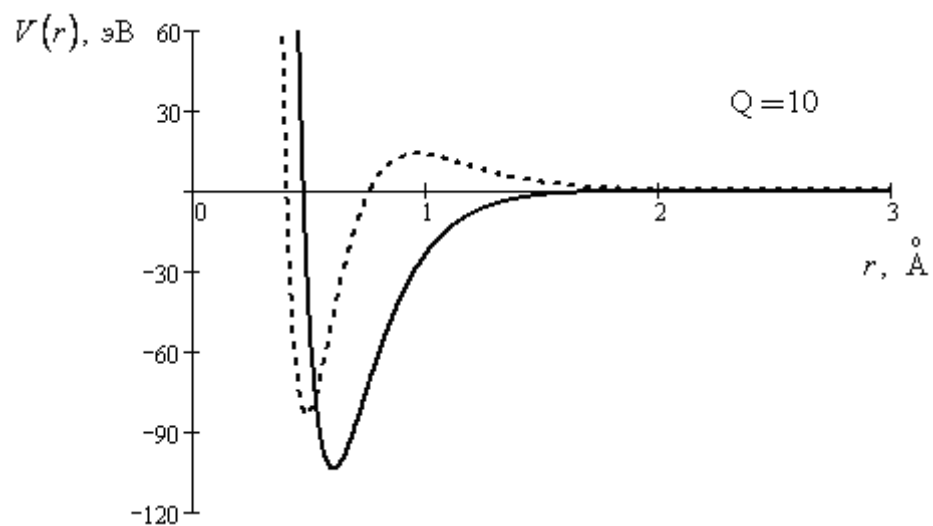


Рисунок 2.5.1. Потенциальная энергия взаимодействия иона серебра при различных зарядовых состояниях Q с атомом кремния без учета (сплошная линия) и с учетом (пунктирная линия) принципа Паули. Потенциалы изолированных иона и атома выбраны в приближении экранированного кулоновского потенциала

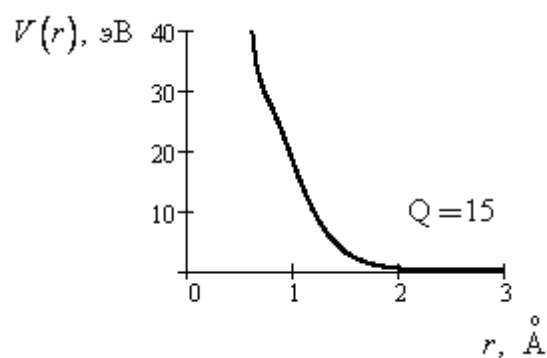
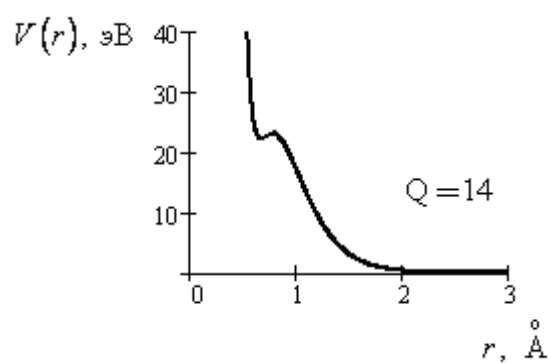
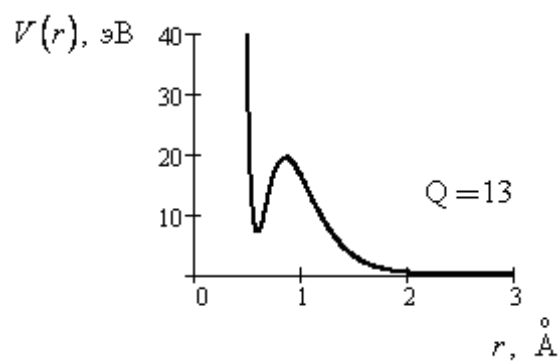


Рисунок 2.5.2. Потенциальная энергия взаимодействия иона серебра при различных зарядовых состояниях Q с атомом кремния с учетом (пунктирная линия) принципа Паули.

Потенциалы изолированных иона и атома выбраны в приближении экранированного кулоновского потенциала

Список литературы к главе 2

1. Огороков В.В. // УФН. 2003. Т. 173. №4. С. 447.
2. Киттель Ч. // Введение в физику твёрдого тела. М.: Наука, 1978. 789 с.
3. Двайт Г.Б. Таблицы интегралов и другие математические формулы. М.: Наука. 1964.
4. Рябов В.А. Эффект каналирования. М.: Энергоатомиздат, 1994. 240 с.
5. Гамбош П. Статистическая теория атома и ее применения М.: Издательство иностранной литературы 1951. 363 с.
6. Lanet G. H., Everhart E. // Phys. Rev. 1960. V. 120. № 6. P. 2064.
7. Дедков Г.В. // УФН. 1995. Т. 165. №8. С. 919.
8. Шейкин Е.Г. // ЖТФ. 1999. Т. 69. Вып. 5. С. 1.
9. Коршунов Ф.П., Лазарь А.П. // Поверхность. 2004. Т. 4. С. 36.
10. Зиновьев А.Н. // ЖТФ. 2008. Т. 78. №1. С. 15.
11. Свешников А. Г., Тихонов А. Н. Теория функций комплексной переменной. М.: Наука. 1999. 319с.
12. Данко П.Е., Попов А.Г., Кожевникова Т.Я. // Высшая математика в упражнениях и задачах. М.: Высшая школа. 1980. С.274-275.
13. Лифшиц Е.М., Питаевский Л.П. // Физическая кинетика, Т X. М.: Наука. 1979. с.397.

Список приложений к главе 2

ПРИЛОЖЕНИЕ 5. Выражение, используемое для разложения в интеграл Фурье

ПРИЛОЖЕНИЕ 6. Разложение фурье-компоненты потенциальной энергии взаимодействия налетающего атома с атомом кристалла в интеграл Фурье. Потенциалы изолированных атомов выбраны в приближении экранированного кулоновского потенциала

ПРИЛОЖЕНИЕ 7. Разложение фурье-компоненты потенциальной энергии взаимодействия двух одинаковых атомов в интеграл Фурье. Потенциалы изолированных атомов выбраны в приближении экранированного кулоновского потенциала

ПРИЛОЖЕНИЕ 8. Разложение фурье-компоненты потенциальной энергии взаимодействия налетающего атома с атомом кристалла в интеграл Фурье. Потенциалы изолированных атомов выбраны в приближении Мольер

ПРИЛОЖЕНИЕ 9. Разложение фурье-компоненты потенциальной энергии взаимодействия налетающего атома с атомом кристалла с учетом принципа Паули в интеграл Фурье, $Z_{\min}=Z_1$

ПРИЛОЖЕНИЕ 10. Разложение фурье-компоненты потенциальной энергии взаимодействия налетающего атома с атомом кристалла с учетом принципа Паули в интеграл Фурье, $Z_{\min}=Z_2$

ПРИЛОЖЕНИЕ 11. Разложение фурье-компоненты потенциальной энергии взаимодействия двух одинаковых атомов с учетом принципа Паули в интеграл Фурье. Потенциалы изолированных атомов выбраны в приближении экранированного кулоновского потенциала

ПРИЛОЖЕНИЕ 12. Разложение фурье-компоненты потенциальной энергии взаимодействия двух одинаковых атомов с учетом принципа Паули в интеграл Фурье. Потенциалы изолированных атомов выбраны в приближении Мольер

ПРИЛОЖЕНИЕ 13. Разложение фурье-компоненты потенциальной энергии взаимодействия налетающего иона с атомом кристалла в интеграл Фурье. Потенциалы изолированных иона и атома выбраны в приближении экранированного кулоновского потенциала

ПРИЛОЖЕНИЕ 14. Разложение фурье-компоненты потенциальной энергии взаимодействия налетающего иона с атомом кристалла в интеграл Фурье. Потенциалы изолированных иона и атома выбраны в приближении Мольера

ПРИЛОЖЕНИЕ 15. Разложение фурье-компоненты потенциальной энергии взаимодействия налетающего иона с атомом кристалла с учетом принципа Паули в интеграл Фурье, $Z_{\min}=Z_e$

ПРИЛОЖЕНИЕ 16. Разложение фурье-компоненты потенциальной энергии взаимодействия налетающего иона с атомом кристалла с учетом принципа Паули в интеграл Фурье, $Z_{\min}=Z_2$

Глава 3

Моделирование процессов нагрева и охлаждения каналированных ионов

3.1. Явления нагрева и охлаждения каналированных ионов

3.2. Моделирование процессов нагрева и охлаждения каналированных ионов

3.3. Потенциальная энергия взаимодействия налетающей частицы с непрерывным потенциалом плоскостного канала кристалла без учета и с учетом принципа Паули

3.4. Стохастическая устойчивость и неустойчивость поперечного движения каналированных частиц в плоскостных каналах кристалла

Глава 3

Моделирование процесса нагрева канализированных ионов

3.1. Явления нагрева и охлаждения канализированных ионов

В [1] представлено экспериментальное свидетельство перераспределения начального изотропного потока частиц после прохождения через тонкий кристалл. Наблюдалось увеличение и уменьшение потока частиц в осевых и плоскостных направлениях в зависимости от условий эксперимента. Для этих явлений были введены термины поперечное охлаждение и поперечный нагрев, отображающие тот факт, что увеличение потока вдоль осевого или плоскостного направлений вызывается уменьшением поперечной энергии иона и поток уменьшается в результате увеличения поперечной энергии (нагрев). На тот момент такое поведение не было предсказано существующей теорией и не воспроизводилось компьютерным моделированием.

Первые эксперименты проводились в осевом направлении $\langle 100 \rangle$ кристалла кремния толщиной от 2,9 до 8,7 мкм. В качестве налетающих частиц выбирались ионы C (18 МэВ), Cu (46 МэВ), Au (92 МэВ), I (121 МэВ). Для ионов C наблюдался режим охлаждения. Для Cu наблюдалось промежуточное состояние с охлаждением для канализированных ионов и нагревом для слабо канализированных ионов. В некоторой степени это справедливо и для ионов I. Эксперименты с ионами Au показывают сильное

сокращение потока вдоль кристаллографической оси — нагрев каналированных ионов.

В [2] приведены экспериментальные данные, связанные с эффектами нагрева и охлаждения. Проведены измерения для различных ионов в большом диапазоне ионных энергий. Использование различных кристаллов позволяет изучить зависимость эффектов от атомного номера атомов кристалла. Изменение ориентации кристалла позволяет рассмотреть зависимость эффекта от размеров канала и интенсивности потенциала каналирования. Измерения, проводимые с кристаллами различной толщины, показывают усиление эффекта с увеличением длины пути иона в кристалле.

Известны эксперименты, как в осевых, так и плоскостных каналах кристалла. Так, например, для ионов Y с энергиями $E = 141, 177$ МэВ, каналированных в кристалле кремния Si , в осевом канале $\langle 100 \rangle$ и плоскостном канале (110) наблюдается эффект охлаждения; для ионов Y с энергией $E = 63, 92$ МэВ — нагрев. При $E = 117$ МэВ наблюдается переходный этап от охлаждения к нагреву. Этот этап характеризуется увеличением осевого потока, который видим только при углах больших, чем критический угол. В этой области ионы все еще каналируют в том смысле, что их движение определяется непрерывным потенциалом и электронный захват и потеря видоизменяют угловое распределение.

При низких энергиях в плоскостном случае наблюдается провал (рис. 3.1.1), который появляется, вероятно, из-за скопления нагретых ионов, которые не достаточно быстро переходят к большим углам. Этот провал способствует возникновению трудностей в определении охлаждения и нагрева. В осевом случае охлаждение и нагрев легко различимы.

Осевое направление $\langle 110 \rangle$ кристалла Si было исследовано с ионами Ni , Br , Y и Ag . В общем, интенсивность охлаждения в сравнении с $\langle 100 \rangle$ осью выше на 30%. Однако, обнаружено отсутствие перехода к нагреву каналированных частиц. С этими же ионами и кристаллом изучена плоскость (111) , которая так же показывает отсутствие режима перехода к нагреву.

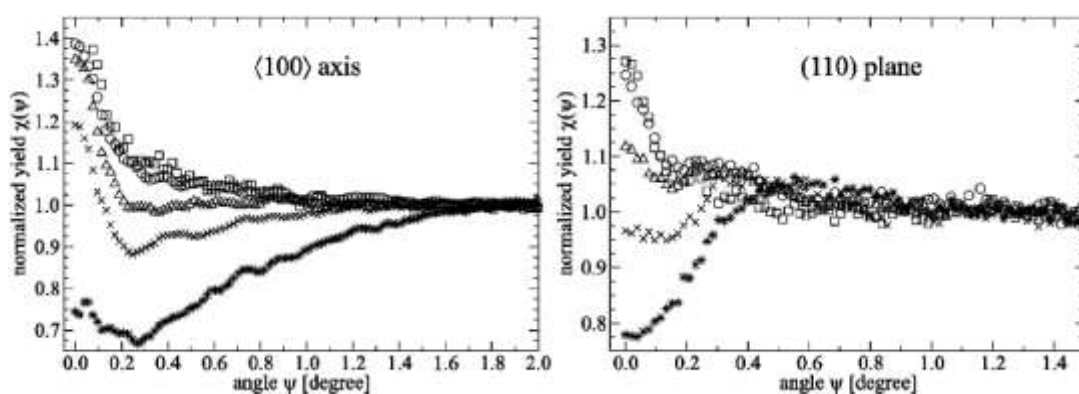


Рисунок 3.1.1. Осевое и плоскостное распределения ионов Y после прохождения кристалла Si(001) толщиной 3,4 мкм. Энергии выхода 177 (квадраты), 141 (круги), 117 (треугольники), 92 (крестики) и 63 МэВ (звездочки) [2].

Экспериментально подтверждено, что при прохождении через кристалл Si ионов легче, чем Ti: p, He, C, O, F, S и Ca не наблюдается нагрев. Измерения проводились для 120-кэВ p, 0,5-МэВ He, 7-МэВ S и F, 22-МэВ Ca.

Сильное увеличение потока (охлаждение) ионов S наблюдалось при прохождении в $\langle 100 \rangle$ осевом направлении и (110) плоскостном направлении кристалла Si.

При движении ионов Ni, Cu, Ge и Zn с энергией около 40 МэВ вдоль осевого направления $\langle 100 \rangle$ в кристалле Ni наблюдается эффект нагрева.

Для кристалла Pt наблюдается качественно отличное перераспределение потока по сравнению с кристаллами Si и Ni. Сильное охлаждение хорошо каналированных ионов, наблюдается, в общем, для Ni, Br, Y, Ag, I, Au, Pb и даже Th. Эксперименты с ионами Ag и Au, каналированными вдоль оси $\langle 110 \rangle$ кристалла Pt, также показывают отсутствие перехода к нагреву при низких энергиях.

В табл.3.1.1 приведено сравнение значений зарядовых состояний ионов Ag, каналированных вдоль оси $\langle 100 \rangle$ и в плоскостном направлении (110) кристалла Si, и вдоль плоскостного направления (100) в кристаллах Ni и Pt, с зарядовым состоянием для перехода в случайном направлении. В случае кристалла Pt наблюдается сильное охлаждение хорошо

каналированных ионов при всех энергиях. Из таблицы видно, что для всех кристаллов значение зарядового состояния для каналированных ионов выше при высокой энергии (охлаждение) и уменьшается при низкой (нагрев). Для кристаллов Si и Ni это обстоятельство находится в соответствии с зарядово-обменной моделью. Для кристалла Pt наблюдается сильное охлаждение каналированных ионов при любых энергиях.

Таблица 3.1.1. Значение случайного зарядового состояния и сдвигов $\Delta Q_{\text{осевое}}$ и $\Delta Q_{\text{плоскостное}}$ значений каналированных зарядовых состояний по отношению к случайным значениям

Ион	ν , ат. ед.	Кристалл	$Q_{\text{случайное}}$	$\Delta Q_{\text{осевое}}$	$\Delta Q_{\text{плоскостное}}$	Режим
100-МэВ Ag	6,15	Si	$21,04 \pm 0,03$	$-2,25 \pm 0,06$	$-2,35 \pm 0,06$	нагрев
240-МэВ Ag	9,52	Si	$24,09 \pm 0,03$	$+2,02 \pm 0,06$	$+0,90 \pm 0,06$	охлаждение
100-МэВ Ag	6,15	Pt	$20,40 \pm 0,05$	$-0,79 \pm 0,06$	$-0,34 \pm 0,06$	охлаждение
220-МэВ Ag	9,12	Pt	$25,98 \pm 0,03$	$+0,80 \pm 0,06$	$+0,26 \pm 0,06$	охлаждение
100-МэВ Ag	6,15	Ni	$21,20 \pm 0,05$	$-0,73 \pm 0,06$	$-0,45 \pm 0,06$	нагрев

Каналированные ионы,двигающиеся в кристалле, испытывая многократное рассеяние на электронах или тепловые флуктуации атомных ядер, переходят из режима каналирования к неканалированному движению и наоборот. Вероятность перехода от небольших поперечных энергий к большим равна вероятности обратного процесса. Это так называемое правило обратимости. Наблюдаемое угловое перераспределение ионного потока после прохождения кристалла — это свидетельство нарушения правила обратимости. Хорошо известный источник обратимости — энергия потерь ионов. Нарушение правила обратимости может привести к увеличению потока каналированных ионов, но таким образом не может быть объяснен нагрев.

Качественное объяснение эффектов нагрева и охлаждения может быть получено на основе зарядово-обменной модели. Быстрый, тяжелый ион имеет средний заряд $Z_1^* e$, который дается аппроксимацией $Z_1^* \approx Z_1^{1/3} v/v_0$, где Z_1 , v — атомный номер и скорость иона, $v_0 = e^2/\hbar$ — скорость Бора. Ионный заряд быстро флуктуирует из-за захвата и потери электронов. Из рис. 3.1.2 следует, что цикл захвата и потери изменяет поперечную энергию иона. Рассматривая ион, как точечный заряд, его поперечную энергию можно записать следующим образом $E_{\perp} = p_{\perp}^2/2M_1 + U(r)$, где $U(r) = Z_1^* U_p(r)$, $U_p(r)$ — потенциальная энергия атомной цепочки для протона. Аппроксимация точечного заряда не является точной, но позволяет качественно объяснить эффекты нагрева и охлаждения. Если ион захватывает электрон на расстоянии r_c от атомной цепочки кристалла и теряет его на расстоянии r_l , то происходит уменьшение поперечной энергии иона $\Delta E_{\perp} = U(r_l) - U(r_c)$. С увеличением расстояния от атомной цепочки кристалла, высота потенциальной ямы для электрона увеличивается и происходит скопление электронов в осевом или плоскостном направлении. Если $r_l > r_c$ потеря и захват ионом электрона приведут к увеличению ионной плотности и, таким образом, к увеличению выходящего из кристалла ионного потока.

На начальном этапе эффекты нагрева и охлаждения не воспроизводились с помощью компьютерного моделирования. Компьютерная программа CRYSTAL-TRIM, основанная на модели бинарных столкновений, и учитывающая энергию потерь ядер и электронов, угловое рассеяние и многократное рассеяние на электронах, не показывала существенного отклонения углового распределения от случайного. Эти результаты оказались в согласии с программой LAPOSE.

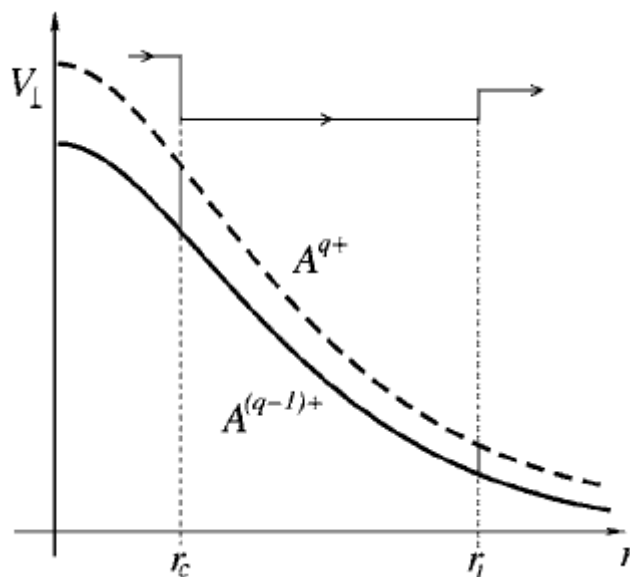


Рисунок 3.1.2. Поперечный потенциал каналированной частицы. Захват электрона на расстоянии r_c уменьшает потенциальную энергию. Потеря электрона на расстоянии r_l увеличивает потенциальную энергию. [3]

В [2] сообщается о компьютерном моделировании, результаты которого демонстрируют эффекты нагрева и охлаждения. nN-СТМС моделирование описывает взаимодействие иона с двумя параллельными цепочками из N атомов кристалла, каждый из которых содержит n электронов. Введен учет многократных столкновений иона с атомом.

В [4] предлагается объяснение эффектов нагрева и охлаждения в рамках единых модельных представлений, связанных с перезарядкой. Если заряд падающих частиц является функцией угла падения, то результирующее распределение не будет изотропным. Если в некотором диапазоне углов заряд меньше среднего, то в этом направлении будет пик, напротив, если заряд больше среднего, то частицы эффективно рассеиваются из этой угловой области, в результате чего образуется лунка. При прохождении через кристалл их равновесный заряд зависит от расстояния наименьшего сближения с плоскостью или цепочкой, то есть от угла падения на кристалл. В произвольном направлении он совпадает с равновесным зарядом для аморфной среды. При движении в осевом или плоскостном канале частица застревает в точке поворота, и, если отношение вероятности срыва к

вероятности подхвата электрона в этой области превышает это отношение в центре канала, равновесный заряд каналированных ионов оказывается выше равновесного заряда для случайного направления и в угловом распределении возникает лунка. В противоположном случае равновесный заряд каналированных ионов ниже, чем для случайного направления и в диапазоне углов каналирования появляется пик.

В этой же работе приведены результаты моделирования плоскостного каналирования ионов C в кристалле Si. Учитывались переходы только между двумя зарядовыми состояниями около равновесного заряда иона. Заряд менялся скачками. Равновесный заряд определяется вероятностями захвата и срыва электрона. В полном согласии с экспериментом при низкой энергии наблюдается нагрев, при высокой — охлаждение пучка.

Позже, на основе выше описанной модели, была предложена система уравнений, с помощью которой может быть определена зависимость скорости перехода нагрев-охлаждение от атомного номера иона [5]. При малых атомных номерах уравнения системы становятся несовместимыми. В экспериментах это проявляется как исчезновение перехода от охлаждения к нагреву у легких ионов. С помощью предложенной модели, показано, что при любых скоростях легких ионов равновесный заряд в центре канала больше, чем средний заряд иона, движущегося в аморфном материале. Поэтому средний заряд каналированных легких ионов немного меньше и имеет место слабый эффект охлаждения без перехода к нагреву.

В [6] проведен теоретический анализ охлаждения и нагрева ионов с учетом оболочечных эффектов. Показано, что резкое изменение потенциала ионизации при переходе от одной оболочки к следующей может привести к неоднократному переходу от нагрева к охлаждению и обратно при увеличении скорости иона.

В работе [7] разработана кинетическая теория прохождения многозарядных тяжелых ионов, учитывающая диффузию в пространстве поперечных импульсов и обмен зарядом между кристаллом и ионом.

Приведено выражение для функции распределения, с помощью которой на заданной глубине кристалла можно вычислить долю каналированных частиц, находящихся в зарядовом состоянии Q . Рассмотрено одноэлектронное приближение, учитывающее то, что основной вклад в перезарядку вносят процессы с изменением заряда на единицу $Q' \rightarrow Q \pm 1$. Проявление эффектов нагрева и охлаждения пучков тяжелых многозарядных ионов определяется зависимостью вероятностей захвата и потери электронов от прицельного параметра при взаимодействии ионов с атомными цепочками, что и определяет характер углового и пространственного распределения заряда каналированных ионов.

В дальнейшем был проведен численный анализ кинетических уравнений [8]. Расчеты производились для изотропных пучков многозарядных ионов Al и Y каналированных в кристалле Si вдоль оси $\langle 100 \rangle$. Показано, что переход от охлаждения к нагреву изотропного пучка тяжелых многозарядных ионов зависит не только от энергии ионов, но и от глубины их проникновения в кристалл. Показано, что с определенных значений глубины проникновения относительные угловые распределения практически не изменяются, т.е. обнаруживается свойство автомодельности.

В [3] рассмотрена модель, позволяющая определить скорость перехода от нагрева к охлаждению как функцию от энергий связи в кристалле и налетающей частице. Так же произведен учет энергии возбуждения налетающего иона. Эта модель предсказывает отсутствие нагрева для легких налетающих частиц и переход от нагрева к охлаждению с увеличением скорости налетающей частицы.

3.2. Моделирование процессов нагрева и охлаждения каналированных ионов

Моделирование процесса нагрева производилось с использованием компьютерной программы моделирования траекторий быстрых заряженных частиц в каналах алмазоподобных кристаллов PST (см. п. 1.7). Программа была модифицирована: появились блок выбора потенциала «Ион-Атом» (см. гл. 3), и окно ввода числа оставшихся в атоме электронов Z_e .

Производилось моделирование движения ионов серебра в (110) плоскостном канале кристалла кремния толщиной 3 мкм. Известно, что при энергии 100 МэВ и среднем зарядовом состоянии $\bar{Q} \approx 19$ ионов серебра наблюдается эффект нагрева, при энергии 240 МэВ и $\bar{Q} \approx 25$ — охлаждение [2].

Расчет деканалирования производился с использованием выражения для потенциальной энергии взаимодействия налетающей частицы с непрерывным потенциалом плоскостного канала кристалла в виде разложения в двойной тригонометрический ряд Фурье с учетом структурного фактора и фактора Дебая-Валлера (см. приложение 17)

$$U(X) = \frac{1}{d^3} \sum_{n_x} \sum_{j=1}^8 V(g) \exp\left(-\frac{\sigma^2 g^2}{2}\right) \cos\left(2\pi n_x \left(X - X_i \frac{d}{a_x}\right)\right),$$

где $X = \frac{x}{d}$ — безразмерная координата, d — период решетки кристалла; \vec{g}

— вектор обратной решетки, $g_x = \frac{2\pi n_x d}{a_x}$ — проекция вектора обратной

решетки на ось OX ; $V(g)$ — фурье-компонента потенциальной энергии

взаимодействия атом-атом, ион-атом, ядро-атом; σ — средняя амплитуда тепловых колебаний атомов кристалла; X_i , — безразмерная координата атомов элементарной ячейки кристалла, выбранная в единицах a_x (см. табл. 1.2.1).

Рассматривались случаи выбора фурье-компоненты потенциальной энергии взаимодействия налетающего иона с атомом кристалла без учета и с учетом принципа Паули (см. п. 2.4 и 2.5 соответственно). Потенциалы изолированных атомов выбирались в приближении экранированного кулоновского потенциала. Упомянутые выражения имеют вид:

$$V_{ion-at.}(g) = \frac{4\pi Q Z_2 e^2}{g^2 + \mu_2^2} + \frac{4\pi (Z_1 - Q) Z_2 e^2 g^2}{(g^2 + \mu_e^2)(g^2 + \mu_2^2)},$$

$$V_{ion-at.}^*(g) = \frac{4\pi Q Z_2 e^2}{g^2 + \mu_2^2} + \frac{4\pi (Z_1 - Q) Z_2 e^2 g^4}{(g^2 + \mu_e^2)^2 (g^2 + \mu_2^2)} \text{ в случае } Z_{min} = Z_e,$$

$$V_{ion-at.}^*(g) = \frac{4\pi Q Z_2 e^2}{g^2 + \mu_2^2} + \frac{4\pi (Z_1 - Q) Z_2 e^2 g^4}{(g^2 + \mu_e^2)(g^2 + \mu_2^2)^2} \text{ в случае } Z_{min} = Z_2.$$

Результаты моделирования, не учитывающего и учитывающего принцип Паули в выражении для потенциальной энергии взаимодействия налетающей частицы с непрерывным потенциалом плоскостного канала кристалла, для различных зарядовых состояний Q и энергий E представлены на рис. 3.2.1-3.2.4. Для наглядности на этих же рисунках изображены предельные случаи зарядовых состояний: $Q=0$, соответствующий атому, и $Q=47$ — ядру серебра. Фурье-компоненты потенциальной энергии взаимодействия налетающего атома с атомом кристалла без учета и с учетом принципа Паули (см. п. 2.2 и 2.3 соответственно) так же определены при потенциалах изолированных атомов, выбранных в приближении экранированного кулоновского потенциала и имеют вид:

$$V_{at.-at.}(g) = \frac{4\pi Z_1 Z_2 e^2 g^2}{(g^2 + \mu_1^2)(g^2 + \mu_2^2)},$$

$$V_{at.-at.}^*(g) = \frac{4\pi Z_1 Z_2 e^2 g^4}{(g^2 + \mu_1^2)^2 (g^2 + \mu_2^2)} \text{ в случае } Z_{\min} = Z_1,$$

$$V_{at.-at.}^*(g) = \frac{4\pi Z_1 Z_2 e^2 g^4}{(g^2 + \mu_1^2)(g^2 + \mu_2^2)^2} \text{ в случае } Z_{\min} = Z_2.$$

Фурье-компонента потенциальной энергии взаимодействия налетающего ядра с атомом кристалла имеет вид:

$$V_{nucl.-at.}(g) = \frac{4\pi Z_1 Z_2 e^2}{g^2 + \mu_2^2}.$$

Здесь потенциал изолированного атома кристалла так же выбирался в приближении экранированного кулоновского потенциала.

Из вышеупомянутых рисунков видно, что на малых глубинах кристалла происходит перераспределение потока. Из рисунков следует, что меньшим значениям Q соответствует интенсивное деканалирование, для больших Q характерна меньшая скорость выбывания частиц из канала. Очевидно, что причиной эффекта нагрева многозарядных ионов является интенсивное деканалирование.

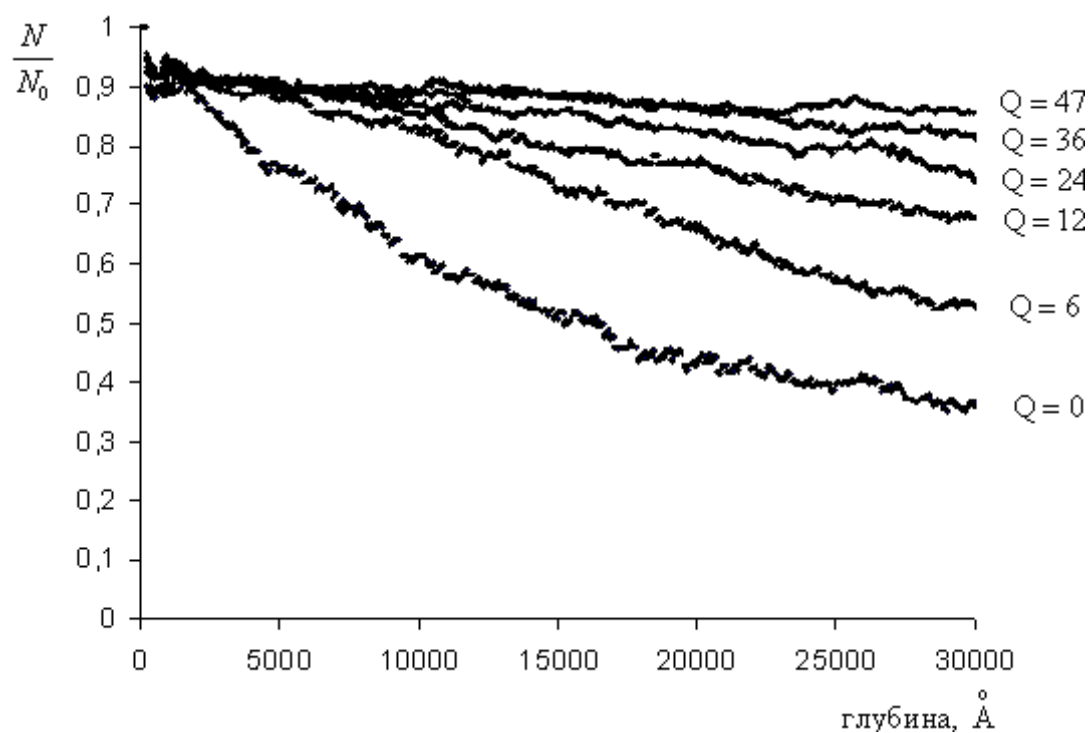


Рисунок 3.2.1. Распределение ионов Ag с $E=100$ МэВ, каналированных в плоскостном канале (110) кристалла кремния, по глубине кристалла при различных зарядовых состояниях налетающего иона. Зарядовому состоянию $Q=0$ соответствует случай атома Ag, $Q=47$ — ядра Ag. Потенциальная энергия взаимодействия налетающего иона с атомом кристалла выбиралась в виде без учета принципа Паули

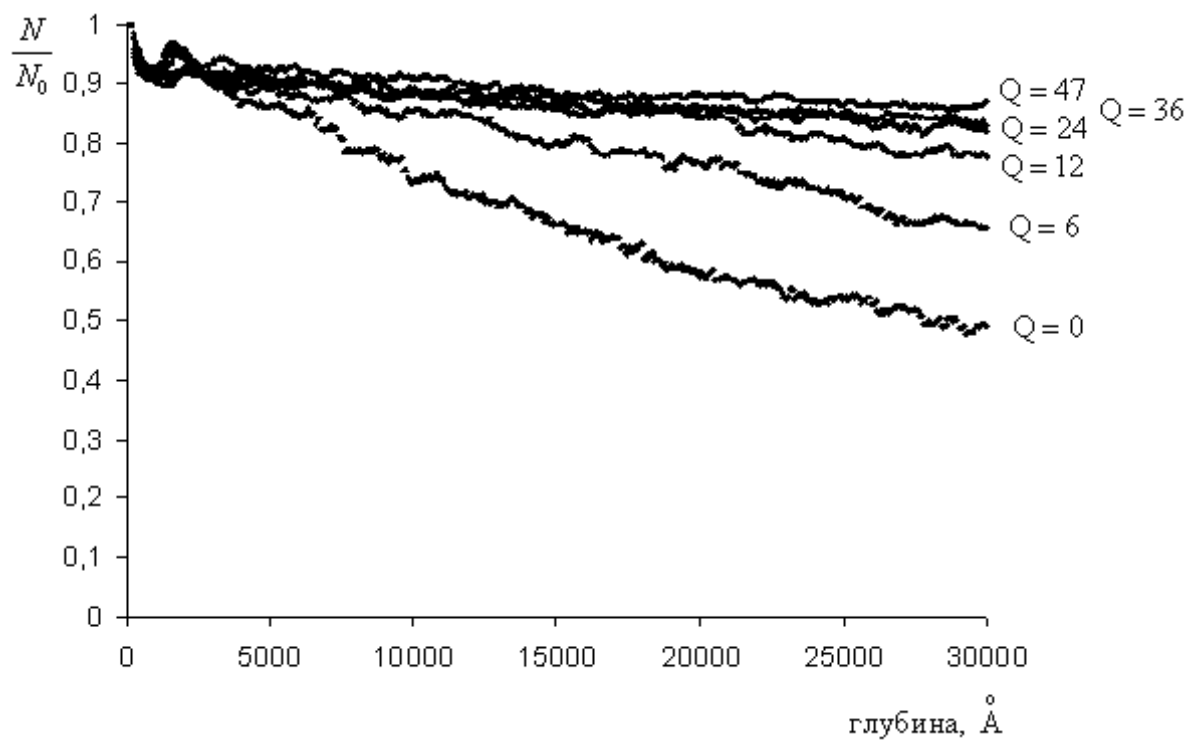


Рисунок 3.2.2. Распределение ионов Ag с $E=240$ МэВ, каналированных в плоскостном канале (110) кристалла кремния, по глубине кристалла при различных зарядовых состояниях налетающего иона. Зарядовому состоянию $Q=0$ соответствует случай атома Ag, $Q=47$ — ядра Ag. Потенциальная энергия взаимодействия налетающего иона с атомом кристалла выбиралась в виде без учета принципа Паули

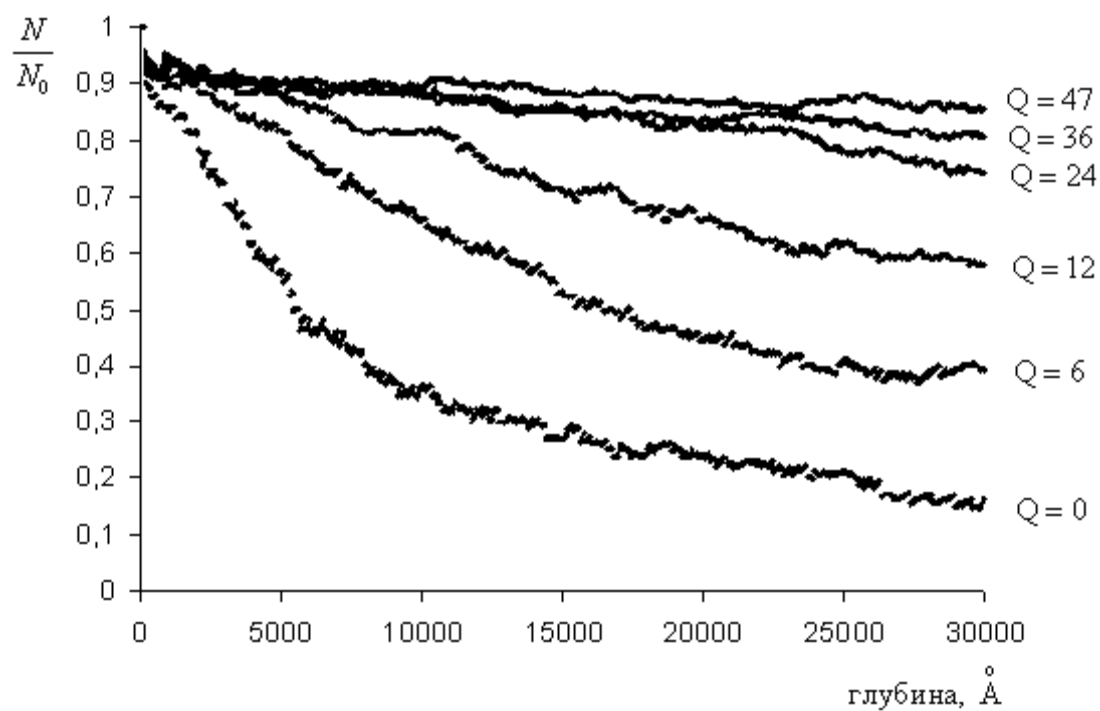


Рисунок 3.2.3. Распределение ионов Ag с $E=100$ МэВ, каналированных в плоскостном канале (110) кристалла кремния, по глубине кристалла при различных зарядовых состояниях налетающего иона. Зарядовому состоянию $Q=0$ соответствует случай атома Ag, $Q=47$ — ядра Ag. Потенциальная энергия взаимодействия налетающего иона с атомом кристалла выбиралась в виде с учетом принципа Паули

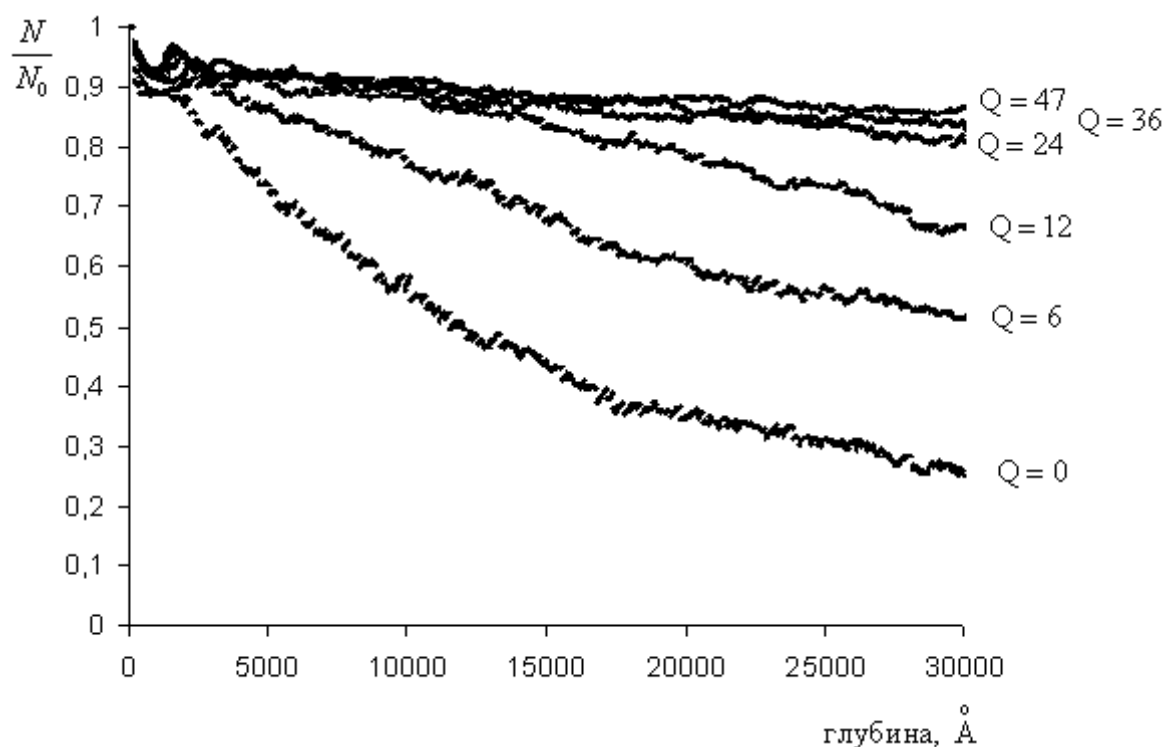


Рисунок 3.2.4. Распределение ионов Ag с $E=240$ МэВ, каналированных в плоскостном канале (110) кристалла кремния, по глубине кристалла при различных зарядовых состояниях налетающего иона. Зарядовому состоянию $Q=0$ соответствует случай атома Ag, $Q=47$ — ядра Ag. Потенциальная энергия взаимодействия налетающего иона с атомом кристалла выбиралась в виде с учетом принципа Паули

На рис. 3.2.5 и 3.2.6 произведено сравнение результатов моделирования при выборе потенциальной энергии взаимодействия налетающей частицы с атомом кристалла Si в виде без учета и с учетом принципа Паули при одинаковых значениях зарядовых состояний. Можно сказать, что при небольших значениях зарядовых состояний учет принципа Паули в выражении для потенциальной энергии взаимодействия налетающей частицы с непрерывным потенциалом (110) плоскостного канала кристалла Si ведет к весоному влиянию на конечный результат: наблюдается более интенсивное деканалирование, чем в случае, не учитывающем принцип Паули. С увеличением зарядового состояния Q разность между скоростями деканалирования в случаях без учета и с учетом принципа Паули при

одинаковых зарядовых состояниях уменьшается и при больших Q не оказывает заметного влияния на конечный результат.

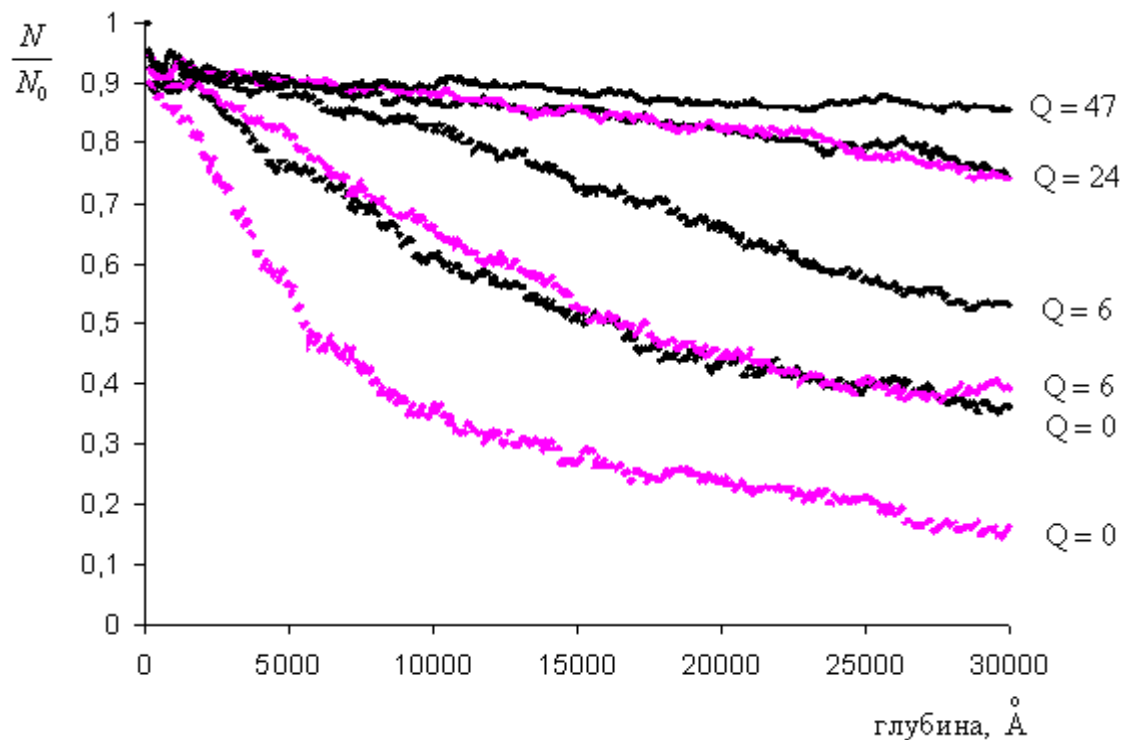


Рисунок 3.2.5. Распределение ионов серебра с $E=100$ МэВ, каналированных в плоскостном канале (110) кристалла кремния, по глубине кристалла при различных зарядовых состояниях налетающего иона. Черные точки — потенциальная энергия взаимодействия налетающего иона с атомом кристалла выбиралась в виде без учета принципа Паули, розовые — с учетом принципа Паули

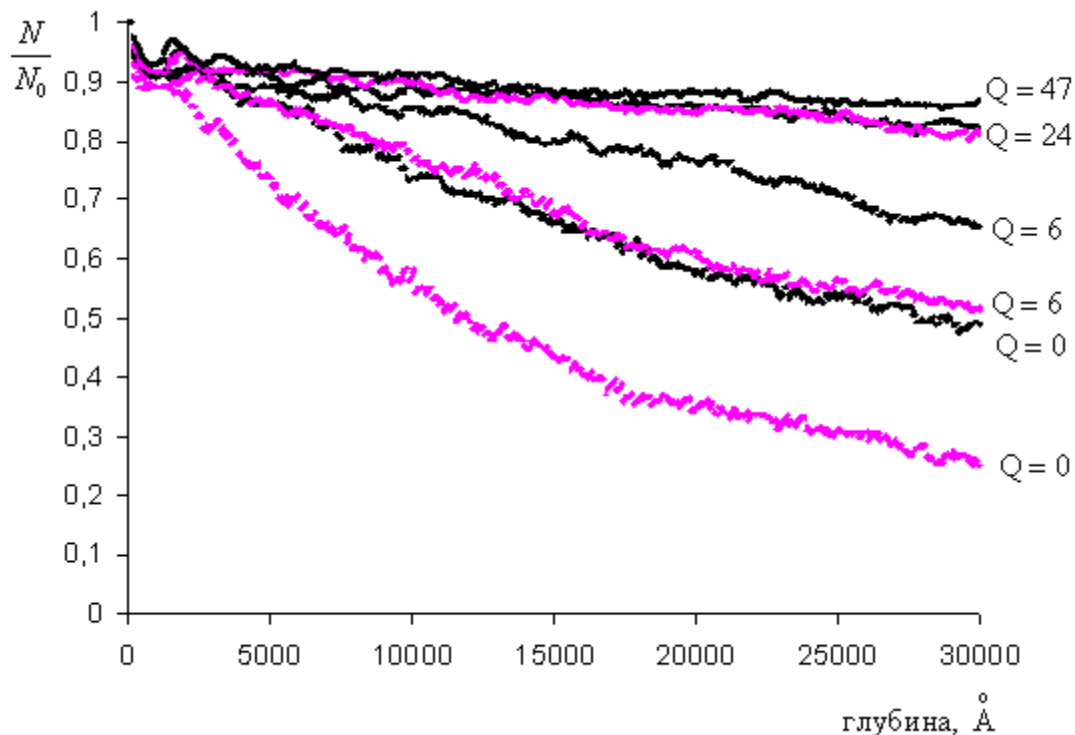


Рисунок 3.2.6. Распределение ионов серебра с $E=240$ МэВ, каналированных в плоскостном канале (110) кристалла кремния, по глубине кристалла при различных зарядовых состояниях налетающего иона. Черные точки — потенциальная энергия взаимодействия налетающего иона с атомом кристалла выбиралась в виде без учета принципа Паули, розовые — с учетом принципа Паули

3.3. Потенциальная энергия взаимодействия налетающей частицы с непрерывным потенциалом плоскостного канала кристалла без учета и с учетом принципа Паули

На рис. 3.3.1 и 3.3.2 изображена потенциальная энергия взаимодействия при различных зарядовых состояниях налетающей частицы с непрерывным потенциалом (110) плоскостного канала кристалла Si без учета и с учетом принципа Паули соответственно. И на первом, и на втором

рисунке при увеличении зарядового состояния Q прослеживаются следующие закономерности:

- двухъямный вид потенциальной энергии сменяется одноямным видом. Для случая выбора потенциальной энергии взаимодействия налетающего иона с атомом кристалла без учета принципа Паули это происходит при $Q = 20$, с учетом принципа Паули — при $Q = 14$;
- в случае двухъямного потенциала высота центрального горба уменьшается;
- увеличивается глубина потенциальной ямы;
- уменьшается ширина потенциальной ямы.

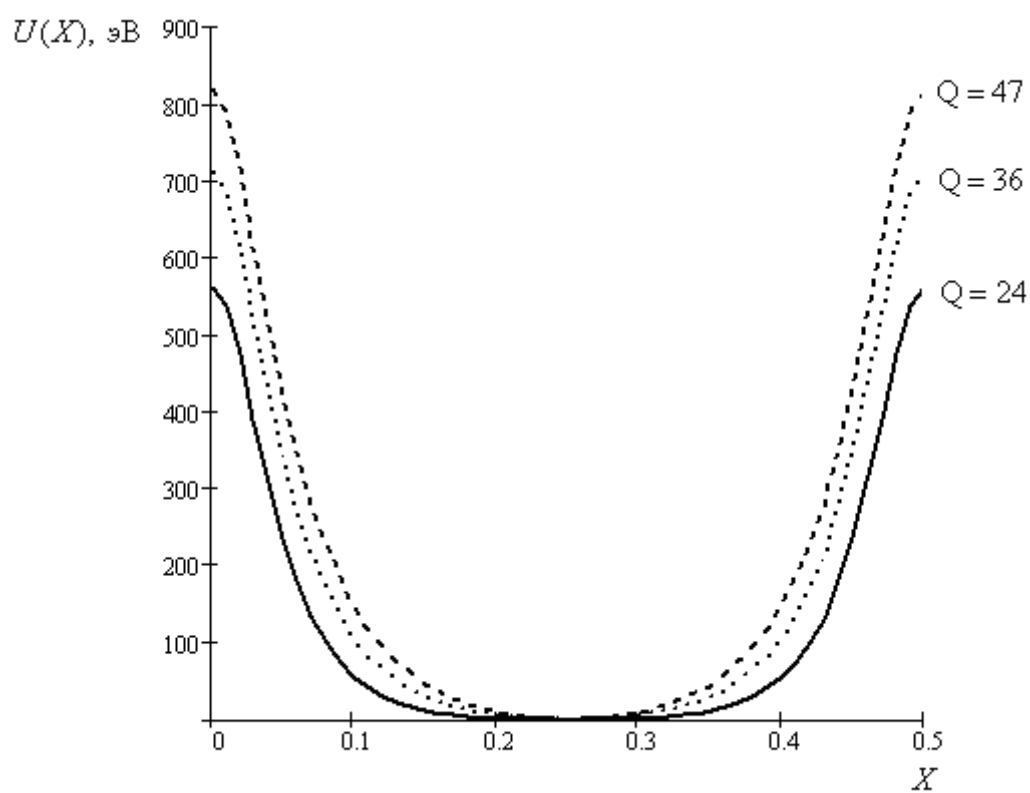
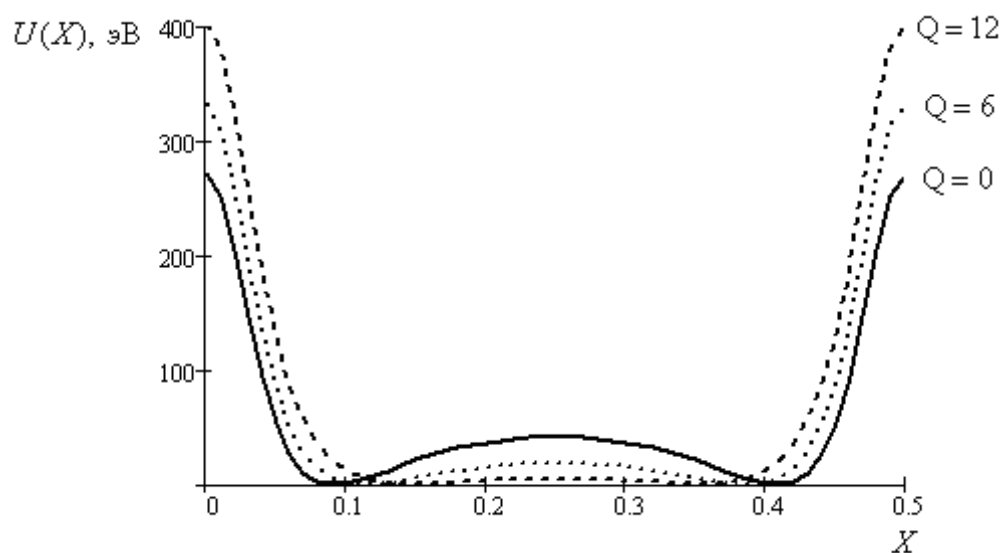


Рисунок 3.3.1. Потенциальная энергия взаимодействия при различных зарядовых состояниях налетающего иона Ag с непрерывным потенциалом (110) плоскостного канала кристалла Si без учета принципа Паули

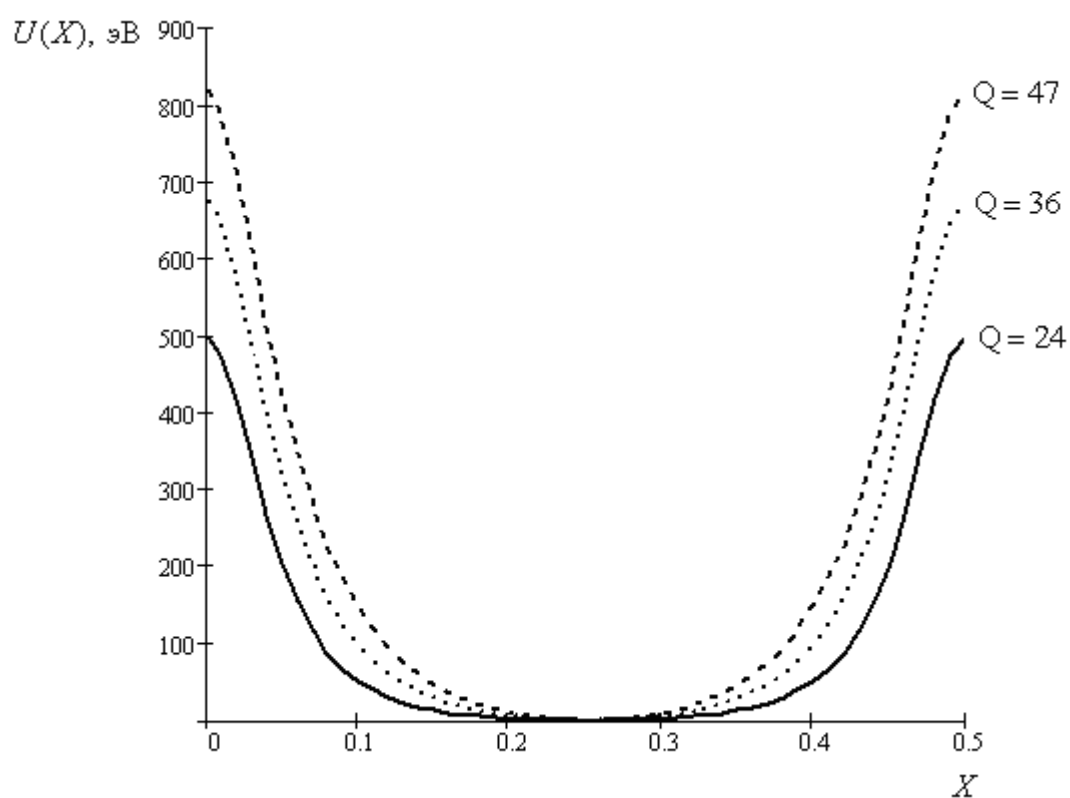
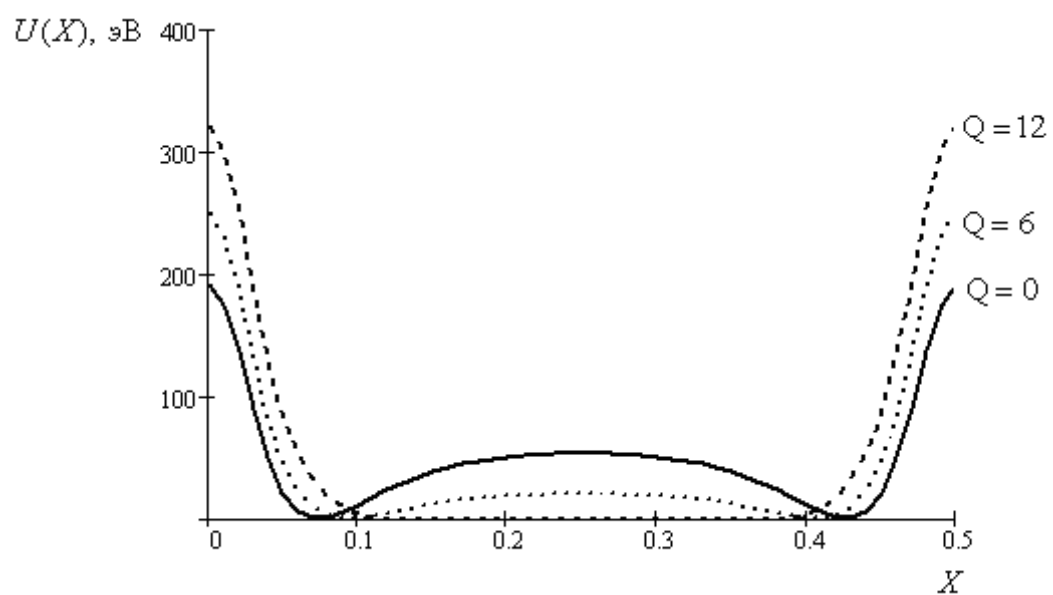


Рисунок 3.3.2. Потенциальная энергия взаимодействия при различных зарядовых состояниях налетающего иона Ag с непрерывным потенциалом (110) плоскостного канала кристалла Si с учетом принципа Паули

На рис. 3.3.3 приведено сравнение потенциальных энергий взаимодействия при различных зарядовых состояниях налетающего иона Ag с непрерывным потенциалом (110) плоскостного канала кристалла Si без учета и с учетом принципа Паули. Сравнивая вид потенциальных энергий взаимодействия налетающей частицы с атомом кристалла без учета и с учетом принципа Паули при одинаковом зарядовом состоянии, можно сделать следующие выводы:

- учет принципа Паули ведет к уменьшению высоты потенциальной ямы. Стоит отметить, что разность амплитуд потенциальных энергий взаимодействия налетающей частицы с атомом кристалла без учета и с учетом принципа Паули при одинаковом зарядовом состоянии уменьшается с увеличением зарядового состояния;
- учет принципа Паули ведет к увеличению высоты центрального горба двухъямного потенциала.

Сопоставляя результаты моделирования, представленные на рис. 3.2.1-3.2.4 с видом потенциальной энергии взаимодействия налетающей частицы с непрерывным потенциалом плоскостного канала кристалла, можно отметить, что сильному деканализированию соответствует потенциальная энергия, имеющая двухъямный вид, скорость деканализирования уменьшается при переходе к одноямному потенциалу.

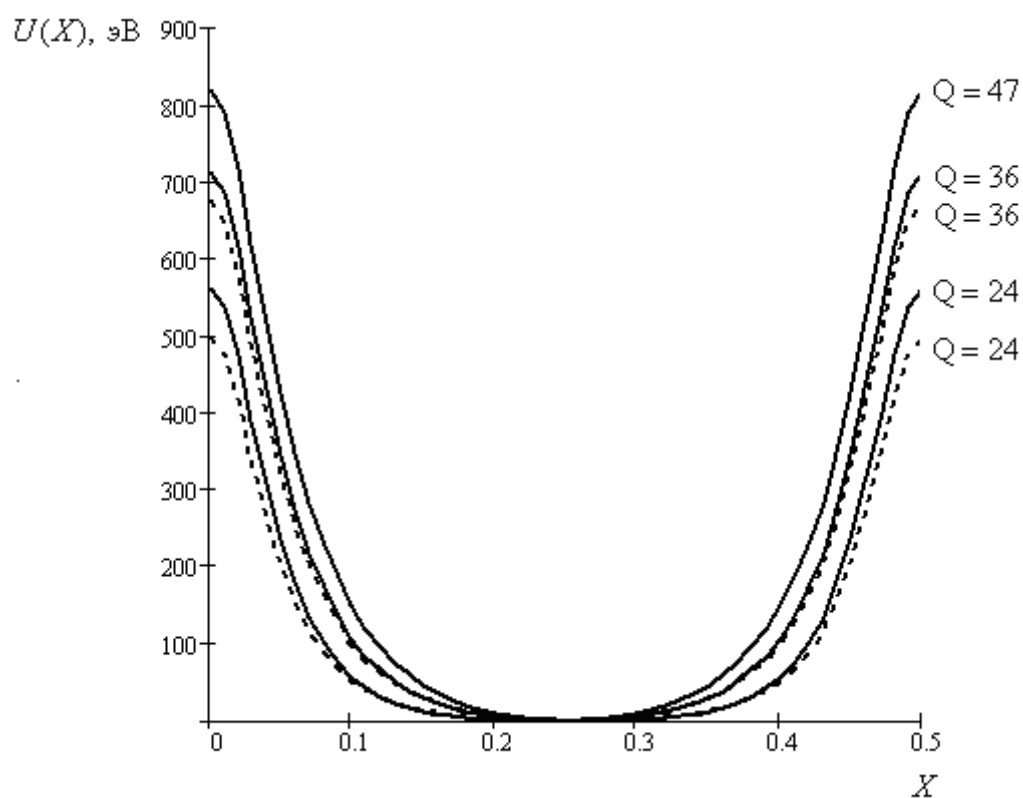
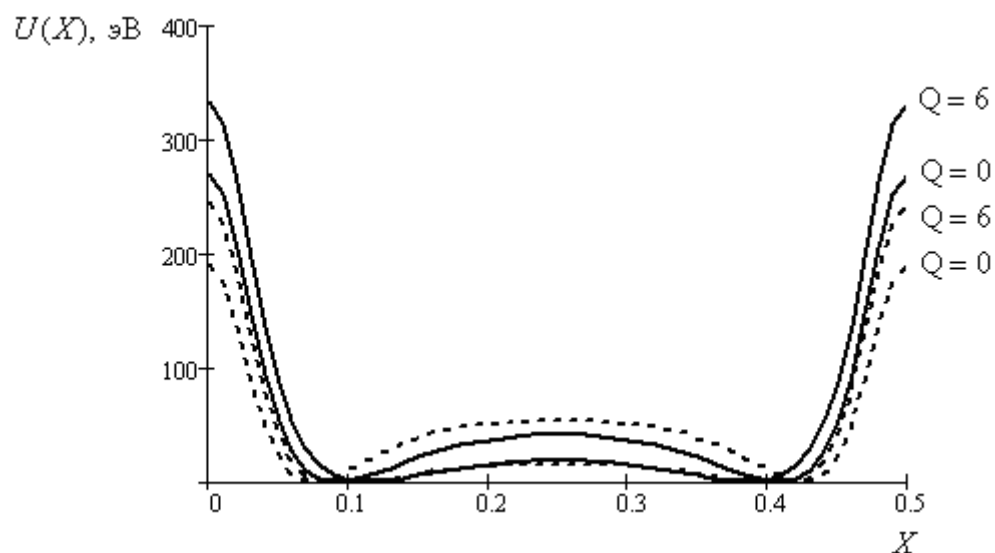


Рисунок 3.3.3. Потенциальная энергия взаимодействия при различных зарядовых состояниях налетающего иона Ag с непрерывным потенциалом (110) плоскостного канала кристалла Si. Сплошная линия соответствует потенциальной энергии взаимодействия налетающего иона с атомом кристалла, выбранной в форме без учета принципа Паули, пунктирная — с учетом принципа Паули

3.4. Стохастическая устойчивость и неустойчивость поперечного движения каналированных частиц в плоскостных каналах кристалла

С помощью уравнения, описывающего движение по хаотической траектории (см. п. 1.3)

$$m\delta\ddot{x} + \bar{U}_{xx}(\bar{x})\delta x = \delta F_x(\bar{x}),$$

произведем линейный анализ устойчивости движения каналированных частиц в окрестности классической траектории [9]. Коэффициент $\bar{U}_{xx}(\bar{x})$ на небольших временных отрезках допустимо рассматривать как не зависящую от времени величину. Решение соответствующего однородного уравнения будем искать в следующем виде

$$\delta x = A \exp(pt),$$

где p — корни характеристического уравнения

$$mp^2 + \bar{U}_{xx}(x_0) = 0,$$

$$p_{1,2} = \pm \sqrt{-\frac{\bar{U}_{xx}(x_0)}{m}}.$$

Если $\bar{U}_{xx}(x_0) > 0$, то корни $p_{1,2}$ — комплексно сопряженные, чисто мнимые числа. Иначе, при $\bar{U}_{xx}(x_0) < 0$ имеем положительный и отрицательный действительные корни. Известно (см., например, [10]), что в первом случае реализуется устойчивое, а во втором неустойчивое решение дифференциального уравнения.

Известно, что движение считается стохастически неустойчивым, если траектории «разбегаются» экспоненциально быстро. Таким образом, неравенство

$$\bar{U}_{xx}(x) < 0 \quad (3.4.1)$$

определяет область стохастической неустойчивости поперечного движения каналированных частиц, так как величина среднего квадрата флуктуаций является мерой разбегания траекторий. Явление стохастической неустойчивости поперечного движения каналированных частиц не наблюдается в отсутствие случайных сил. Линейный закон возрастания среднего квадрата флуктуаций поперечной скорости каналированных частиц наблюдается для тех участков траектории, для которых

$$\bar{U}_{xx}(x) > 0. \quad (3.4.2)$$

Точка перегиба графика функции потенциальной энергии находится из уравнения

$$\bar{U}_{xx}(\bar{x}_c) = 0.$$

Точка \bar{x}_c разделяет области стохастически устойчивого и неустойчивого движения каналированных частиц.

В случае использования безразмерных координат условия (3.4.1) и (3.4.2) примут вид

$$U_{xx}(X) < 0, U_{xx}(X) > 0$$

соответственно.

На рис. 3.4.1 и 3.4.2 приведены графики зависимости второй производной потенциальной энергии взаимодействия налетающего иона Ag с непрерывным потенциалом (110) плоскостного канала кристалла Si без учета и с учетом принципа Паули от безразмерной координаты X . Сопоставляя эти рисунки с видом потенциальной энергии взаимодействия налетающего иона с непрерывным потенциалом плоскостного канала кристалла (рис. 3.3.1 и 3.3.2), можно сказать, что:

- для всех значений зарядовых состояний областями стохастической неустойчивости поперечного движения каналированных частиц являются области, расположенные вблизи атомных плоскостей;

- для зарядовых состояний, которым соответствует двухъямный потенциал, области расположенные в центре потенциальной ямы являются областями стохастической неустойчивости поперечного движения каналированных частиц;
- для зарядовых состояний, которым соответствует одноямный потенциал, области расположенные в центре потенциальной ямы являются областями стохастической устойчивости поперечного движения каналированных частиц;
- для зарядовых состояний, которым соответствует двухъямный потенциал, области расположенные справа и слева от центральной области являются областями стохастической устойчивости поперечного движения каналированных частиц.

В областях стохастической неустойчивости поперечного движения каналированных частиц наблюдается экспоненциальный рост квадрата флуктуаций поперечной скорости, что ведет к сильному деканалированию ионов серебра. В областях, для которых выполняется условие (3.4.2), происходит скопление ионов серебра, но из-за многократного рассеяния они выбывают в другие каналы.

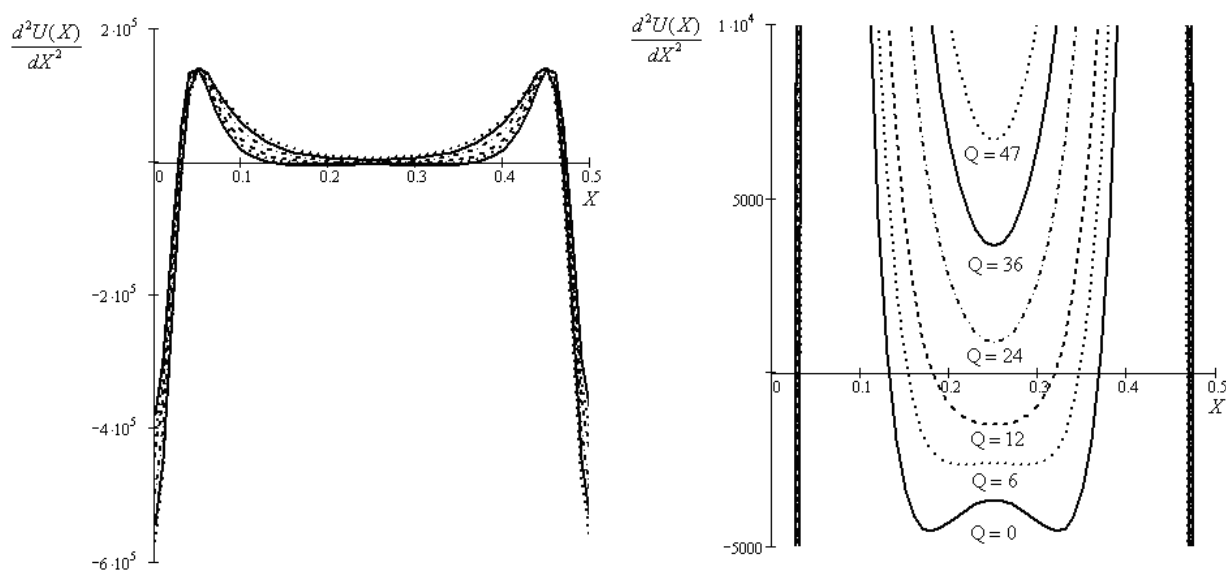


Рисунок 3.4.1. Вторая производная от потенциальной энергии взаимодействия при различных зарядовых состояниях налетающего иона Ag с непрерывным потенциалом (110) плоскостного канала кристалла Si без учета принципа Паули

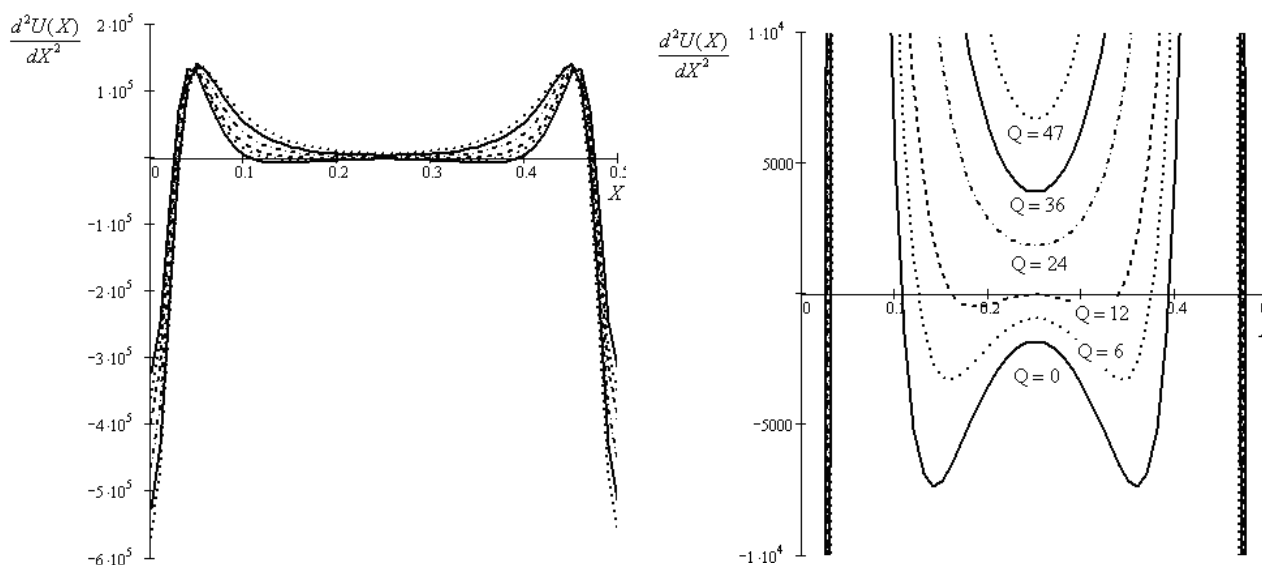


Рисунок 3.4.2. Вторая производная от потенциальной энергии взаимодействия при различных зарядовых состояниях налетающего иона Ag с непрерывным потенциалом (110) плоскостного канала кристалла Si с учетом принципа Паули

На рис. 3.4.3 приведено сравнение вторых производных от потенциальной энергии взаимодействия налетающего иона Ag с непрерывным потенциалом (110) плоскостного канала кристалла Si без учета и с учетом принципа Паули для зарядовых состояний, соответствующих двухъямному потенциалу. Из рисунка видно, что учет принципа Паули в выражении для потенциальной энергии взаимодействия налетающего иона с атомом кристалла ведет к увеличению центральной области, соответствующей стохастической неустойчивости поперечного движения каналированных частиц. С увеличением зарядового состояния эта область уменьшается и после значений $Q=20$ при выборе потенциальной энергии взаимодействия без учета принципа Паули и $Q=14$ — с учетом принципа Паули исчезает совсем.

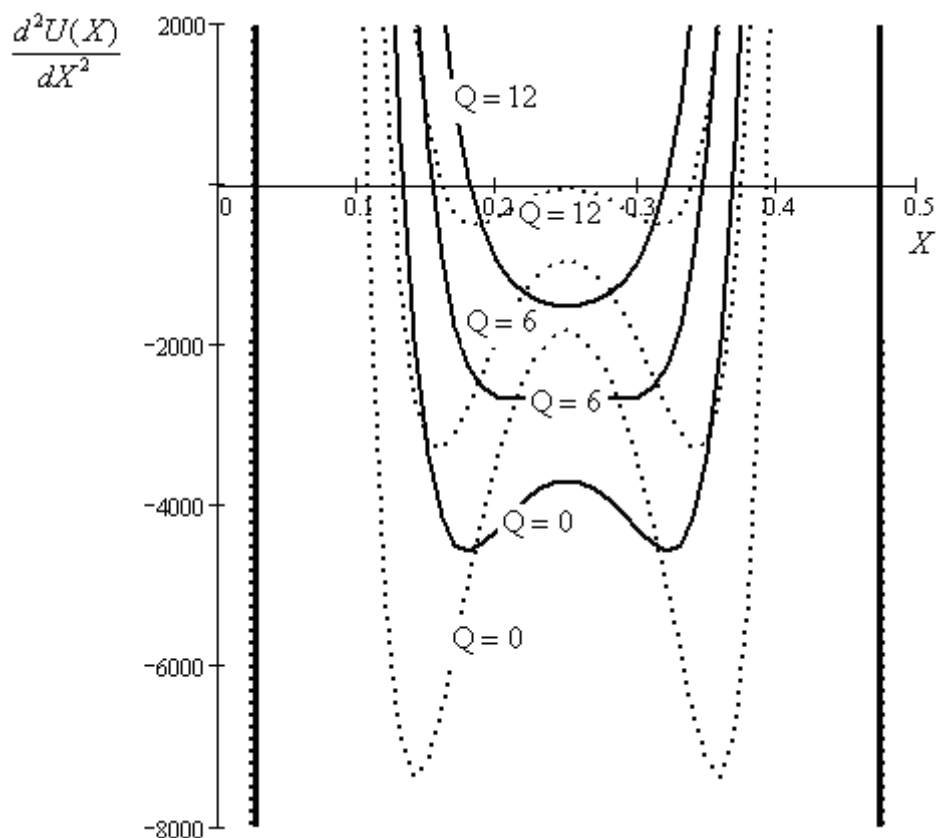


Рисунок 3.4.3. Вторая производная от потенциальной энергии взаимодействия при различных зарядовых состояниях налетающего иона Ag с непрерывным потенциалом (110) плоскостного канала кристалла Si. Сплошная линия соответствует потенциальной энергии взаимодействия налетающего иона с атомом кристалла, выбранной в форме без учета принципа Паули, пунктирная — с учетом принципа Паули

Итак, все результаты моделирования говорят о том, что при прохождении ионов Ag через (110) плоскостной канал кристалла Si наблюдается эффект нагрева, небольшим значениям зарядовых состояний иона соответствует наиболее интенсивный нагрев. Понятно, что результаты носят приближенный характер в виду выбора потенциалов изолированных атомов в наиболее простой аппроксимации кулоновского экранированного потенциала. Тем не менее, в итоге при фиксированном значении зарядового состояния налетающего иона Q получено качественное согласие с экспериментом. В [2] отмечается, что для всех кристаллов значение зарядового состояния для каналированных ионов выше в режиме охлаждения и зарядовое состояние уменьшается в режиме нагрева. Это утверждение

справедливо и для полученных результатов: сильный нагрев соответствует меньшим значениям Q , с увеличением значения зарядового состояния интенсивность нагрева уменьшается. Более точные результаты могут быть получены при учете изменения зарядового состояния Q в зависимости от энергии иона.

В дальнейшем планируется модернизация программы PST с целью изучения явления нагрева не только в алмазоподобных кристаллах, но и в кристаллах с ГЦК решеткой (кристаллы Pt и Ni).

Список литературы к главе 3

1. Assmann W., Huber H., Karamian S.A. et al. // Phys. Rev. Lett. 1999. V. 83. №9. P. 1759.
2. Grüner F., Assmann W., Bell F. et al. // Phys. Rev. 2003. B 68. 174104.
3. Toepffer C. // Phys. Rev. 2006. V. A 73. 062901.
4. Гранкина Т.В., Похил Г.П., Чердынцев В.В. // Поверхность.. Рентген., синхротр. и нейтрон. исслед. 2005. №. 4. С. 22.
5. Похил Г.П., Чердынцев В.В. // Поверхность. Рентген., синхротр. и нейтрон. исслед. 2007. №. 3. С. 40.
6. Похил Г.П., Чердынцев В.В. // Поверхность. Рентген., синхротр. и нейтрон. исслед. 2008. №. 3. С. 71.
7. Малышевский В.С., Рахимов С.В. // ЖТФ. 2007. Т. 77. В. 4. С.1.
8. Малышевский В.С., Рахимов С.В. // ПЖТФ. 2007. Т. 33. В. 16. С.1.
9. Кощеев В.П. // Изв. вузов. Физика. 1995. №1. С. 100.
10. Пискунов Н.С. Дифференциальное и интегральное исчисления, Т. II. М.: Наука 1968. 312 с.

Список приложений к главе 3

ПРИЛОЖЕНИЕ 17 Выражение для потенциальной энергии взаимодействия налетающей частицы с непрерывным потенциалом канала кристалла

Глава 4

Влияние квантового состояния налетающего иона на потенциальную энергию взаимодействия с атомами кристалла

4.1. Эффект Окорокова

4.2. Уравнение Шредингера для водородоподобного иона

4.3. Форм-факторы некоторых состояний электрона водородоподобного иона, полученные на основе уравнения Шредингера

4.3.1. Состояние $1s$

4.3.2. Состояние $2s$

4.3.3. Состояние $2p$

4.4. Уравнение Дирака для водородоподобного иона

4.5. Форм-факторы некоторых состояний электрона водородоподобного иона, полученные на основе уравнения Дирака

4.5.1. Состояние $1s_{1/2}$

4.5.2. Состояние $2s_{1/2}$

4.5.3. Состояние $2p_{1/2}$

4.5.4. Состояние $2p_{3/2}$

4.6. Потенциальная энергия взаимодействия налетающего водородоподобного иона с непрерывным потенциалом плоскостного канала кристалла

Глава 4

Влияние квантового состояния налетающего иона на потенциальную энергию взаимодействия с атомами кристалла

4.1. Эффект Огорокова

Электроны иона, движущегося вдоль кристаллической оси, последовательно взаимодействуют с атомами с периодом T . Если частота $\nu = \frac{1}{T}$ совпадает с энергией перехода, деленной на постоянную Планка h , то электрон возбуждается резонансно. Для иона, движущегося со скоростью v вдоль кристаллической оси с расстоянием между атомами d , частота резонанса ν дается выражением $\nu = \frac{1}{T} = \frac{v}{d}$. Следовательно, условие резонанса для перехода $n \rightarrow n'$ можно записать в виде

$$h\nu = E_{n'} - E_n (= \hbar\omega_{n0}) = \frac{hv}{d}.$$

Впервые это условие было найдено Огороковым. Соответствующее ему резонансное возбуждение называется эффектом Огорокова (resonant coherent excitation, RCE) [1], [2].

Первые экспериментальные подтверждения эффекта связаны с каналированием нерелятивистских ионов. Сообщается о наблюдении когерентного резонансного возбуждения водородоподобного иона He^+ с

переходом электрона из основного состояния с $n=1$ в возбужденное с $n=4$. Движение ионов происходило в монокристаллической пленке серебра [3]. Эксперименты по прохождению водородоподобных ионов с Z от 5 до 9 и гелийподобных ионов F^{7+} в различных осевых направлениях кристаллов Ag и Au описаны в [4] и [5]. Здесь осуществлялся переход орбитального электрона из основного состояния с $n=1$ в возбужденное с $n=2$.

С конца 90-ых годов прошлого столетия сообщается о резонансном когерентном возбуждении релятивистских водородоподобных ионов аргона в режиме плоскостного каналирования в кристалле кремния. Известны работы по резонансному возбуждению электрона из состояния $1s$ в состояние с $n=2$ [6], [7], из состояния $1s$ в состояние с $n=3$ [8]. Аналогичные эксперименты проводились с гелийподобными ионами аргона. Так же известны работы с ионами Fe^{25+} и Fe^{24+} .

В экспериментах измерялись зарядовые распределения ионов, пролетевших кристалл и (или) интенсивность лучей, испускаемых ионами при высвечивании возбужденного состояния, возникающего внутри кристаллической мишени.

На протяжении всего времени изучения эффекта Окорокова развиваются методы вычисления функции вероятности резонансного когерентного возбуждения, и производится сравнение численных результатов с результатами экспериментов [9], [10], [11], [12]. Методами компьютерного моделирования произведено исследование влияния тонкой структуры энергетических уровней орбитальных электронов иона Ar^{17+} на вероятность резонансного когерентного возбуждения [13]. Произведен учет спиновых эффектов, возникающих при плоскостном каналировании позитронов [14].

В [15] сообщается о наблюдении резонансного когерентного возбуждения вне условий каналирования. Теперь для резонансного когерентного каналирования в условиях осевого каналирования используется

термин 1D RCE, в условиях плоскостного каналирования — 2D RCE, вне условий каналирования — 3D RCE.

4.2. Уравнение Шредингера для водородоподобного иона

Основным уравнением квантовой механики является уравнение Шредингера:

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = \hat{H} \Psi.$$

где $\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + U(r)$ — оператор Гамильтона, $\Delta = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}$ — оператор Лапласа, $U(r)$ — потенциальная энергия взаимодействия. Записанное в таком виде уравнение пригодно для любых квантовых объектов. В зависимости от того изучается ли отдельная частица, атом или кристалл в целом — изменяется вид оператора Гамильтона \hat{H} , структура же уравнения остается одной и той же.

Если силовое поле стационарно, то уравнение допускает решение вида

$$\Psi(x, y, z, t) = \psi(x, y, z) \exp\left(-\frac{i}{\hbar} Et\right).$$

Координатная часть функции состояния $\psi(x, y, z)$ удовлетворяет уравнению

$$\hat{H}\psi = E\psi, \quad (4.2.1)$$

где E — полная энергия системы. Последнее уравнение называется стационарным уравнением Шредингера.

Рассмотрим задачу о водородоподобной системе. Так же, как и в случае задачи об атоме водорода, задача сводится к рассмотрению движения

электрона в центрально-симметричном кулоновском поле, потенциальная энергия которого задается выражением

$$U(r) = -\frac{Ze^2}{r}.$$

Решение в центрально-симметричном поле представляет собой решение уравнения (4.2.1), причем его удобнее искать в сферической системе координат

$$\hat{H}\psi(r, \theta, \varphi) = E\psi(r, \theta, \varphi), \quad (4.2.2)$$

где гамильтониан имеет вид:

$$\begin{aligned} \hat{H} &= -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + U(r) = \\ &= -\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right) + \frac{1}{r^2\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{r^2\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\right) + U(r). \end{aligned}$$

Последнее уравнение допускает разделение переменных

$$\psi(r, \theta, \varphi) = R(r)Y(\theta, \varphi).$$

Теперь исходное уравнение Шредингера распадается на два уравнения

$$\begin{aligned} \hbar^2 \frac{1}{R} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) R - 2mr^2 U(r) + 2mEr^2 = \\ = \frac{1}{Y} \left(-\hbar^2 \left(\frac{1}{\sin\theta} \frac{\partial}{\partial\theta} \left(\sin\theta \frac{\partial}{\partial\theta} \right) + \frac{1}{\sin^2\theta} \frac{\partial^2}{\partial\varphi^2} \right) \right) Y \end{aligned}$$

Правая и левая часть этого равенства есть функции разных независимых переменных, поэтому они должны быть равны одной и той же постоянной величине. В этом случае решение уравнения с правой частью равенства выражается одной из сферических функций $Y_{lm}(\theta, \varphi)$, а постоянная величина равна $\hbar^2 l(l+1)$. Здесь l — орбитальное квантовое число, $l = 0, 1, 2, \dots, (n-1)$; m — магнитное квантовое число, $m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm l$. Решение радиального уравнения зависит от вида потенциала $U(r)$. В случае рассмотрения задачи об атоме водорода или водородоподобной системы решение известно. Это радиальные волновые функции $R_{nl}(r)$, где n —

главное квантовое число, $n = 1, 2, 3 \dots$. Ниже приведены радиальные волновые функции для основного и ближайших к нему возбужденных состояний

$$R_{10} = \frac{2}{a^{3/2}} \exp\left(-\frac{r}{a}\right),$$

$$R_{20} = \frac{2}{\sqrt{2}a^{3/2}} \left(1 - \frac{r}{2a}\right) \exp\left(-\frac{r}{2a}\right),$$

$$R_{21} = \frac{r}{2\sqrt{6}a^{5/2}} \exp\left(-\frac{r}{2a}\right)$$

и т. д. Здесь $a = \frac{0,529}{Z} \text{ \AA}$.

Так же приведем несколько сферических функций

$$Y_{00} = \frac{1}{\sqrt{4\pi}},$$

$$Y_{10} = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos \theta,$$

$$Y_{1, \pm 1} = \sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin \theta \exp(\pm i\varphi)$$

и т.д.

Итак, полная волновая функция состояния атома водородоподобного иона определяется выражением

$$\psi_{nlm}(r, \theta, \varphi) = R_{nl}(r) Y_{lm}(\theta, \varphi). \quad (4.2.3)$$

4.3. Форм-факторы некоторых состояний электрона водородоподобного иона, полученные на основе уравнения Шредингера

В водородоподобных ионах возможны следующие состояния электрона: $1s$, $2s$, $2p$, $2p$, $m = \pm 1$, $3s$, $3p$, $3p$, $m = \pm 1$, $3d$ и т. д. Определим форм-факторы состояний с главными квантовыми числами $n = 1$ и $n = 2$. По определению

$$F(g) = \int \Psi^*(\vec{r}) \Psi(\vec{r}) \exp(-i\vec{g}\vec{r}) d^3\vec{r}, \quad (4.3.1)$$

где звездочкой обозначается комплексное сопряжение. В общем случае в сферической системе координат получим:

$$F(g) = \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^\infty r^2 dr \int_0^\pi \Psi^*(r, \theta, \varphi) \Psi(r, \theta, \varphi) \exp(-igr \cos \theta) \sin \theta d\theta.$$

Несложно определить выражение для $F(g)$ в случае отсутствия угловой зависимости в произведении $\Psi^* \Psi$:

$$F(g) = \frac{4\pi}{g} \int_0^\infty \Psi^*(r, \varphi) \Psi(r, \varphi) r \sin(gr) dr.$$

4.3.1. Состояние $1s$

Волновая функция этого состояния имеет вид:

$$\Psi_{100}(r, \theta, \varphi) = R_{10}(r) Y_{00}(\theta, \varphi) = \frac{1}{\sqrt{\pi} a^{3/2}} \exp\left(-\frac{r}{a}\right).$$

Запишем выражение для форм-фактора

$$F(g) = \frac{4\pi}{g} \int_0^\infty \left(\frac{1}{\sqrt{\pi} a^{3/2}} \exp\left(-\frac{r}{a}\right) \right)^2 r \sin(gr) dr = \frac{4}{g a^3} \int_0^\infty r \exp\left(-\frac{2r}{a}\right) \sin(gr) dr.$$

Согласно [17]

$$\int_0^\infty x \exp -ax \sin mx = \frac{2am}{a^2 + m^2},$$

где $a > 0$. Теперь запишем:

$$F(g) = \frac{16}{(4 + (ag)^2)^2}. \quad (4.3.2)$$

На рис. 4.3.1. представлена зависимость форм-фактора водородоподобного иона, электрон которого находится в состоянии $1s$, от безразмерной величины $k = ag$.

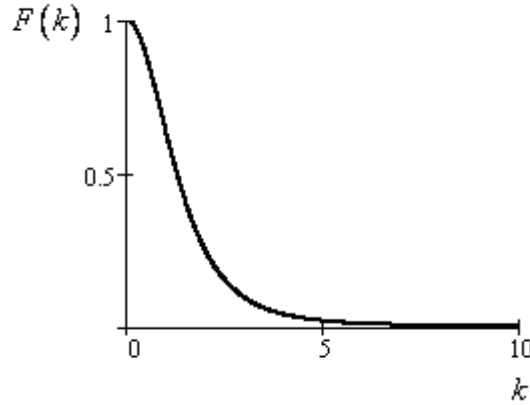


Рисунок 4.3.1. Зависимость форм-фактора водородоподобного иона, электрон которого находится в состоянии $1s$, от безразмерной величины $k = ag$

4.3.2. Состояние $2s$

Волновая функция состояния $2s$ имеет вид:

$$\psi_{200}(r, \theta, \varphi) = R_{20}(r)Y_{00}(\theta, \varphi) = \frac{1}{2\sqrt{2\pi}a^{3/2}} \left(1 - \frac{r}{2a}\right) \exp\left(-\frac{r}{2a}\right).$$

Запишем выражение для форм-фактора

$$\begin{aligned} F(g) &= \frac{4\pi}{g} \int_0^\infty \left(\frac{1}{2\sqrt{2\pi}a^{3/2}} \left(1 - \frac{r}{2a}\right) \exp\left(-\frac{r}{2a}\right) \right)^2 r \sin(gr) dr = \\ &= \frac{1}{2a^3 g} \int_0^\infty \left(r - \frac{r^2}{a} + \frac{r^3}{(2a)^2} \right) \exp\left(-\frac{r}{a}\right) \sin(gr) dr. \end{aligned}$$

После вычисления интегралов (см. приложение 18) получим:

$$F(g) = \frac{1}{(1 + (ag)^2)^2} \left(1 - \frac{3 - (ag)^2}{1 + (ag)^2} + \frac{3(1 - (ag)^2)}{(1 + (ag)^2)^2} \right). \quad (4.3.3)$$

На рис. 4.3.2. представлена зависимость форм-фактора водородоподобного иона, электрон которого находится в состоянии $2s$, от безразмерной величины $k = ag$.

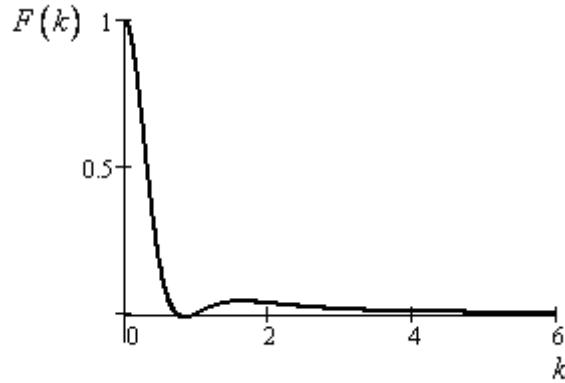


Рисунок 4.3.2. Зависимость форм-фактора водородоподобного иона, электрон которого находится в состоянии $2s$, от безразмерной величины $k = ag$

4.3.3. Состояние $2p$

Значение магнитного момента $m = 0$. Волновая функция этого состояния имеет вид:

$$\psi_{210}(r, \theta, \varphi) = R_{21}(r)Y_{10}(\theta, \varphi) = \sqrt{\frac{3}{6\pi}} \frac{r}{4a^{5/2}} \exp\left(-\frac{r}{2a}\right) \cos \theta.$$

Запишем выражение для форм-фактора

$$\begin{aligned} F(g) &= \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^\infty r^2 dr \int_0^\pi \left(\sqrt{\frac{3}{6\pi}} \frac{r}{4a^{5/2}} \exp\left(-\frac{r}{2a}\right) \cos \theta \right)^2 \exp(-igr \cos \theta) \sin \theta d\theta = \\ &= \frac{1}{16a^5} \int_0^\infty r^4 \exp\left(-\frac{r}{a}\right) dr \int_0^\pi \cos^2 \theta \sin \theta \exp(-igr \cos \theta) d\theta. \end{aligned}$$

После вычисления интегралов (см. приложение 19) получим:

$$F(g) = \frac{1}{(1+(ag)^2)^2} \left(\frac{3(1-(ag)^2)}{(1+(ag)^2)^2} + \frac{1}{2(ag)^2} \frac{1-3(ag)^2}{1+(ag)^2} - \frac{1}{2(ag)^2} \right). \quad (4.3.4)$$

На рис. 4.3.3. представлена зависимость форм-фактора водородоподобного иона, электрон которого находится в состоянии $2p$, от безразмерной величины $k = ag$.

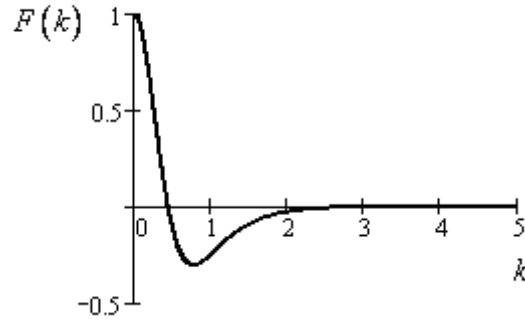


Рисунок 4.3.3. Зависимость форм-фактора водородоподобного иона, электрон которого находится в состоянии $2p$, от безразмерной величины $k = ag$

Значение магнитного момента $m = \pm 1$. Волновая функция этого состояния имеет вид:

$$\psi_{2, 1, \pm 1}(r, \theta, \varphi) = R_{21}(r)Y_{1, \pm 1}(\theta, \varphi) = \frac{r}{8\sqrt{\pi}a^{5/2}} \exp\left(-\frac{r}{2a}\right) \sin \theta \exp(\pm i\varphi).$$

Выражение для форм-фактора примет вид:

$$\begin{aligned} F(g) &= \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^\infty r^2 dr \int_0^\pi \left(\frac{r}{8\sqrt{\pi}a^{5/2}} \exp\left(-\frac{r}{2a}\right) \sin \theta \right)^2 \exp(-igr \cos \theta) \sin \theta d\theta = \\ &= \frac{1}{32a^5} \int_0^\infty r^4 \exp\left(-\frac{r}{a}\right) dr \int_0^\pi \exp(-igr \cos \theta) \sin^3 \theta d\theta. \end{aligned}$$

После вычисления интегралов (см. приложение 20) получим:

$$F(g) = \frac{1}{4(ag)^2} \frac{1}{(1+(ag)^2)^2} \left(1 - \frac{1-3(ag)^2}{1+(ag)^2} \right). \quad (4.3.5)$$

На рис. 4.3.4. представлена зависимость форм-фактора водородоподобного иона, электрон которого находится в состоянии $2p$ со значением магнитного момента $m = \pm 1$, от безразмерной величины $k = ag$.

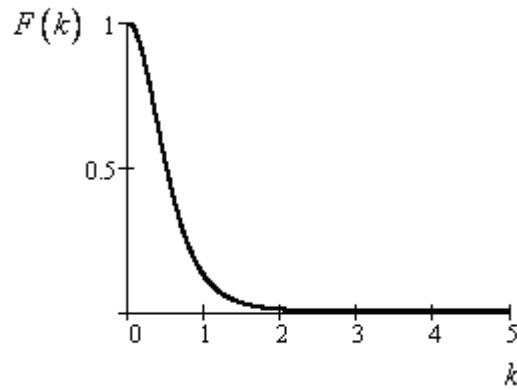


Рисунок 4.3.4. Зависимость форм-фактора водородоподобного иона, электрон которого находится в состоянии $2p$ со значением магнитного момента $m = \pm 1$, от безразмерной величины $k = ag$

4.4. Уравнение Дирака для водородоподобного иона

Релятивистское уравнение, пригодное для описания свойств электронов и других частиц, имеющих спин $\frac{1}{2}$, получил Дирак. Рассмотрим теорию одной частицы, то есть все полученные результаты будут справедливы для водородоподобных ионов.

Уравнения Дирака представляют собой систему однородных дифференциальных уравнений первого порядка для двух спинорных функций φ и χ :

$$\begin{cases} i \frac{\partial \varphi}{\partial t} = m\varphi + \hat{\sigma} \hat{p} \chi, \\ i \frac{\partial \chi}{\partial t} = -m\chi + \hat{\sigma} \hat{p} \varphi, \end{cases}$$

где $\hat{\sigma} = (\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z)$ — матрицы Паули, $\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$, $\sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}$,
 $\sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$, $\hat{p} = -i\nabla$ — оператор импульса, $\nabla = \vec{i} \frac{\partial}{\partial x} + \vec{j} \frac{\partial}{\partial y} + \vec{k} \frac{\partial}{\partial z}$ —
оператор набла, m — масса электрона.

Совокупность двух спиноров φ и χ можно представить как единую
четырёхкомпонентную величину ψ , называемую биспинором:

$$\psi = \begin{pmatrix} \varphi \\ \chi \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \\ \psi_3 \\ \psi_4 \end{pmatrix}.$$

Введя четырехрядные матрицы Дирака

$$\hat{\alpha} = \begin{pmatrix} 0 & \hat{\sigma} \\ \hat{\sigma} & 0 \end{pmatrix}, \quad \beta = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix},$$

систему уравнений можно переписать в виде единого уравнения

$$i \frac{\partial \psi}{\partial t} = (\hat{\alpha} \hat{p} + \beta m) \psi,$$

которое называется уравнением Дирака.

Последнее уравнение можно записать в форме уравнения Шредингера

$$i \frac{\partial \psi}{\partial t} = \hat{H} \psi,$$

где $\hat{H} = \hat{\alpha} \hat{p} + \beta m$.

Одним из важнейших применений уравнений Дирака является
исследование движения электрона в поле ядра. В этом случае в
гамильтониане уравнения Дирака в форме Шредингера появится
дополнительное слагаемое

$$\hat{H} = \hat{\alpha} \hat{p} + \beta m + U,$$

где $U = -\frac{Z\alpha}{r}$, $r > r_0$ — потенциальная энергия водородоподобного иона.

Здесь $\alpha = \frac{e^2}{\hbar c} = \frac{1}{137}$, Ze — заряд ядра и r_0 — радиус ядра.

Для волновой функции ψ справедливо условие нормировки

$$\int \psi^+ \psi d^3\vec{r} = 1,$$

которое в сферической системе координат переписывается следующим образом

$$\int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^\infty r^2 dr \int_0^\pi \psi^+ \psi \sin \vartheta d\vartheta = 1.$$

Здесь ψ^+ — комплексно-сопряженный биспинор

$$\psi^+ = (\psi_1^* \quad \psi_2^* \quad \psi_3^* \quad \psi_4^*).$$

При отсутствии угловых зависимостей в произведении $\psi^+ \psi$ нормировка в сферической системе координат примет вид

$$4\pi \int_0^\infty \psi^+ \psi r^2 dr = 1.$$

Энергия электрона в атоме принимает определенные значения, поэтому будем использовать стационарное уравнение Шредингера

$$\hat{H}\psi = \varepsilon\psi.$$

Будем искать волновую функцию стационарных состояний в виде:

$$\psi = \begin{pmatrix} \varphi \\ \chi \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} f(r)\Omega_{jlm} \\ (-1)^{\frac{1+l-l'}{2}} g(r)\Omega_{jl'm} \end{pmatrix},$$

где $f(r)$ и $g(r)$ — радиальные функции, $l = j \pm \frac{1}{2}$ — орбитальный момент электрона, j — полный момент электрона, $l' = 2j - l$. Угловая часть волновой функции ψ определяется шаровыми спинорами Ω_{jlm} и $\Omega_{jl'm}$.

Способ определения радиальных функций описан, например, в [18]. Приведем лишь окончательный результат:

$$f(r) = A\sqrt{m+\varepsilon} \exp -\lambda r \cdot 2\lambda r^{\gamma-1} \left(F(-n_r, 2\gamma+1, 2\lambda r) + \frac{n_r}{x - \frac{Z\alpha m}{\lambda}} F(1-n_r, 2\gamma+1, 2\lambda r) \right),$$

$$g(r) = -A\sqrt{m-\varepsilon} \exp -\lambda r \cdot 2\lambda r^{\gamma-1} \left(F(-n_r, 2\gamma+1, 2\lambda r) - \frac{n_r}{x - \frac{Z\alpha m}{\lambda}} F(1-n_r, 2\gamma+1, 2\lambda r) \right).$$

Биспинор в этом случае переписывается в виде:

$$\psi = A(2\lambda r)^{\gamma-1} \exp(-\lambda r) \begin{pmatrix} \sqrt{m+\varepsilon} \left(F(-n_r, 2\gamma+1, 2\lambda r) + \frac{n_r}{x - \frac{Z\alpha m}{\lambda}} F(1-n_r, 2\gamma+1, 2\lambda r) \right) \Omega_{jlm} \\ -(-1)^{\frac{1+l-l'}{2}} \sqrt{m-\varepsilon} \left(F(-n_r, 2\gamma+1, 2\lambda r) - \frac{n_r}{x - \frac{Z\alpha m}{\lambda}} F(1-n_r, 2\gamma+1, 2\lambda r) \right) \Omega_{j'l'm} \end{pmatrix}. \quad (4.4.1)$$

Коэффициент A определяется из условия нормировки. Дискретные уровни энергии даются выражением:

$$\varepsilon = \frac{mc^2}{\sqrt{1 + \frac{(Z\alpha)^2}{\left(\sqrt{x^2 - (Z\alpha)^2} + n_r\right)^2}}}, \quad (4.4.2)$$

$$x = \begin{cases} -\left(j + \frac{1}{2}\right) = -l + 1, & \text{если } j = l + \frac{1}{2}, \\ j + \frac{1}{2} = l, & \text{если } j = l - \frac{1}{2}. \end{cases} \quad (4.4.3)$$

Радиальное квантовое число пробегает следующие значения:

$$n_r = \begin{cases} 0, 1, 2, \dots & \text{при } x < 0; \\ 1, 2, 3, \dots & \text{при } x > 0. \end{cases} \quad (4.4.4)$$

Параметры λ и γ определяются выражениями вида:

$$\lambda = \frac{\sqrt{m^2 c^2 - \varepsilon^2}}{\hbar c}, \quad (4.4.5)$$

$$\gamma^2 = x^2 - (Z\alpha)^2. \quad (4.4.6)$$

$F(\alpha, \beta, z)$ — вырожденная гипергеометрическая функция, определяемая рядом

$$F(\alpha, \beta, z) = 1 + \frac{\alpha}{\beta} \frac{z}{1!} + \frac{\alpha(\alpha+1)}{\beta(\beta+1)} \frac{z^2}{2!} + \dots \quad (4.4.7)$$

Компоненты шаровых спиноров имеют вид:

$$\Omega_{j,l,m} = \begin{pmatrix} \sqrt{\frac{j+m}{2j}} Y_{l,m-\frac{1}{2}} \\ \sqrt{\frac{j-m}{2j}} Y_{l,m+\frac{1}{2}} \end{pmatrix}, \text{ если } j = l + \frac{1}{2},$$

$$\Omega_{j,l,m} = \begin{pmatrix} -\sqrt{\frac{j-m+1}{2j+2}} Y_{l,m-\frac{1}{2}} \\ \sqrt{\frac{j+m+1}{2j+2}} Y_{l,m+\frac{1}{2}} \end{pmatrix}, \text{ если } j = l - \frac{1}{2}, \quad (4.4.8)$$

где m — магнитный момент электрона, принимающий значения $m = \pm j, \pm(j-1), \dots$, Y_{lm} — сферические функции.

4.5. Форм-факторы некоторых состояний электрона водородоподобного иона, полученные на основе уравнения Дирака

При учете спина электрона обозначение " nl " квантового состояния частицы заменяется обозначением " nl_j ", где квантовое число j характеризует полный момент электрона в данном состоянии. Таким образом, в водородоподобных атомах возможны состояния $1s_{\frac{1}{2}}$, $2s_{\frac{1}{2}}$, $2p_{\frac{1}{2}}$, $2p_{\frac{3}{2}}$, $3s_{\frac{1}{2}}$, $3p_{\frac{1}{2}}$, $3p_{\frac{3}{2}}$, $3d_{\frac{3}{2}}$ и так далее.

Определим форм-факторы состояний $1s_{\frac{1}{2}}$, $2s_{\frac{1}{2}}$, $2p_{\frac{1}{2}}$ и $2p_{\frac{3}{2}}$. По определению

$$F(g) = \int \psi^+ \psi \exp(-i\vec{g}\vec{r}) d^3\vec{r}.$$

В общем случае в сферической системе координат получим:

$$F(g) = \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^\infty r^2 dr \int_0^\pi \psi^+ \psi \exp(-igr \cos \theta) \sin \theta d\theta.$$

Несложно определить выражение для $F(g)$ в случае отсутствия угловой зависимости в произведении $\psi^+ \psi$:

$$F(g) = \frac{4\pi}{g} \int_0^\infty \psi^+ \psi r \sin(gr) dr. \quad (4.5.1)$$

4.5.1. Состояние $1s_{\frac{1}{2}}$

Это состояние характеризуется следующими квантовыми числами:

$n=1$, $l=0$, $j=\frac{1}{2}$, $l'=2j-l=1$, $m=\pm\frac{1}{2}$. Так как $j=l+\frac{1}{2}$, то согласно (4.4.3) $x=-1$. Радиальное квантовое число равно $n_r = n - |x| = 0$.

Сначала рассмотрим налетающий водородоподобный ион, электрон которого находится в состоянии $1s_{\frac{1}{2}}$ при значении магнитного квантового числа $m=\frac{1}{2}$. Определим выражения для гипергеометрической функции и шаровых спиноров:

$$F(-n_r, 2\gamma+1, 2\lambda r) = F(0, 2\gamma+1, 2\lambda r) = 1,$$

$$\Omega_{jlm} = \Omega_{\frac{1}{2}, 0, \frac{1}{2}} = \begin{pmatrix} Y_{00} \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{4\pi}} \\ 0 \end{pmatrix},$$

$$\Omega_{j'l'm} = \Omega_{\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}} = \begin{pmatrix} -\frac{1}{\sqrt{3}} Y_{10} \\ \sqrt{\frac{2}{3}} Y_{11} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -i \frac{1}{\sqrt{4\pi}} \cos \theta \\ -i \frac{1}{\sqrt{4\pi}} \sin \theta \exp(i\varphi) \end{pmatrix}.$$

Волновая функция налетающего водородоподобного иона, электрон которого находится в состоянии $1s_{\frac{1}{2}}$, $m = \frac{1}{2}$, (4.4.1) запишется в виде:

$$\psi = \frac{A}{\sqrt{4\pi}} (2\lambda r)^{\gamma-1} \exp(-\lambda r) \begin{pmatrix} \sqrt{m+\varepsilon} \\ 0 \\ i\sqrt{m-\varepsilon} \cos \theta \\ i\sqrt{m-\varepsilon} \sin \theta \exp(i\varphi) \end{pmatrix}.$$

Постоянную A определим, исходя из условия нормировки волновой функции ψ (см. приложение 21):

$$A = \sqrt{\frac{(2\lambda)^3}{2m\Gamma(2\gamma+1)}}.$$

Определим выражение для форм-фактора налетающего водородоподобного иона, электрон которого находится в состоянии $1s_{\frac{1}{2}}$:

$$F(g) = \frac{(2\lambda)^{2\gamma+1}}{g\Gamma(2\gamma+1)} \int_0^\infty r^{2\gamma-1} \exp(-2\lambda r) \sin(gr) dr.$$

После интегрирования (см. приложение 19) выражение для форм-фактора переписывается следующим образом:

$$F(g) = \frac{(2\lambda)^{2\gamma+1}}{2\gamma g} \frac{\sin(2\gamma\theta)}{\left((2\lambda)^2 + g^2\right)^\gamma}, \quad (4.5.2)$$

где $\theta = \arctan\left(\frac{g}{2\lambda}\right)$.

Перейдем к рассмотрению налетающего водородоподобного иона, электрон которого находится в состоянии $1s_{\frac{1}{2}}$ при значении магнитного

квантового числа $m = -\frac{1}{2}$. В этом случае изменятся выражения для шаровых спиноров и вид волновой функции:

$$\Omega_{jlm} = \Omega_{\frac{1}{2}, 0, -\frac{1}{2}} = \begin{pmatrix} 0 \\ Y_{00} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ \frac{1}{\sqrt{4\pi}} \end{pmatrix},$$

$$\Omega_{jl'm} = \Omega_{\frac{1}{2}, 1, -\frac{1}{2}} = \begin{pmatrix} -\sqrt{\frac{2}{3}} Y_{1,-1} \\ \frac{1}{\sqrt{3}} Y_{10} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} i \frac{1}{\sqrt{4\pi}} \sin \theta \exp(-i\varphi) \\ i \frac{1}{\sqrt{4\pi}} \cos \theta \end{pmatrix},$$

$$\psi = \frac{A}{\sqrt{4\pi}} 2\lambda r^{\gamma-1} \exp -\lambda r \begin{pmatrix} 0 \\ \sqrt{m+\varepsilon} \\ i\sqrt{m-\varepsilon} \sin \theta \exp -i\varphi \\ -i\sqrt{m-\varepsilon} \cos \theta \end{pmatrix}.$$

Видно, что изменения коснулись знаков и порядка элементов шаровых спиноров и волновой функции, но этот факт никак ни повлияет на произведение $\psi^+ \psi$ и выражение для форм-фактора. Эти рассуждения справедливы и для всех остальных рассмотренных состояний — $2s_{\frac{1}{2}}$, $2p_{\frac{1}{2}}$, $2p_{\frac{3}{2}}$.

Итак, форм-фактор налетающего водородоподобного иона, электрон которого находится в состоянии $1s_{\frac{1}{2}}$, при значениях магнитного момента $m = \pm \frac{1}{2}$ определяется выражением (4.5.2). На рис. 4.5.1 представлен график зависимости форм-фактора от безразмерной величины $k = \frac{g}{2\lambda}$. В этом случае формула (4.5.2) переписывается следующим образом

$$F(k) = \frac{\sin 2\gamma \arctan k}{2\gamma k (1 + k^2)^{\gamma}}.$$

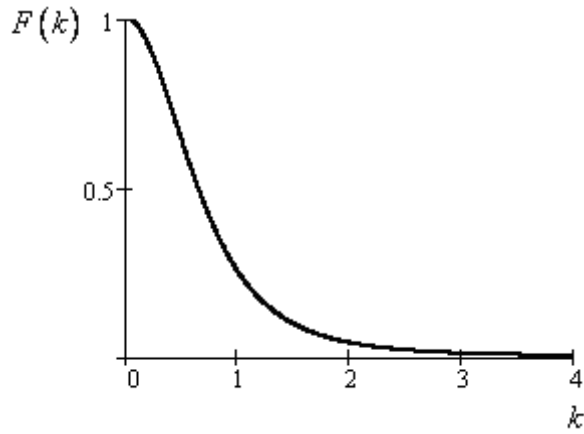


Рисунок 4.5.1. График зависимости форм-фактора налетающего водородоподобного иона

аргона от безразмерной величины $k = \frac{g}{2\lambda}$. Состояние электрона — $1s_{1/2}$, значение

магнитного квантового числа $m = \pm \frac{1}{2}$

4.5.2. Состояние $2s_{1/2}$

Для него: $n = 2$, $l = 0$, $j = \frac{1}{2}$, $l' = 2j - l = 1$, $m = \pm \frac{1}{2}$. Из (4.4.3)

следует, что $x = -1$. Квантовое число $n_r = n - |x| = 1$. Как и раньше, рассмотрим сначала электрон в состоянии $2s_{1/2}$ со значением магнитного

момента $m = \frac{1}{2}$. Полученная в итоге фурье-компонента форм-фактора будет

справедлива и для случая $m = -\frac{1}{2}$.

Запишем выражения для гипергеометрических функций и шаровых спиноров:

$$F(-n_r, 2\gamma + 1, 2\lambda r) = F(-1, 2\gamma + 1, 2\lambda r) = 1 - \frac{2\lambda r}{2\gamma + 1},$$

$$F(1 - n_r, 2\gamma + 1, 2\lambda r) = F(0, 2\gamma + 1, 2\lambda r) = 1,$$

$$\Omega_{jlm} = \Omega_{\frac{1}{2}, 0, \frac{1}{2}} = \begin{pmatrix} Y_{00} \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{4\pi}} \\ 0 \end{pmatrix},$$

$$\Omega_{j'l'm} = \Omega_{\frac{1}{2},1,\frac{1}{2}} = \begin{pmatrix} -\frac{1}{\sqrt{3}}Y_{10} \\ \sqrt{\frac{2}{3}}Y_{11} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -i\frac{1}{\sqrt{4\pi}}\cos\theta \\ -i\frac{1}{\sqrt{4\pi}}\sin\theta\exp(i\varphi) \end{pmatrix}.$$

Волновая функция налетающего водородоподобного иона, электрон которого находится в состоянии $2s_{\frac{1}{2}}$, выглядит следующим образом:

$$\psi = \frac{A}{\sqrt{4\pi}}(2\lambda r)^{\gamma-1}\exp(-\lambda r) \begin{pmatrix} \sqrt{m+\varepsilon} \left(1 - \frac{2\lambda r}{2\gamma+1} + \frac{1}{x - \frac{Z\alpha m}{\lambda}} \right) \\ 0 \\ i\sqrt{m-\varepsilon} \left(1 - \frac{2\lambda r}{2\gamma+1} - \frac{1}{x - \frac{Z\alpha m}{\lambda}} \right) \cos\theta \\ i\sqrt{m-\varepsilon} \left(1 - \frac{2\lambda r}{2\gamma+1} - \frac{1}{x - \frac{Z\alpha m}{\lambda}} \right) \sin\theta \exp(i\varphi) \end{pmatrix}.$$

Постоянную A определим из условия нормирования волновой функции на единицу (см. приложение 23):

$$A = \sqrt{\frac{(2\lambda)^3}{2m\Gamma(2\gamma+1) \left(\frac{1}{\left(x - \frac{Z\alpha m}{\lambda}\right)^2} + \frac{1}{2\gamma+1} \right)}}.$$

Форм-фактор налетающего водородоподобного иона, электрон которого находится в состоянии $2s_{\frac{1}{2}}$, равен следующему выражению:

$$F(g) = \frac{(2\lambda)^{2\gamma+1}}{2mg\Gamma(2\gamma+1) \left(\frac{1}{\left(x - \frac{Z\alpha m}{\lambda}\right)^2} + \frac{1}{2\gamma+1} \right)} \times$$

$$\times \left[\left[2m \left(1 + \frac{1}{\left(x - \frac{Z\alpha m}{\lambda}\right)^2} \right) + \frac{4\varepsilon}{x - \frac{Z\alpha m}{\lambda}} \right] \int_0^\infty r^{2\gamma-1} \exp(-2\lambda r) \sin(gr) dr - \right.$$

$$\left. - \frac{8\lambda}{2\gamma+1} \left(m + \frac{\varepsilon}{x - \frac{Z\alpha m}{\lambda}} \right) \int_0^\infty r^{2\gamma} \exp(-2\lambda r) \sin(gr) dr + 2m \left(\frac{2\lambda}{2\gamma+1} \right)^2 \int_0^\infty r^{2\gamma+1} \exp(-2\lambda r) \sin(gr) dr \right].$$

После интегрирования (см. приложение 22) получим выражение для форм-фактора в релятивистских единицах ($\hbar = 1$, $c = 1$):

$$F(g) = \frac{2\lambda^{2\gamma+1}}{2\gamma mg \sqrt{2\lambda^2 + g^2}^\gamma \left(\frac{1}{\left(x - \frac{Z\alpha m}{\lambda}\right)^2} + \frac{1}{2\gamma+1} \right)} \times$$

$$\times \left[\left[m \left(1 + \frac{1}{\left(x - \frac{Z\alpha m}{\lambda}\right)^2} \right) + \frac{2\varepsilon}{x - \frac{Z\alpha m}{\lambda}} \right] \sin \frac{2\gamma\theta}{\sqrt{2\lambda^2 + g^2}} - \right.$$

$$\left. - 8\lambda \frac{\gamma}{2\gamma+1} \left(m + \frac{\varepsilon}{x - \frac{Z\alpha m}{\lambda}} \right) \frac{\sin \frac{2(\gamma+1)\theta}{\sqrt{2\lambda^2 + g^2}}}{\sqrt{2\lambda^2 + g^2}} + 2m \frac{2\lambda^2}{2\gamma+1} \frac{\sin \frac{2(\gamma+2)\theta}{\sqrt{2\lambda^2 + g^2}}}{\sqrt{2\lambda^2 + g^2}} \right].$$

Не сложно видеть, что в обычных единицах последнее выражение примет вид:

$$\begin{aligned}
F_g = & \frac{2\lambda^{2\gamma+1}}{2\gamma mc^2 g \sqrt{2\lambda^2 + g^2}^\gamma \left[\frac{1}{\left(x - \frac{Z\alpha mc^2}{\hbar c \lambda}\right)^2} + \frac{1}{2\gamma+1} \right]} \times \\
& \times \left[\left[mc^2 \left(1 + \frac{1}{\left(x - \frac{Z\alpha mc^2}{\hbar c \lambda}\right)^2} \right) + \frac{2\varepsilon}{x - \frac{Z\alpha mc^2}{\hbar c \lambda}} \right] \sin 2\gamma\theta - \right. \\
& \left. - 8\lambda \frac{\gamma}{2\gamma+1} \left(mc^2 + \frac{\varepsilon}{x - \frac{Z\alpha mc^2}{\hbar c \lambda}} \right) \frac{\sin(\gamma+1)\theta}{\sqrt{2\lambda^2 + g^2}} + 2mc^2 \frac{\gamma}{2\gamma+1} \frac{\sin(\gamma+2)\theta}{\sqrt{2\lambda^2 + g^2}} \right], \quad (4.5.3)
\end{aligned}$$

где $\theta = \arctan\left(\frac{g}{2\lambda}\right)$, $x = -1$. Здесь $\hbar c = 2 \cdot 10^3 \text{ эВ} \cdot \text{А}^\circ$, $mc^2 = 0,511 \text{ МэВ}$ — энергия покоя электрона.

Запишем выражение для форм-фактора, зависящее от безразмерной величины $k = \frac{g}{2\lambda}$:

$$\begin{aligned}
F_k = & \frac{1}{2\gamma mc^2 k \sqrt{1+k^2}^\gamma \left[\frac{1}{\left(x - \frac{Z\alpha mc^2}{\hbar c \lambda}\right)^2} + \frac{1}{2\gamma+1} \right]} \times \\
& \times \left[\left[mc^2 \left(1 + \frac{1}{\left(x - \frac{Z\alpha mc^2}{\hbar c \lambda}\right)^2} \right) + \frac{2\varepsilon}{x - \frac{Z\alpha mc^2}{\hbar c \lambda}} \right] \sin 2\gamma \arctan k - \right. \\
& \left. - 4 \frac{\gamma}{2\gamma+1} \left(mc^2 + \frac{\varepsilon}{x - \frac{Z\alpha mc^2}{\hbar c \lambda}} \right) \frac{\sin(\gamma+1) \arctan k}{\sqrt{1+k^2}} + 2mc^2 \frac{\gamma}{2\gamma+1} \frac{\sin(\gamma+2) \arctan k}{\sqrt{1+k^2}} \right].
\end{aligned}$$

На рис. 4.5.2 представлен график зависимости $F = F(k)$.

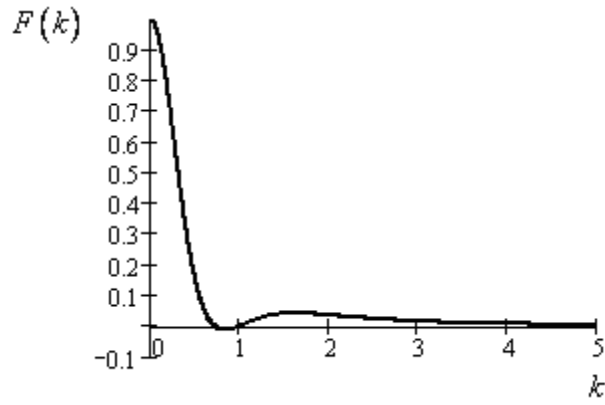


Рисунок 4.5.2. График зависимости форм-фактора налетающего водородоподобного иона аргона от безразмерной величины $k = \frac{g}{2\lambda}$. Состояние электрона — $2s_{1/2}$, значение магнитного квантового числа $m = \pm \frac{1}{2}$

4.5.3. Состояние $2p_{1/2}$

Это состояние характеризуется следующими значениями квантовых чисел: $n = 2$, $l = 1$, $j = \frac{1}{2}$, $l' = 2j - l = 0$, $m = \pm \frac{1}{2}$. Так как $j = l - \frac{1}{2}$, то согласно $x = l = 1$. Радиальное квантовое число равно $n_r = n - |x| = 1$.

При данных квантовых числах запишем выражения для гипергеометрических функций и шаровых спиноров:

$$F(-n_r, 2\gamma + 1, 2\lambda r) = F(-1, 2\gamma + 1, 2\lambda r) = 1 - \frac{2\lambda r}{2\gamma + 1},$$

$$F(1 - n_r, 2\gamma + 1, 2\lambda r) = F(0, 2\gamma + 1, 2\lambda r) = 1,$$

$$\Omega_{jlm} = \Omega_{\frac{1}{2}, 1, \frac{1}{2}} = \begin{pmatrix} -\frac{1}{\sqrt{3}} Y_{10} \\ \sqrt{\frac{2}{3}} Y_{11} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -i \frac{1}{\sqrt{4\pi}} \cos \theta \\ -i \frac{1}{\sqrt{4\pi}} \sin \theta \exp(i\varphi) \end{pmatrix},$$

$$\Omega_{j'l'm} = \Omega_{\frac{1}{2}, 0, \frac{1}{2}} = \begin{pmatrix} Y_{00} \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{4\pi}} \\ 0 \end{pmatrix}.$$

Таким образом, волновая функция, описывающая налетающий водородоподобный ион, электрон которого находится в состоянии $2p_{1/2}$, запишется в виде:

$$\psi = \frac{A}{\sqrt{4\pi}} (2\lambda r)^{\gamma-1} \exp(-\lambda r) \begin{pmatrix} -i\sqrt{m+\varepsilon} \left(1 - \frac{2\lambda r}{2\gamma+1} - \frac{1}{x - \frac{Z\alpha m}{\lambda}} \right) \cos\theta \\ -i\sqrt{m+\varepsilon} \left(1 - \frac{2\lambda r}{2\gamma+1} - \frac{1}{x - \frac{Z\alpha m}{\lambda}} \right) \sin\theta \exp(i\varphi) \\ \sqrt{m-\varepsilon} \left(1 - \frac{2\lambda r}{2\gamma+1} - \frac{1}{x - \frac{Z\alpha m}{\lambda}} \right) \\ 0 \end{pmatrix}.$$

Полученная волновая функция отличается порядком и знаками элементов четырехспинора от волновой функции, описывающей налетающий водородоподобный ион, электрон которого находится в состоянии $2s_{1/2}$ (см. п. 4.5.2). Ранее говорилось, что это никак не влияет на выражение для форм-фактора $F(g)$. Поэтому форм-фактор налетающего водородоподобного иона, электрон которого находится в состоянии $2p_{1/2}$, будет определяться выражением (4.5.3), но величина $x=1$.

Зависимость форм-фактора налетающего водородоподобного иона, электрон которого находится в состоянии $2p_{1/2}$, от безразмерной величины

$k = \frac{g}{2\lambda}$ представлена на рис. 4.5.3.

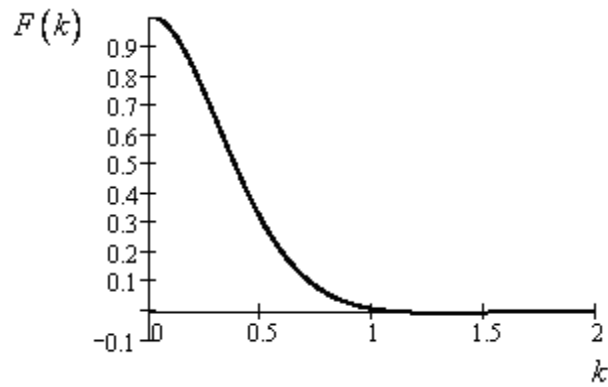


Рисунок 4.5.3. График зависимости форм-фактора налетающего водородоподобного иона

аргона от безразмерной величины $k = \frac{g}{2\lambda}$. Состояние электрона — $2p_{1/2}$, значение

$$\text{магнитного квантового числа } m = \pm \frac{1}{2}$$

4.5.4. Состояние $2p_{3/2}$

Для этого состояния $n = 2$, $l = 1$, $j = \frac{3}{2}$, $l' = 2j - l = 2$. Согласно (4.8),

так как $j = l + \frac{1}{2}$, $x = -2$. Квантовое число $n_r = n - |x| = 0$. Так как магнитный момент принимает значения $m = \pm j, \pm(j-1)...$, то для состояния $2p_{3/2}$

возможны следующие его значения $m = \pm \frac{1}{2}$, $m = \pm \frac{3}{2}$.

Значение магнитного момента $m = \pm \frac{1}{2}$. Запишем выражения для

гипергеометрической функции и шаровых спиноров:

$$F(-n_r, 2\gamma + 1, 2\lambda r) = F(0, 2\gamma + 1, 2\lambda r) = 1,$$

$$\Omega_{jlm} = \Omega_{\frac{3}{2}, 1, \frac{1}{2}} = \begin{pmatrix} \sqrt{\frac{2}{3}} Y_{10} \\ \frac{1}{\sqrt{3}} Y_{11} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} i \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \cos \theta \\ -i \frac{1}{\sqrt{8\pi}} \sin \theta \exp(i\varphi) \end{pmatrix},$$

$$\Omega_{jl'm} = \Omega_{\frac{3}{2}, 2, \frac{1}{2}} = \begin{pmatrix} -\sqrt{\frac{2}{5}} Y_{20} \\ \sqrt{\frac{3}{5}} Y_{21} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -\frac{1}{\sqrt{8\pi}} (1 - 3 \cos^2 \theta) \\ \frac{3}{\sqrt{8\pi}} \cos \theta \sin \theta \exp(i\varphi) \end{pmatrix}.$$

Таким образом, волновая функция налетающего водородоподобного иона, электрон которого находится в состоянии $2p_{\frac{3}{2}}$ при значении магнитного квантового числа $m = \frac{1}{2}$ переписывается в виде:

$$\psi = \frac{A}{\sqrt{8\pi}} (2\lambda r)^{\gamma-1} \exp(-\lambda r) \begin{pmatrix} 2i\sqrt{m+\varepsilon} \cos \theta \\ -i\sqrt{m+\varepsilon} \sin \theta \exp(i\varphi) \\ \sqrt{m-\varepsilon} (1 - 3 \cos^2 \theta) \\ -3\sqrt{m-\varepsilon} \cos \theta \sin \theta \exp(i\varphi) \end{pmatrix}.$$

После нормировки волновой функции получим следующее выражение для постоянной A (см. приложение 24):

$$A = \sqrt{\frac{(2\lambda)^3}{2m\Gamma(2\gamma+1)}}.$$

Определим форм-фактор налетающего водородоподобного иона, электрон которого находится в состоянии $2p_{\frac{3}{2}}$ при значении магнитного квантового числа $m = \frac{1}{2}$:

$$F(g) = \frac{(2\lambda)^3}{8\pi\Gamma(2\gamma+1)} (2\lambda)^{2(\gamma-1)} \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^\infty r^{2\gamma} \exp(-2\lambda r) dr \\ \times \int_0^\pi (1 + 3 \cos^2 \theta) \exp(-igr \cos \theta) \sin \theta d\theta.$$

После интегрирования (см. приложение 25) получим следующее выражение:

$$F(g) = \frac{2\lambda^{2\gamma+1}}{g\Gamma(2\gamma+1) \sqrt{2\lambda^2 + g^2}^\gamma} \left\{ 2\Gamma(2\gamma) \sin 2\gamma\theta + \right. \\ \left. + \frac{3}{g} \Gamma(2\gamma-1) \sqrt{2\lambda^2 + g^2} \cos 2\gamma-1 \theta - \frac{3}{g^2} \Gamma(2\gamma-2) \sqrt{2\lambda^2 + g^2} \sin 2\gamma-2 \theta \right\}, \quad (4.5.4)$$

где $\theta = \arctan\left(\frac{g}{2\lambda}\right)$.

Запишем выражение для форм-фактора налетающего водородоподобного иона, электрон которого находится в состоянии $2p_{\frac{3}{2}}$, при значении магнитного квантового числа $m = \pm \frac{1}{2}$, от безразмерной величины $k = \frac{g}{2\lambda}$:

$$F(k) = \frac{1}{k\Gamma(2\gamma+1)} \frac{1}{1+k^2} {}_2F_2\left(2\gamma, 2\gamma+1; 2\gamma+1, 2\gamma+2; -\frac{k^2}{1+k^2}\right) +$$

$$+ \frac{3}{k} \Gamma(2\gamma-1) \sqrt{1+k^2} \cos(2\gamma-1) \arctan k -$$

$$- \frac{3}{k^2} \Gamma(2\gamma-2) (1+k^2) \sin(2\gamma-2) \arctan k \Bigg).$$

На рисунке 4.5.4 представлен график зависимости форм-фактора налетающего водородоподобного иона, электрон которого находится в состоянии $2p_{\frac{3}{2}}$ при значении магнитного квантового числа $m = \pm \frac{1}{2}$, от безразмерной величины k .

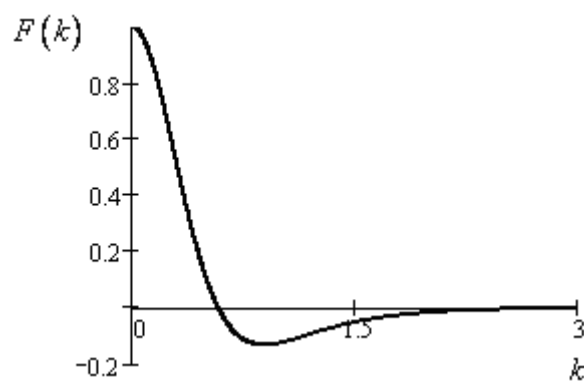


Рисунок 4.5.4. График зависимости форм-фактора налетающего водородоподобного иона

аргона от безразмерной величины $k = \frac{g}{2\lambda}$. Состояние электрона — $2p_{\frac{3}{2}}$, значение

магнитного квантового числа $m = \pm \frac{1}{2}$

Значение магнитного момента $m = \pm \frac{3}{2}$. Выражение для гипергеометрической функций останется таким же, как и для значений $m = \pm \frac{1}{2}$. Шаровые спиноры переписутся в виде:

$$\Omega_{jlm} = \Omega_{\frac{3}{2}, 1, \frac{3}{2}} = \begin{pmatrix} Y_{11} \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -i\sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin \theta \exp(i\varphi) \\ 0 \end{pmatrix},$$

$$\Omega_{j'l'm} = \Omega_{\frac{3}{2}, 2, \frac{3}{2}} = \begin{pmatrix} -\frac{1}{\sqrt{5}} Y_{21} \\ \sqrt{\frac{4}{5}} Y_{22} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -\sqrt{\frac{3}{8\pi}} \cos \theta \sin \varphi \exp(i\varphi) \\ -\sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin^2 \theta \exp(2i\varphi) \end{pmatrix}.$$

Волновая функция налетающего водородоподобного иона, электрон которого находится в состоянии $2p_{\frac{3}{2}}$ при значении магнитного квантового числа $m = \frac{3}{2}$ запишется следующим образом:

$$\psi = \sqrt{\frac{3}{8\pi}} A (2\lambda r)^{\gamma-1} \exp(-\lambda r) \begin{pmatrix} -i\sqrt{m+\varepsilon} \sin \theta \exp(i\varphi) \\ 0 \\ \sqrt{m-\varepsilon} \cos \theta \sin \varphi \exp(i\varphi) \\ \sqrt{m-\varepsilon} \sin^2 \theta \exp(2i\varphi) \end{pmatrix}.$$

После нормировки найдем постоянную A (см. приложение 26):

$$A = \sqrt{\frac{(2\lambda)^3}{2m\Gamma(2\gamma+1)}}.$$

Определим форм-фактор налетающего водородоподобного иона, электрон которого находится в состоянии $2p_{\frac{3}{2}}$ при значении магнитного квантового числа $m = \frac{3}{2}$:

$$F(g) = \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^\infty r^2 dr \int_0^\pi \psi^+ \psi \exp(-igr \cos \theta) \sin \theta d\theta =$$

$$= \frac{3(2\lambda)^{2\gamma+1}}{8\pi\Gamma(2\gamma+1)} \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^\infty r^{2\gamma} \exp(-2\lambda r) dr \int_0^\pi \sin^2 \theta \exp(-igr \cos \theta) \sin \theta d\theta.$$

После интегрирования получим (см. приложение 27):

$$F(g) = \frac{3}{g^2} \frac{2\lambda^{2\gamma+1}}{\Gamma(2\gamma+1) \sqrt{2\lambda^2 + g^2}^{\gamma-\frac{1}{2}}} \times \\ \times \left(-\Gamma(2\gamma-1) \cos(2\gamma-1)\theta + \frac{1}{g} \Gamma(2\gamma-2) \sqrt{2\lambda^2 + g^2} \sin(2\gamma-2)\theta \right). \quad (4.5.5)$$

где $\theta = \arctan\left(\frac{g}{2\lambda}\right)$.

Запишем выражение для форм-фактора (4.5.5) от безразмерной величины $k = \frac{g}{2\lambda}$.

$$F(k) = \frac{3}{k^2} \frac{1}{\Gamma(2\gamma+1) \sqrt{1+k^2}^{\gamma-\frac{1}{2}}} \times \\ \times \left(-\Gamma(2\gamma-1) \cos(2\gamma-1) \arctan k + \frac{1}{k} \Gamma(2\gamma-2) \sqrt{1+k^2} \sin(2\gamma-2) \arctan k \right).$$

График зависимости $F = F(k)$, представлен на рис. 4.5.5.

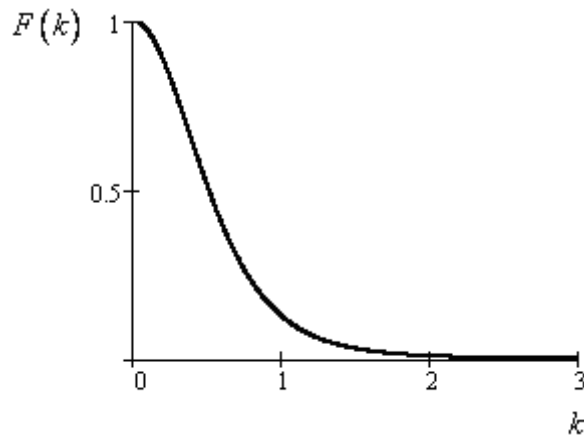


Рисунок 4.5.5. График зависимости форм-фактора налетающего водородоподобного иона

аргона от безразмерной величины $k = \frac{g}{2\lambda}$. Состояние электрона — $2p_{3/2}$, значение

магнитного квантового числа $m = \pm \frac{3}{2}$

4.6. Потенциальная энергия взаимодействия налетающего водородоподобного иона с непрерывным потенциалом плоскостного канала кристалла

В [6] сообщается о наблюдении когерентного резонансного возбуждения $1s$ электрона в состояние $n=2$ релятивистского иона Ar^{17+} каналированного в кристалле кремния. Доля ионов Ar^{17+} прошедших через кристалл Si толщиной $100\text{ }\mu\text{м}$ в различных направлениях была меньше 10^{-3} . При условии каналирования появление ионов Ar^{17+} наблюдали в нескольких десятках процентов случаев.

Определим потенциальную энергию взаимодействия быстрого водородоподобного иона Ar^{17+} с непрерывным потенциалом плоскостного канала кристалла кремния (см. приложение 17)

$$U(X) = \frac{1}{d^3} \sum_{n_x} \sum_{j=1}^8 V(g) \exp\left(-\frac{\sigma^2 g^2}{2}\right) \cos\left(2\pi n_x \left(X - X_j \frac{d}{a_x}\right)\right),$$

где $X = \frac{x}{d}$ — безразмерная координата, d — период решетки кристалла; \vec{g}

— вектор обратной решетки, $g_x = \frac{2\pi n_x d}{a_x}$ — проекция вектора обратной

решетки на ось OX ; $V(g)$ — фурье-компонента потенциальной энергии взаимодействия атом-атом, ион-атом, ядро-атом; σ — средняя амплитуда тепловых колебаний атомов кристалла; X_j — безразмерная координата атомов элементарной ячейки кристалла, выбранная в единицах a_x (см. табл. 1.2.1). Фурье-компоненту потенциала взаимодействия $V(g)$ выберем в форме (см. п. 2.1):

$$V(g) = \frac{g^2}{4\pi} V_1(g) V_2(g).$$

Выберем фурье-компоненту потенциала налетающего иона $V_1(g)$ в виде:

$$V_1(g) = \frac{4\pi e}{g^2} (Z_1 - F_1(g)),$$

а фурье-компоненту потенциала атомов кристалла $V_2(g)$ в приближении Мольера. Таким образом, получаем:

$$V_1(g) = 4\pi (Z_1 - F_1(g)) Z_2 e^2 \sum_{i=1}^3 \frac{\alpha_i}{\mu_i^2 + g^2}$$

где $F_1(g)$ — форм-фактор налетающего иона, $\mu_i = \frac{\beta_i}{a_2}$. Форм-факторы для

налетающего иона, электрон которого находится в состояниях с главными квантовыми числами $n=1$ и $n=2$, полученные исходя из уравнений Шредингера и Дирака, приведены в п. 4.3 и п. 4.5 соответственно.

Результаты представлены на рис. 4.6.1 - 4.6.3. Потенциальную энергию взаимодействия водородоподобного иона с непрерывным потенциалом плоскостного канала кристалла будем отсчитывать от дна потенциальной ямы. Для каждой рассматриваемой плоскости кристалла вид потенциальной энергии взаимодействия водородоподобного иона с непрерывным потенциалом плоскостного канала кристалла будет одним и тем же, отличия коснутся лишь амплитуды $U(X)$, поэтому представим по одному графику для каждой плоскости. Пусть это будет график соответствующий состоянию электрона $1s$ водородоподобного иона (форм-фактор вычисляется исходя из волновых функций уравнения Шредингера). Для остальных состояний приведем значения амплитуд $U(X)$ в табл. 4.6.1 - 4.6.3. Так же проанализируем потенциальную энергию взаимодействия быстрого иона с непрерывным потенциалом в зависимости от числа слагаемых в разложении Фурье, в частности рассмотрим $n_x = 41$ и $n_x = 201$. Для сравнения на каждом рисунке приведена потенциальная энергия

взаимодействия налетающего быстрого ядра аргона с непрерывным потенциалом плоскостного канала кристалла кремния.

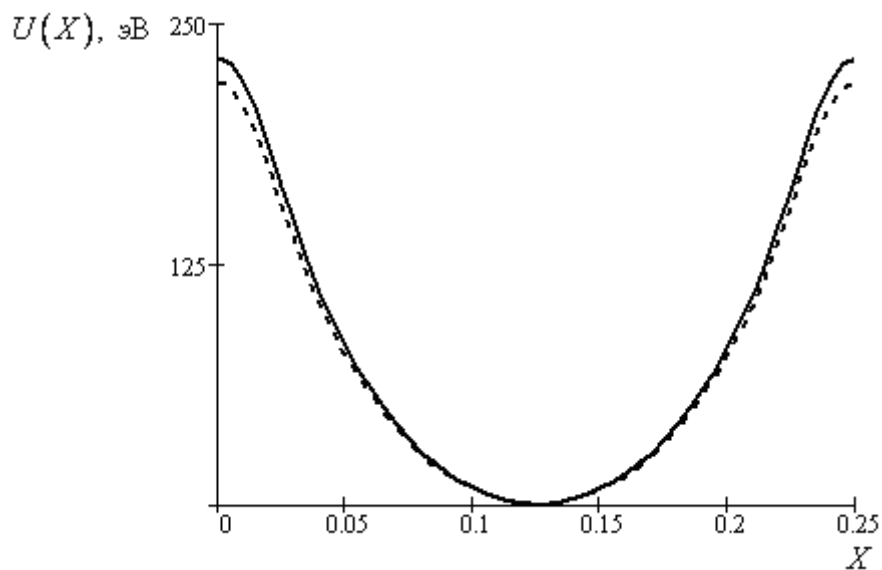


Рисунок 4.6.1. Потенциальная энергия взаимодействия быстрой налетающей частицы с непрерывным потенциалом (100) плоскостного канала кристалла кремния. Сплошная линия — налетающая частица — ядро аргона; пунктирная — ион Ar^{17+} , электрон которого находится в квантовом состоянии $1s$

Таблица 4.6.1 Амплитуда потенциальной энергии взаимодействия быстрой налетающей частицы с непрерывным потенциалом (100) плоскостного канала кристалла кремния, эВ

Налетающая частица — ядро Ar		Налетающая частица — ион Ar^{17+} . Форм-фактор вычислен, исходя из волновых функций уравнения					
		Шредингера			Дирака		
$n_x = 41$	$n_x = 201$	Состояние	$n_x = 41$	$n_x = 201$	Состояние	$n_x = 41$	$n_x = 201$
232,21	232,67	$1s$	219,55	219,99	$1s_{1/2}$	219,55	219,99
		$2s$	221,76	222,23	$2s_{1/2}$	221,79	222,26
		$2p$	222,48	222,95	$2p_{1/2}$	221,19	221,65
		$2p$, $m = \pm 1$	220,51	220,97	$2p_{3/2}$, $m = \pm \frac{1}{2}$	221,87	222,34
					$2p_{3/2}$, $m = \pm \frac{3}{2}$	220,54	221,00

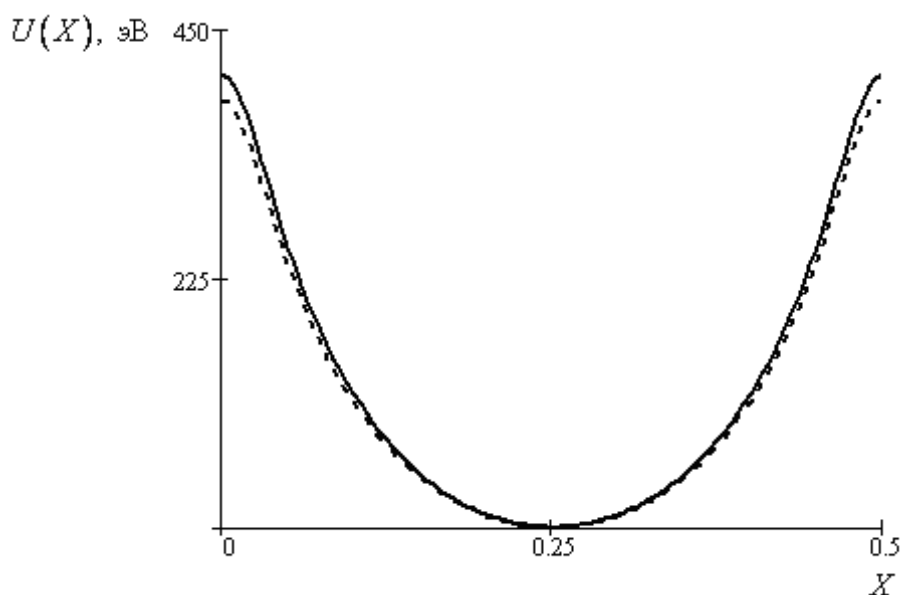


Рисунок 4.6.2. Потенциальная энергия взаимодействия быстрой налетающей частицы с непрерывным потенциалом (110) плоскостного канала кристалла кремния. Сплошная линия — налетающая частица — ядро аргона; пунктирная — ион Ar^{17+} , электрон которого находится в квантовом состоянии $1s$

Таблица 4.6.2. Амплитуда потенциальной энергии взаимодействия быстрой налетающей частицы с непрерывным потенциалом (110) плоскостного канала кристалла кремния, эВ

Налетающая частица — ядро Ar		Налетающая частица — ион Ar^{17+} . Форм-фактор вычислен, исходя из волновых функций уравнения					
		Шредингера			Дирака		
$n_x = 41$	$n_x = 201$	Состояние	$n_x = 41$	$n_x = 201$	Состояние	$n_x = 41$	$n_x = 201$
408,49	408,70	$1s$	386,14	386,34	$1s_{1/2}$	386,14	386,34
		$2s$	389,17	389,37	$2s_{1/2}$	389,20	389,30
		$2p$	390,15	390,36	$2p_{1/2}$	388,39	388,59
		$2p$, $m = \pm 1$	387,47	387,68	$2p_{3/2}$, $m = \pm \frac{1}{2}$	389,32	389,42
					$2p_{3/2}$, $m = \pm \frac{3}{2}$	387,50	387,71

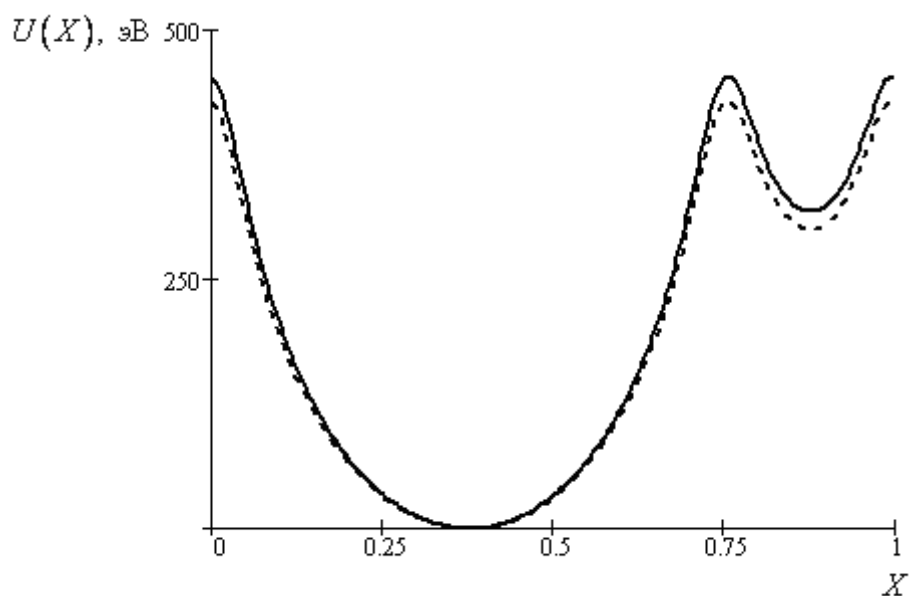


Рисунок 4.6.3. Потенциальная энергия взаимодействия быстрой налетающей частицы с непрерывным потенциалом (111) плоскостного канала кристалла кремния. Сплошная линия — налетающая частица — ядро аргона; пунктирная — ион Ar^{17+} , электрон которого находится в квантовом состоянии $1s$

Таблица 4.6.3. Амплитуда потенциальной энергии взаимодействия быстрой налетающей частицы с непрерывным потенциалом (111) плоскостного канала кристалла кремния, эВ

Налетающая частица — ядро Ar		Налетающая частица — ион Ar^{17+} . Форм-фактор вычислен, исходя из волновых функций уравнения					
		Шредингера			Дирака		
$n_x = 41$	$n_x = 201$	Состояние	$n_x = 41$	$n_x = 201$	Состояние	$n_x = 41$	$n_x = 201$
451,54	451,56	$1s$	426,72	426,75	$1s_{1/2}$	426,72	426,75
		$2s$	429,08	429,11	$2s_{1/2}$	429,11	429,13
		$2p$	429,85	429,88	$2p_{1/2}$	428,48	428,51
		$2p$, $m = \pm 1$	427,77	427,79	$2p_{3/2}$, $m = \pm \frac{1}{2}$	429,20	429,22
					$2p_{3/2}$, $m = \pm \frac{3}{2}$	427,79	427,80

Из приведенных таблиц видно, что при переходе из одного квантового состояния в другое потенциальная энергия взаимодействия изменяется незначительно. Увеличение числа членов в разложении в ряд Фурье также не приводит к существенным изменениям. Для основного состояния амплитуда потенциальных энергий с учетом и без учета спина электрона совпадает.

На основе полученных выражений для потенциальной энергии взаимодействия водородоподобного иона с непрерывным потенциалом плоскостного канала атомами кристалла с помощью программы PST (см. п. 1.7) возможно произвести моделирование траекторий быстрых водородоподобных ионов в плоскостном канале кристалла. Зная решение уравнений Шредингера и Дирака вдоль траектории, можно определить вероятность возбуждения на переходе орбитального электрона из одного состояния в другое и, как следствие, долю ионов Ar^{17+} , сохранивших зарядовое состояние.

Список литературы к главе 4

1. Огороков В.В. // ПЖТФ. 1965. Т.2. №4. С. 175.
2. Огороков В.В. // УФН. 2003. Т. 173. №4. С. 447.
3. Огороков В.В., Толченков Д.Л., Хижняков И.С. и др. // ПЖТФ. 1972. Т.16. №11. С. 588
4. Datz S., Moak C.D., Crawford O.H. et al. // Phys. Rev. Lett. 1978. V. 40. №13. P. 843.
5. Moak C.D., Datz S., Crawford O.H. et al. // Phys. Rev.A. 1979. V. 19. P. 977.
6. Azuma T., Ito T., Yamazaki Y. et al. // Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. 1998. B 135. P. 61.
7. Ito T., Takabayashi Y., Komaki K. et al. // Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. 2000. B 164-165. 68.
8. Azuma T., Ito T., Takabayashi Y. et al. // Physica Scripta. 2001. T. 92. P. 61.
9. Shindo S., Ohtsuki Y.H. // Phys. Rev. B. 1976. V 14. №9. P. 3929.
10. Yamashita Y., Ohtsuki Y.H. // Phys. Rev. B. 1980. V 22. №3. P. 1183.
11. Кривошеев О.Э., Пивоваров Ю.Л. // ПЖТФ. 1992. Т.56. №5. С. 246.
12. Komaki K., Azuma T., Ito T. et al. // Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. 1998. B 146. 19.
13. Бабаев А.А., Пивоваров Ю.Л. // Поверхность. Рентген., синхротр. и нейтрон. исслед. 2008. №.3. С. 87.
14. Кунашенко Ю.П. // Поверхность. Рентген., синхротр. и нейтрон. исслед. 2008. №.10. С. 77.
15. Kondo C., Masugi S., Nakano Y. et al. // Phys. Rev. Lett. 2006. V. 97. 135503.
16. Мултановский В.В., Василевский А.С. Курс теоретической физики. Квантовая механика, Т. IV. М: Просвещение. 1991. 320 с.
17. Двайт Г.Б. Таблицы интегралов и другие математические формулы. М: Наука. 1964.
18. Берестецкий В.Б., Лифшиц Е.М., Питаевский Л.П. Квантовая электродинамика, Т IV. М: Наука. 1989. 724 с.

Список приложений к главе 4

ПРИЛОЖЕНИЕ 18 Вычисление форм-фактора водородоподобного иона, электрон которого находится в состоянии $2s$, исходя из волновых функций уравнения Шредингера

ПРИЛОЖЕНИЕ 19 Вычисление форм-фактора водородоподобного иона, электрон которого находится в состоянии $2p$, исходя из волновых функций уравнения Шредингера

ПРИЛОЖЕНИЕ 20 Вычисление форм-фактора водородоподобного иона, электрон которого находится в состоянии $2p$, $m = \pm 1$, исходя из волновых функций уравнения Шредингера

ПРИЛОЖЕНИЕ 21 Вычисление нормировочного коэффициента волновой функции уравнения Дирака водородоподобного иона, электрон которого находится в состоянии $1s_{\frac{1}{2}}$, исходя из волновых функций уравнения Дирака

ПРИЛОЖЕНИЕ 22 Вычисление форм-фактора водородоподобного иона, электрон которого находится в состоянии $1s_{\frac{1}{2}}$, исходя из волновых функций уравнения Дирака

ПРИЛОЖЕНИЕ 23 Вычисление нормировочного коэффициента волновой функции уравнения Дирака водородоподобного иона, электрон которого находится в состоянии $2s_{\frac{1}{2}}$

ПРИЛОЖЕНИЕ 24 Вычисление нормировочного коэффициента волновой функции уравнения Дирака водородоподобного иона, электрон которого находится в состоянии $2p_{\frac{3}{2}}$, $m = \frac{1}{2}$

ПРИЛОЖЕНИЕ 25 Вычисление форм-фактора водородоподобного иона, электрон которого находится в состоянии $2p_{3/2}$, $m = \frac{1}{2}$, исходя из волновых функций уравнения Дирака

ПРИЛОЖЕНИЕ 26 Вычисление нормировочного коэффициента волновой функции уравнения Дирака водородоподобного иона, электрон которого находится в состоянии $2p_{3/2}$, $m = \frac{3}{2}$

ПРИЛОЖЕНИЕ 27 Вычисление форм-фактора водородоподобного иона, электрон которого находится в состоянии $2p_{3/2}$, $m = \frac{3}{2}$, исходя из волновых функций уравнения Дирака

Глава 5

Влияние квантовых флуктуаций на стохастическую динамику эффекта каналирования релятивистских электронов и позитронов

5.1. Квантовые флуктуации каналированных частиц

5.2. Моделирование движения электронов и позитронов в плоскостном канале кристалла

Глава 5

Влияние квантовых флуктуаций на стохастическую динамику эффекта каналирования релятивистских электронов и позитронов

5.1. Квантовые флуктуации каналированных частиц

В основу квантовой механики положено уравнение движения в форме Гейзенберга

$$\dot{\hat{A}} = \frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \hat{A}],$$

где \hat{A} — оператор, не зависящий от времени, \hat{H} — оператор Гамильтона, $\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + U$, $\Delta = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}$, $U = U(x, y, z)$ — потенциальная энергия.

Запишем последнее уравнение для операторов координаты и импульса

$$\dot{\hat{r}} = \frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \hat{r}], \quad \dot{\hat{p}} = \frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \hat{p}].$$

Вычисление операторов (приложение 28), приведет к уравнению движения в форме Гейзенберга, записанное для операторов координаты и импульса

$$\dot{\hat{r}} = \frac{\hat{p}}{m}, \quad \dot{\hat{p}} = -\nabla U, \quad (5.1.1)$$

которое описывает движение быстрой заряженной частицы в кристалле.

Решение системы уравнений (5.1.1) будем искать в малоугловом приближении

$$\hat{\vec{r}} = \vec{r} + \delta\hat{\vec{r}}, \quad \hat{\vec{p}} = \vec{p} + \delta\hat{\vec{p}} \quad (5.1.2)$$

где $\vec{r} = \langle \Psi | \hat{\vec{r}} | \Psi \rangle = \{x; y; z\}$ и $\vec{p} = \langle \Psi | \hat{\vec{p}} | \Psi \rangle = \{p_x; p_y; p_z\}$ — средние значения оператора координаты и импульса частицы; $|\Psi\rangle$ — квантовое состояние, которое в представлении Гейзенберга не зависит от времени; $\delta\hat{\vec{r}} = \{\delta\hat{x}; \delta\hat{y}; 0\}$ и $\delta\hat{\vec{p}} = \{\delta\hat{p}_x; \delta\hat{p}_y; 0\}$ — флуктуации оператора координаты и импульса. Потенциальную энергию взаимодействия заряженной частицы со всеми электронами и ядрами кристалла представим в виде суммы ее среднего значения и флуктуации

$$U = \bar{U} + \delta U.$$

Разложим последнее выражение в ряд по степеням $\delta\hat{\vec{r}}$ в окрестностях классической траектории, учитывая только линейные по $\delta\hat{\vec{r}}$ члены

$$U = U(\vec{r}) = U(x + \delta\hat{x}, y + \delta\hat{y}) \approx U(x, y) + U_x(x, y)\delta\hat{x} + U_y(x, y)\delta\hat{y} + \delta U(x, y).$$

Таким образом, правая часть уравнения (5.1.1), записанного для оператора импульса, примет вид

$$\nabla U \approx \vec{i}(U_x + U_{xx}\delta\hat{x} + U_{xy}\delta\hat{y}) + \vec{j}(U_y + U_{yx}\delta\hat{x} + U_{yy}\delta\hat{y}),$$

где $U_x = \frac{\partial U}{\partial x}$.

Подставим (5.1.2) в (5.1.1), и сохраним величины одного порядка малости. В результате получим две системы уравнений. Одна система уравнений описывает эволюцию средних значений координаты и импульса

$$\frac{d}{dt} \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} = \frac{1}{m} \begin{pmatrix} p_x \\ p_y \\ p_z \end{pmatrix}, \quad \frac{d}{dt} \begin{pmatrix} p_x \\ p_y \\ p_z \end{pmatrix} = - \begin{pmatrix} U_x \\ U_y \\ 0 \end{pmatrix}, \quad (5.1.3)$$

другая — эволюцию флуктуаций оператора координаты и импульса

$$\frac{d}{dt} \begin{pmatrix} \delta \hat{x} \\ \delta \hat{y} \end{pmatrix} = \frac{1}{m} \begin{pmatrix} \delta \hat{p}_x \\ \delta \hat{p}_y \end{pmatrix}, \quad \frac{d}{dt} \begin{pmatrix} \delta \hat{p}_x \\ \delta \hat{p}_y \end{pmatrix} = - \begin{pmatrix} U_{xx} & U_{xy} \\ U_{yx} & U_{yy} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \delta \hat{x} \\ \delta \hat{y} \end{pmatrix}, \quad (5.1.4)$$

где величины типа $U_{xy} = -\partial^2 U / \partial x \partial y$ вычисляются вдоль траектории, которая является решением системы уравнений (5.1.3).

Система уравнений (5.1.3) представляет собой классическое уравнение движения. Его решение рассматривалось в главе 1, п. 1.3. Решение представлялось в виде суммы двух независимых движений, одно из которых происходит по регулярной траектории \bar{x} , а другое является малой флуктуирующей добавкой δx . Там же была составлена система уравнений для средних квадратов флуктуаций динамических величин:

$$\begin{cases} \frac{d}{dt} \overline{\delta x^2} = 2 \overline{\delta x \delta \dot{x}}, \\ \frac{d}{dt} \overline{\delta x \delta \dot{x}} = \overline{\delta \dot{x}^2} - \frac{1}{m} \bar{U}_{xx} \overline{\delta x^2}, \\ \frac{d}{dt} \overline{\delta \dot{x}^2} = \frac{2}{m} \left(\frac{D_{xx}}{2m} - \bar{U}_{xx} \overline{\delta x \delta \dot{x}} \right). \end{cases}$$

Принимая во внимание, что $x = \bar{x} + \delta x$, и соответственно $p_x = \bar{p}_x + \delta p_x$, перепишем последнюю систему уравнений

$$\begin{cases} \frac{d}{dt} \overline{\delta x^2} = \frac{2}{m} \overline{\delta x \delta p_x}, \\ \frac{d}{dt} \overline{\delta x \delta p_x} = \frac{\delta p_x^2}{m} - \bar{U}_{xx} \overline{\delta x^2}, \\ \frac{d}{dt} \overline{\delta p_x^2} = D_{xx} - 2 \bar{U}_{xx} \overline{\delta x \delta p_x}. \end{cases} \quad (5.1.5)$$

Здесь D_{xx} — компонента коэффициента диффузии в направлении оси OX .

Составим систему уравнений для средних квадратов квантовых флуктуаций оператора координаты и импульса вдоль классической траектории движения в плоскостных каналах кристалла (приложение 29):

$$\begin{aligned}\frac{d}{dt}\langle\P|(\delta\hat{x})^2|\Psi\rangle &= \frac{2}{m}\left[\frac{(\langle\P|\delta\hat{p}_x\delta\hat{x}|\Psi\rangle+\langle\P|\delta\hat{x}\delta\hat{p}_x|\Psi\rangle)}{2}\right], \\ \frac{d}{dt}\left[\frac{(\langle\P|\delta\hat{p}_x\delta\hat{x}|\Psi\rangle+\langle\P|\delta\hat{x}\delta\hat{p}_x|\Psi\rangle)}{2}\right] &= \frac{1}{m}\langle\P|(\delta\hat{p}_x)^2|\Psi\rangle - U_{xx}\langle\P|(\delta\hat{x})^2|\Psi\rangle, \quad (5.1.6) \\ \frac{d}{dt}\langle\P|(\delta\hat{p}_x)^2|\Psi\rangle &= -2U_{xx}\left[\frac{(\langle\P|\delta\hat{p}_x\delta\hat{x}|\Psi\rangle+\langle\P|\delta\hat{x}\delta\hat{p}_x|\Psi\rangle)}{2}\right].\end{aligned}$$

Средние квадраты флуктуаций оператора координаты и импульса не равны нулю в начальный момент времени (то есть при влете частиц в кристалл), так как они должны удовлетворять принципу неопределенности Гейзенберга в соответствии с основными положениями квантовой механики. Можно показать, что коррелятор $\langle\P|\delta\hat{x}\delta\hat{p}_x|\Psi\rangle+\langle\P|\delta\hat{p}_x\delta\hat{x}|\Psi\rangle$ равен нулю в начальный момент времени для волновых функций минимизирующих соотношение неопределенностей Гейзенберга (см. приложение 30).

Результирующее среднеквадратичное отклонение от классической траектории определим как сумму среднеквадратичных отклонений, определяемых частным решением системы неоднородных дифференциальных уравнений (5.1.5) и общим решением системы однородных дифференциальных уравнений (5.1.6). Таким образом, квантовомеханическая неопределенность поперечной координаты и импульса быстрой заряженной частицы может быть учтена с помощью решения системы неоднородных дифференциальных уравнений (5.1.5) с ненулевыми начальными условиями, которые минимизируют соотношение неопределенностей Гейзенберга.

5.2. Моделирование движения электронов и позитронов в плоскостном канале кристалла

С помощью программного комплекса TROPICS [4] произведено моделирование движения электронов и позитронов с энергией 855 МэВ в (110) плоскостном канале кристалла кремния. Расчет был произведен для случаев учитывающих:

- только многократное рассеяние;
- только квантовые флуктуации;
- многократное рассеяние и квантовые флуктуации.

Зависимость доли частиц, оставшихся в плоскостном канале кристалла, от глубины кристалла представлена на рис. 5.2.1 и 5.2.2.

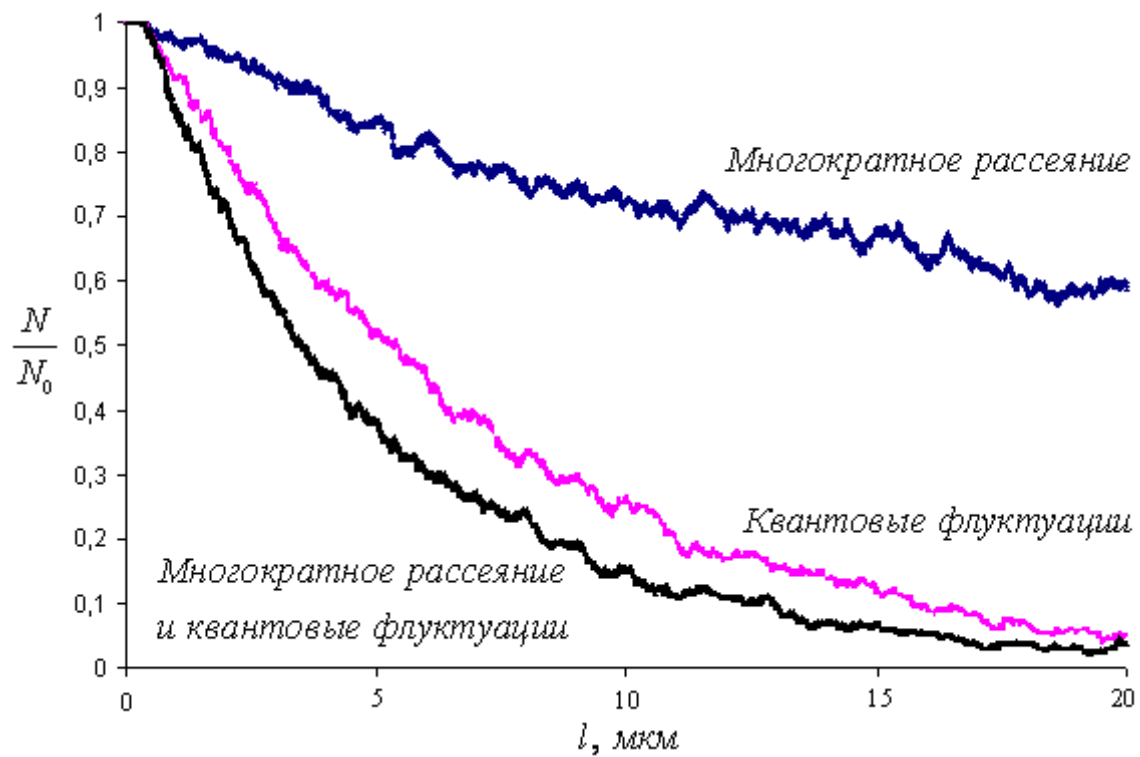


Рисунок 5.2.1. Зависимость доли электронов с энергией 855 МэВ, каналированных в плоскостном канале (110) кристалла кремния, от глубины проникновения в кристалл

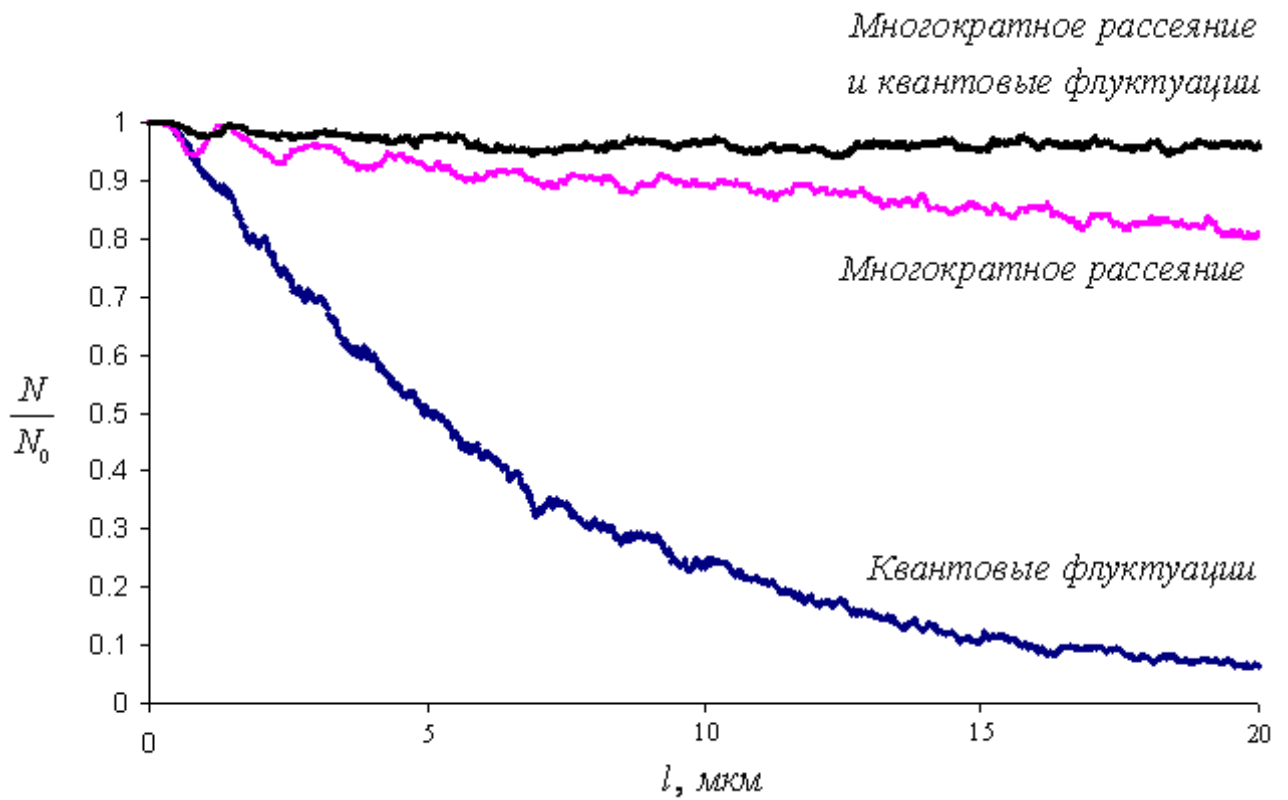


Рисунок 5.2.2. Зависимость доли позитронов с энергией 855 МэВ, каналированных в плоскостном канале (110) кристалла кремния, от глубины проникновения в кристалл

Результаты моделирования были фитированы экспоненциальной функцией

$$f(l) = \text{const} \cdot \exp(-l/l_{\text{ve}}),$$

где l — глубина проникновения, l_{ve} — длина деканалирования.

Таблица 5.2.1. Длины деканалирования для электронов и позитронов с энергией 855 МэВ в (110) плоскостном канале кристалла кремния, полученные в результате компьютерного моделирования

Длина деканалирования, мкм			
	Многократное рассеяние	Квантовые флуктуации	Многократное рассеяние и квантовые флуктуации
Электрон	46,97	5,68	4,56
Позитрон	107,1	9,913	1610

В [5] представлен критический анализ работы [6], в которой была определена длина деканалирования (~ 18 мкм) для электронов с энергией 855 МэВ в плоскостном (110) канале кристалла кремния. В [5] было отмечено, что длина деканалирования для отрицательно заряженных частиц лежит в диапазоне от 2,5 до 12 мкм. Видно, что учет квантовых флуктуаций существенно уменьшает длину деканалирования с 46,97 до 4,56 мкм.

Влияние квантовых флуктуаций на процесс деканалирования позитронов приводит к парадоксальному результату, а именно: деканалирование практически полностью подавлено. Эффект подавления осевого и плоскостного деканалирования релятивистских протонов был впервые обнаружен в эксперименте [7], но не получил объяснения до сих пор.

На рис. 5.2.3 приведены фазовые траектории позитронов с энергией 855 МэВ в (110) плоскостном канале кристалла кремния при учете многократного рассеяния и квантовых флуктуаций. Фазовые траектории построены для глубины проникновения позитронов в кристалл от 17 до 20 мкм. На начальном этапе было заселено два плоскостных канала, $0 \leq x/a_x \leq 1$. Здесь x/a_x — поперечная координата, a_x — период кристаллической решетки в направлении оси OX . Расчет доли частиц, оставшихся в канале, производился в диапазоне от $-\sqrt{2}$ до $\sqrt{2}$, то есть в пределах критического

угла каналирования. На рисунке этот диапазон отмечен красными линиями. Видно, что для позитронов наблюдается интенсивное реканалирование, которое и является причиной практически полного подавления деканалирования.

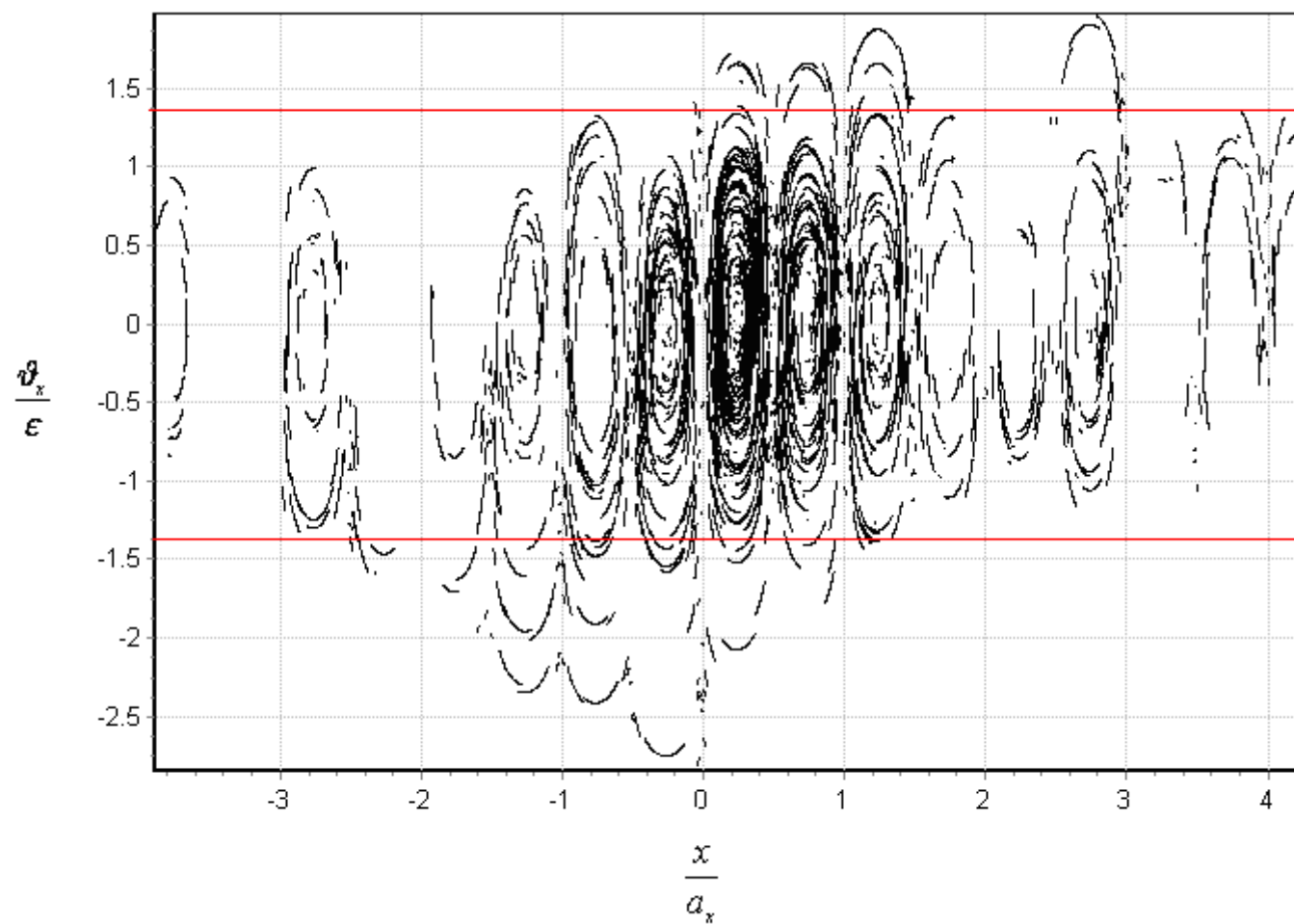


Рисунок 5.2.3. Фазовые траектории позитронов с энергией 855 МэВ в (110) плоскостном канале кристалла кремния при учете многократного рассеяния и квантовых флуктуаций

Список литературы к главе 5

1. Мултановский В.В., Василевский А.С. Курс теоретической физики. Квантовая механика, Т. IV. М: Просвещение. 1991. 320 с.
2. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Квантовая механика (нерелятивистская теория), Т. III. М: Наука. 1989. 768 с.
3. Двайт Г.Б. Таблицы интегралов и другие математические формулы. М: Наука. 1964.
4. Моргун Д.А., Кошечев В.П., Штанов Ю.Н. // Тезисы докладов XL международной конференции по физике взаимодействия заряженных частиц с кристаллами. – М.: Изд.-во УНЦ ДО, 2010.
5. Richard A. Carrigan, Jr. // Fermilab, 2009, FERMILAB-CONF-09-618-AD, 2009. 15pp.
6. Backe H.; Kunz P.; Lauth W.; Rueda A. // Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. B. 2008. V 266. № 17. P. 3835.
7. S.K. Andersen, O. Fish, H. Nielsen et al. // Nucl. Physics. 1980. B 167. P. 1.

Список приложений к главе 5

ПРИЛОЖЕНИЕ 28 Вычисление коммутаторов для операторов координаты и импульса

ПРИЛОЖЕНИЕ 29 Система уравнений для средних квадратов квантовых флуктуаций операторов координаты и импульса

ПРИЛОЖЕНИЕ 30 Вычисление коррелятора $\langle \Psi | \delta \hat{x} \delta \hat{p}_x | \Psi \rangle + \langle \Psi | \delta \hat{p}_x \delta \hat{x} | \Psi \rangle$ для волновых функций минимизирующих соотношение неопределенностей Гейзенберга

Заключение

В рамках ланжевеновского подхода к теории эффекта каналирования составлены уравнения движения плоскостного и осевого каналирования. Определены компоненты диффузионной матрицы для случаев плоскостного и осевого каналирования. Показано, что компоненты вдоль осей OX и OY равны между собой, а смешанные компоненты равны нулю. Ядерный коэффициент диффузии с логарифмической точностью совпадает с тем, что был предложен Линхардом, а электронный — с тем, что был предложен Китагавой и Оцуки.

Полагая, что скорость налетающей частицы больше скоростей атомных электронов, получены выражения для потенциальной энергии взаимодействия налетающей частицы с атомом кристалла без учета и с учетом принципа Паули. Показано, что учет принципа Паули в выражении для потенциальной энергии взаимодействия атом-атом приводит к появлению области отталкивания. В конечном итоге все полученные выражения могут быть использованы в качестве нулевого приближения потенциальной энергии взаимодействия налетающей частицы с атомом.

Произведено моделирование движения ионов Ag через (110) плоскостной канал кристалла Si . Результаты говорят о наблюдении эффекта нагрева; небольшим значениям зарядовых состояний иона соответствует наиболее интенсивный нагрев. Показано, что сильному деканалированию соответствует потенциальная энергия, имеющая двухъямный вид, скорость деканалирования уменьшается при переходе к одноямному потенциалу. Последнее обстоятельство объяснено с точки зрения устойчивости и неустойчивости движения каналированных частиц.

Результаты моделирования носят приближенный характер в виду выбора потенциалов изолированных атомов в наиболее простой аппроксимации кулоновского экранированного потенциала. Тем не менее, в итоге при фиксированном значении зарядового состояния налетающего иона Q получено качественное согласие с экспериментом. Более точные результаты могут быть получены при учете изменения зарядового состояния Q в зависимости от энергии иона.

Исходя из уравнений Шредингера и Дирака, получены выражения для потенциальной энергии взаимодействия налетающего водородоподобного иона с непрерывным потенциалом плоскостного канала кристалла, учитывающие состояния электрона иона. На основе полученных выражений с помощью программы PST возможно произвести моделирование траекторий быстрых водородоподобных ионов в плоскостном канале кристалла. Зная решение уравнений Шредингера и Дирака вдоль траектории, можно определить вероятность возбуждения на переходе орбитального электрона из одного состояния в другое и, как следствие, долю ионов Ar^{17+} , сохранивших зарядовое состояние.

Произведено моделирование движения электронов и позитронов с энергией 855 МэВ в (110) плоскостном канале кристалла кремния. Результаты позволили определить длину деканалирования электрона. Влияние квантовых флуктуаций на процесс деканалирования позитронов приводит к парадоксальному результату, а именно: деканалирование практически полностью подавлено. Причиной этого является интенсивное реканалирование позитронов в (110) плоскостном канале кристалла в пределах критического угла каналирования.