

ПРИЛОЖЕНИЕ 1

Уравнения движения теории осевого каналирования

Рассмотрим движение частицы в осевом канале. Как и в случае плоскостного каналирования нелинейное стохастическое уравнение движения имеет вид классического уравнения движения

$$m \frac{d^2 \vec{r}_\perp}{dt^2} = \vec{F}_\perp,$$

где $\vec{r}_\perp = \vec{i}x + \vec{j}y$ — поперечная координата; $\vec{F}_\perp = \vec{i}F_x + \vec{j}F_y$ — поперечная сила, $\vec{F}_\perp = -\text{grad}U$, $U_x = \frac{\partial U}{\partial x}$, $U = U(x, y)$ — потенциальная энергия каналированной частицы. Перепишем это уравнение в проекциях на оси OX и OY :

$$\begin{cases} m \frac{d^2 x}{dt^2} = F_x, \\ m \frac{d^2 y}{dt^2} = F_y. \end{cases}$$

Решение системы уравнений будем искать в виде:

$$x = \bar{x} + \delta x, \quad y = \bar{y} + \delta y.$$

Потенциальную энергию взаимодействия, представленную в виде

$$U = \bar{U} + \delta U,$$

разложим в ряд по степеням δx , δy в окрестностях регулярной траектории, учитывая только линейные по δx и δy члены

$$\bar{U} = \bar{U}(x, y) = \bar{U}(\bar{x} + \delta x, \bar{y} + \delta y) \approx \bar{U}(\bar{x}, \bar{y}) + \bar{U}_x(\bar{x}, \bar{y})\delta x + \bar{U}_y(\bar{x}, \bar{y})\delta y,$$

$$\delta U = \delta U(x, y) = \delta U(\bar{x} + \delta x, \bar{y} + \delta y) \approx \delta U(\bar{x}, \bar{y}).$$

Теперь проекции силы могут быть записаны в следующем виде:

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

$$F_y = -\bar{U}_y(\bar{x}, \bar{y}) - \bar{U}_{xy}(\bar{x}, \bar{y})\delta x - \bar{U}_{yy}(\bar{x}, \bar{y})\delta y - \delta U_y(\bar{x}, \bar{y}),$$

где $\delta F_x = -\delta U_x(\bar{x}, \bar{y})$, $\delta F_y = -\delta U_y(\bar{x}, \bar{y})$ — флуктуации проекций силы.

С учетом выше сказанного, рассматриваемая система уравнений движения переписывается в виде

$$\begin{cases} m(\ddot{\bar{x}} + \delta\ddot{x}) = -\bar{U}_x(\bar{x}, \bar{y}) - \bar{U}_{xx}(\bar{x}, \bar{y})\delta x - \bar{U}_{xy}(\bar{x}, \bar{y})\delta y - \delta U_x(\bar{x}, \bar{y}), \\ m(\ddot{\bar{y}} + \delta\ddot{y}) = -\bar{U}_y(\bar{x}, \bar{y}) - \bar{U}_{xy}(\bar{x}, \bar{y})\delta x - \bar{U}_{yy}(\bar{x}, \bar{y})\delta y - \delta U_y(\bar{x}, \bar{y}). \end{cases}$$

Из данной системы можно выделить два уравнения, описывающие движение по регулярной траектории (члены нулевого порядка малости) и два уравнения, описывающие движение по хаотической траектории (члены первого порядка малости):

$$\begin{cases} m\ddot{\bar{x}} = -\bar{U}_x(\bar{x}, \bar{y}), \\ m\ddot{\bar{y}} = -\bar{U}_y(\bar{x}, \bar{y}), \end{cases}$$

$$\begin{cases} m\delta\ddot{x} + \bar{U}_{xx}(\bar{x}, \bar{y})\delta x + \bar{U}_{xy}(\bar{x}, \bar{y})\delta y = \delta F_x(\bar{x}, \bar{y}), \\ m\delta\ddot{y} + \bar{U}_{xy}(\bar{x}, \bar{y})\delta x + \bar{U}_{yy}(\bar{x}, \bar{y})\delta y = \delta F_y(\bar{x}, \bar{y}). \end{cases}$$

С помощью последней системы линеаризованных стохастических уравнений движения составим систему уравнений для средних квадратов флуктуаций динамических величин:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \overline{\delta x^2} &= 2\overline{\delta x \delta \dot{x}}, \\ \frac{d}{dt} \overline{\delta x \delta \dot{x}} &= \overline{\delta \dot{x}^2} + \overline{\delta x \delta \ddot{x}} = \overline{\delta \dot{x}^2} + \frac{1}{m} \left(\overline{\delta F_x \delta x} - \bar{U}_{xx} \overline{\delta x^2} - \bar{U}_{xy} \overline{\delta x \delta y} \right), \\ \frac{d}{dt} \overline{\delta x^2} &= 2\overline{\delta \dot{x} \delta \dot{x}} = \frac{2}{m} \left(\overline{\delta F_x \delta \dot{x}} - \bar{U}_{xx} \overline{\delta x \delta \dot{x}} - \bar{U}_{xy} \overline{\delta \dot{x} \delta y} \right), \\ \frac{d}{dt} \overline{\delta x \delta y} &= \overline{\delta \dot{x} \delta y} + \overline{\delta x \delta \dot{y}}, \\ \frac{d}{dt} \overline{\delta x \delta y} &= \overline{\delta \dot{x} \delta y} + \overline{\delta x \delta \dot{y}} = \frac{1}{m} \left(\overline{\delta F_x \delta y} - \bar{U}_{xx} \overline{\delta x \delta y} - \bar{U}_{xy} \overline{\delta y^2} \right) + \overline{\delta \dot{x} \delta \dot{y}}, \\ \frac{d}{dt} \overline{\delta x \delta \dot{y}} &= \overline{\delta \dot{x} \delta \dot{y}} + \overline{\delta x \delta \ddot{y}} = \frac{1}{m} \left(\overline{\delta F_y \delta x} - \bar{U}_{yy} \overline{\delta x \delta y} - \bar{U}_{xy} \overline{\delta x^2} \right) + \overline{\delta \dot{x} \delta \dot{y}}, \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\frac{d}{dt} \overline{\delta \dot{x} \delta \dot{y}} &= \overline{\delta \dot{x} \delta \dot{y}} + \overline{\delta \dot{x} \delta \ddot{y}} = \\ &= \frac{1}{m} \left(\overline{\delta F_x \delta \dot{y}} - \overline{U_{xx}} \overline{\delta x \delta \dot{y}} - \overline{U_{xy}} \overline{\delta y \delta \dot{y}} \right) + \frac{1}{m} \left(\overline{\delta F_y \delta \dot{x}} - \overline{U_{yy}} \overline{\delta \dot{x} \delta \dot{y}} - \overline{U_{xy}} \overline{\delta x \delta \dot{x}} \right),\end{aligned}$$

$$\frac{d}{dt} \overline{\delta \dot{y}^2} = 2 \overline{\delta \dot{y} \delta \ddot{y}},$$

$$\frac{d}{dt} \overline{\delta y \delta \dot{y}} = \overline{\delta \dot{y}^2} + \overline{\delta y \delta \ddot{y}} = \overline{\delta \dot{y}^2} + \frac{1}{m} \left(\overline{\delta F_y \delta \dot{y}} - \overline{U_{yy}} \overline{\delta \dot{y}^2} - \overline{U_{xy}} \overline{\delta x \delta \dot{y}} \right),$$

$$\frac{d}{dt} \overline{\delta \dot{y}^2} = 2 \overline{\delta \dot{y} \delta \ddot{y}} = \frac{2}{m} \left(\overline{\delta F_y \delta \dot{y}} - \overline{U_{yy}} \overline{\delta \dot{y} \delta \dot{y}} - \overline{U_{xy}} \overline{\delta x \delta \dot{y}} \right).$$

Корреляции флуктуаций силы и поперечной координаты, флуктуаций силы и скорости определим, решив систему уравнений

$$\begin{cases} m \delta \ddot{x} + \overline{U_{xx}}(\bar{x}, \bar{y}) \delta x + \overline{U_{xy}}(\bar{x}, \bar{y}) \delta y = \delta F_x(\bar{x}, \bar{y}), \\ m \delta \ddot{y} + \overline{U_{yy}}(\bar{x}, \bar{y}) \delta y + \overline{U_{xy}}(\bar{x}, \bar{y}) \delta x = \delta F_y(\bar{x}, \bar{y}). \end{cases}$$

Введем обозначения

$$\delta x = x_1, \quad \delta \dot{x} = x_2, \quad \delta y = x_3, \quad \delta \dot{y} = x_4, \quad \delta F_x(\bar{x}, \bar{y}) = f_x(\bar{x}, \bar{y}), \quad \delta F_y(\bar{x}, \bar{y}) = f_y(\bar{x}, \bar{y}).$$

Теперь система уравнений переписывается в виде

$$\begin{cases} \ddot{x}_1 + \frac{\overline{U_{xx}}(\bar{x}, \bar{y})}{m} x_1 + \frac{\overline{U_{xy}}(\bar{x}, \bar{y})}{m} x_3 = \frac{f_x(\bar{x}, \bar{y})}{m}, \\ \ddot{x}_3 + \frac{\overline{U_{yy}}(\bar{x}, \bar{y})}{m} x_3 + \frac{\overline{U_{xy}}(\bar{x}, \bar{y})}{m} x_1 = \frac{f_y(\bar{x}, \bar{y})}{m}. \end{cases}$$

Решение полученной системы найдем с помощью метода вариации произвольных постоянных. Для этого рассмотрим соответствующую однородную систему

$$\begin{cases} \ddot{x}_1 + \frac{\overline{U_{xx}}(\bar{x}, \bar{y})}{m} x_1 + \frac{\overline{U_{xy}}(\bar{x}, \bar{y})}{m} x_3 = 0, \\ \ddot{x}_3 + \frac{\overline{U_{yy}}(\bar{x}, \bar{y})}{m} x_3 + \frac{\overline{U_{xy}}(\bar{x}, \bar{y})}{m} x_1 = 0. \end{cases}$$

Решение однородной системы уравнений запишем в виде:

$$x_1 = c_1 x_{11} + c_2 x_{12} + c_3 x_{13} + c_4 x_{14},$$

$$x_2 = c_1 x_{21} + c_2 x_{22} + c_3 x_{23} + c_4 x_{24},$$

$$x_3 = c_1 x_{31} + c_2 x_{32} + c_3 x_{33} + c_4 x_{34},$$

$$x_4 = c_1 x_{41} + c_2 x_{42} + c_3 x_{43} + c_4 x_{44}.$$

Следует отметить, что коэффициенты $\frac{\overline{U}_{xx}(\bar{x}, \bar{y})}{m}$, $\frac{\overline{U}_{yy}(\bar{x}, \bar{y})}{m}$ и $\frac{\overline{U}_{xy}(\bar{x}, \bar{y})}{m}$, стоящие перед неизвестными в однородной системе уравнений, в решении этой системы содержатся в неизвестных произвольных постоянных c_i , $i = 1, \dots, 4$.

Для решения неоднородной системы уравнений положим, что коэффициенты c_i зависят от времени:

$$c_i = c_i(t).$$

Согласно применяемому методу, получим следующую систему уравнений на неизвестные коэффициенты c_i :

$$\begin{cases} \dot{c}_1(t)x_{11} + \dot{c}_2(t)x_{12} + \dot{c}_3(t)x_{13} + \dot{c}_4(t)x_{14} = 0, \\ \dot{c}_1(t)\dot{x}_{11} + \dot{c}_2(t)\dot{x}_{12} + \dot{c}_3(t)\dot{x}_{13} + \dot{c}_4(t)\dot{x}_{14} = \frac{f_x(\bar{x}, \bar{y})}{m}, \\ \dot{c}_1(t)x_{31} + \dot{c}_2(t)x_{32} + \dot{c}_3(t)x_{33} + \dot{c}_4(t)x_{34} = 0, \\ \dot{c}_1(t)\dot{x}_{31} + \dot{c}_2(t)\dot{x}_{32} + \dot{c}_3(t)\dot{x}_{33} + \dot{c}_4(t)\dot{x}_{34} = \frac{f_y(\bar{x}, \bar{y})}{m}. \end{cases}$$

Из введенных обозначений видно, что $x_2 = \dot{x}_1$, $x_4 = \dot{x}_3$, таким образом получим:

$$\begin{cases} \dot{c}_1(t)x_{11} + \dot{c}_2(t)x_{12} + \dot{c}_3(t)x_{13} + \dot{c}_4(t)x_{14} = 0, \\ \dot{c}_1(t)x_{21} + \dot{c}_2(t)x_{22} + \dot{c}_3(t)x_{23} + \dot{c}_4(t)x_{24} = \frac{f_x(\bar{x}, \bar{y})}{m}, \\ \dot{c}_1(t)x_{31} + \dot{c}_2(t)x_{32} + \dot{c}_3(t)x_{33} + \dot{c}_4(t)x_{34} = 0, \\ \dot{c}_1(t)x_{41} + \dot{c}_2(t)x_{42} + \dot{c}_3(t)x_{43} + \dot{c}_4(t)x_{44} = \frac{f_y(\bar{x}, \bar{y})}{m}. \end{cases}$$

Последнюю систему уравнений решим с помощью метода Крамера

$$\dot{c}_i(t) = \frac{\Delta^{(i)}}{\Delta},$$

где Δ — определитель рассматриваемой системы, $\Delta^{(i)}$ — определитель, полученный из определителя Δ заменой его i -го столбца столбцом свободных членов. В нашем случае

$$\Delta = \begin{vmatrix} x_{11} & x_{12} & x_{13} & x_{14} \\ x_{21} & x_{22} & x_{23} & x_{24} \\ x_{31} & x_{32} & x_{33} & x_{34} \\ x_{41} & x_{42} & x_{43} & x_{44} \end{vmatrix}.$$

$\Delta^{(i)}$ запишем, например, для $i = 1$:

$$\Delta^1 = \begin{vmatrix} 0 & x_{12} & x_{13} & x_{14} \\ f_x(\bar{x}, \bar{y})/m & x_{22} & x_{23} & x_{24} \\ 0 & x_{32} & x_{33} & x_{34} \\ f_y(\bar{x}, \bar{y})/m & x_{42} & x_{43} & x_{44} \end{vmatrix}.$$

Несложно видеть, что

$$\Delta^{(i)} = \frac{f_x(\bar{x}, \bar{y})}{m} A_{2i} + \frac{f_y(\bar{x}, \bar{y})}{m} A_{4i},$$

где $A_{ij} = (-1)^{i+j} \overline{M_j^i}$ — алгебраическое дополнение, составленное из элементов определителя Δ . Теперь производные от неизвестных коэффициентов \dot{c}_i запишутся в виде:

$$\dot{c}_i(t) = \frac{f_x(\bar{x}, \bar{y}) A_{2i} + f_y(\bar{x}, \bar{y}) A_{4i}}{m \Delta},$$

а сами коэффициенты —

$$c_i(t) = \int_0^t dt' \frac{f_x(\bar{x}(t'), \bar{y}(t')) A_{2i} + f_y(\bar{x}(t'), \bar{y}(t')) A_{4i}}{m \Delta(t')}.$$

С учетом выше изложенного, решение рассматриваемой системы уравнений запишется в виде:

$$x_s(t) = \int_0^t \frac{dt'}{m \Delta(t')} \left(f_x(\bar{x}(t'), \bar{y}(t')) \sum_i A_{2i}(t') x_{si}(t') + \right. \\ \left. + f_y(\bar{x}(t'), \bar{y}(t')) \sum_i A_{4i}(t') x_{si}(t') \right),$$

$s = 1, 2, 3, 4$.

Итак, корреляции флуктуаций силы и поперечной координаты, флуктуаций силы и скорости имеют вид:

$$\overline{f_k t x_s t} = \int_0^t \frac{dt'}{m\Delta} \left(\overline{f_x \bar{x}, \bar{y} f_k \bar{x} t', \bar{y} t'} \sum_i A_{2i} t' x_{si} t' + \right. \\ \left. + \overline{f_y \bar{x}, \bar{y} f_k \bar{x} t', \bar{y} t'} \sum_i A_{4i} t' x_{si} t' \right),$$

где $k = x, y$. С помощью коррелятора, составленного из флуктуаций поперечной силы, действующей на быструю заряженную частицу в разные моменты времени, могут быть вычислены компоненты коэффициента диффузии

$$\overline{f_x t f_k t'} = D_{xk} \bar{x}, \bar{y} \delta t - t', \quad \overline{f_y t f_k t'} = D_{yk} \bar{x}, \bar{y} \delta t - t',$$

где $\delta(t - t')$ — дельта-функция Дирака. Принимая во внимание введенный коэффициент диффузии, перепишем коррелятор $\overline{f_k t x_s t}$:

$$\overline{f_k t x_s t} = \int_0^t \frac{dt'}{m\Delta} \delta t - t' \left(D_{xk} \bar{x}, \bar{y} \sum_i A_{2i} t' x_{si} t' + D_{yk} \bar{x}, \bar{y} \sum_i A_{4i} t' x_{si} t' \right).$$

В интервал $(0, t)$ входит только половина дельта-функция, поэтому после интегрирования по dt' появится коэффициент $\frac{1}{2}$:

$$\overline{f_k t x_s t} = \frac{1}{2m\Delta} \left(D_{xk} \bar{x}, \bar{y} \sum_i A_{2i} t x_{si} t + D_{yk} \bar{x}, \bar{y} \sum_i A_{4i} t x_{si} t \right).$$

Суммы $\sum_i A_{2i}(t)x_{1i}(t)$, $\sum_i A_{2i}(t)x_{3i}(t)$, $\sum_i A_{4i}(t)x_{1i}(t)$ и $\sum_i A_{4i}(t)x_{3i}(t)$ равны нулю. Это следует из теоремы аннулирования: сумма произведений элементов какой-либо строки (столбца) определителя на алгебраические дополнения соответствующих элементов другой строки (столбца) равна нулю. Видно что

$$\sum_i A_{2i} x_{2i} = \Delta, \quad \sum_i A_{2i} x_{4i} = \Delta,$$

$$\sum_i A_{4i} x_{2i} = \Delta, \quad \sum_i A_{4i} x_{4i} = \Delta.$$

Таким образом, корреляции флуктуаций силы и поперечной координаты ($s = 1, 3$) равны нулю

$$\overline{f_k t x_1 t} = 0, \overline{f_k t x_3 t} = 0,$$

корреляции флуктуаций силы и поперечной скорости ($s = 2, 4$) —

$$\overline{f_k t x_2 t} = \frac{D_{xk}}{2m}, \overline{f_k t x_4 t} = \frac{D_{yk}}{2m}.$$

С учетом вводимых обозначений окончательно запишем:

$$\overline{\delta F_k t \delta x} = 0, \overline{\delta F_k t \delta \dot{x}} = \frac{D_{xk}}{2m}, \overline{\delta F_k t \delta y} = 0, \overline{\delta F_k t \delta \dot{y}} = \frac{D_{yk}}{2m}, \text{ где } k = (x, y).$$

Совместное интегрирование классических уравнений движения

$$\begin{cases} m\ddot{x} = -\bar{U}_x(\bar{x}, \bar{y}), \\ m\ddot{y} = -\bar{U}_y(\bar{x}, \bar{y}) \end{cases}$$

и уравнений для средних квадратов флуктуаций динамических величин

$$\frac{d}{dt} \overline{\delta x^2} = 2\overline{\delta x \delta \dot{x}},$$

$$\frac{d}{dt} \overline{\delta x \delta \dot{x}} = \overline{\delta \dot{x}^2} - \frac{1}{m} \left(\bar{U}_{xx} \overline{\delta x^2} + \bar{U}_{xy} \overline{\delta x \delta \dot{y}} \right),$$

$$\frac{d}{dt} \overline{\delta \dot{x}^2} = \frac{2}{m} \left(\frac{D_{xx}}{2m} - \bar{U}_{xx} \overline{\delta x \delta \dot{x}} - \bar{U}_{xy} \overline{\delta \dot{x} \delta \dot{y}} \right),$$

$$\frac{d}{dt} \overline{\delta x \delta \dot{y}} = \overline{\delta \dot{x} \delta \dot{y}} + \overline{\delta x \delta \ddot{y}},$$

$$\frac{d}{dt} \overline{\delta \dot{x} \delta \dot{y}} = -\frac{1}{m} \left(\bar{U}_{xx} \overline{\delta x \delta \dot{y}} + \bar{U}_{xy} \overline{\delta \dot{y}^2} \right) + \overline{\delta \ddot{x} \delta \dot{y}},$$

$$\frac{d}{dt} \overline{\delta x \delta \ddot{y}} = -\frac{1}{m} \left(\bar{U}_{yy} \overline{\delta x \delta \dot{y}} + \bar{U}_{xy} \overline{\delta x^2} \right) + \overline{\delta \ddot{x} \delta \ddot{y}},$$

$$\frac{d}{dt} \overline{\delta \ddot{x} \delta \ddot{y}} = \frac{1}{m} \left(\frac{D_{yx}}{2m} - \bar{U}_{xx} \overline{\delta x \delta \ddot{y}} - \bar{U}_{xy} \overline{\delta \dot{y} \delta \ddot{y}} \right) + \frac{1}{m} \left(\frac{D_{xy}}{2m} - \bar{U}_{yy} \overline{\delta \dot{x} \delta \ddot{y}} - \bar{U}_{xy} \overline{\delta x \delta \ddot{x}} \right),$$

$$\frac{d}{dt} \overline{\delta y^2} = 2\overline{\delta y \delta \dot{y}},$$

$$\frac{d}{dt} \overline{\delta y \delta \dot{y}} = \overline{\delta \dot{y}^2} - \frac{1}{m} \left(\bar{U}_{yy} \overline{\delta y^2} + \bar{U}_{xy} \overline{\delta x \delta \dot{y}} \right),$$

$$\frac{d}{dt} \overline{\delta y^2} = \frac{2}{m} \left(\frac{D_{yy}}{2m} - \overline{U}_{yy} \overline{\delta y \delta y} - \overline{U}_{xy} \overline{\delta x \delta y} \right)$$

решают задачу описания процесса многократного рассеяния каналированных частиц в осевых каналах кристалла.

ПРИЛОЖЕНИЕ 2

Уравнение эволюции флуктуаций поперечной энергии канализованных частиц для случая осевого канализования

Поперечную энергию частицы в случае осевого канализования запишем в виде

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

Выделим среднее значение \bar{E}_{\perp} и флуктуацию δE_{\perp} поперечной энергии

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

$$\delta E_{\perp} = m \bar{\dot{x}} \delta \dot{x} + \bar{\dot{y}} \delta \dot{y} + \bar{U}_x(\bar{x}, \bar{y}) \delta x + \bar{U}_y(\bar{x}, \bar{y}) \delta y.$$

Скорость изменения флуктуации поперечной энергии со временем дается выражением:

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

Используя уравнения движения для случая осевого канализования, можем переписать:

$$\begin{aligned} \delta \dot{E}_{\perp} = m \left(-\frac{\bar{U}_x}{m} \delta \dot{x} + \frac{\bar{\ddot{x}}}{m} \delta F_x - \bar{U}_{xx} \delta x - \bar{U}_{xy} \delta y - \frac{\bar{U}_y}{m} \delta \dot{y} + \frac{\bar{\ddot{y}}}{m} \delta F_y - \bar{U}_{xy} \delta x - \bar{U}_{yy} \delta y \right) + \\ + \frac{d}{dt} \bar{U}_x(\bar{x}, \bar{y}) \delta x + \frac{d}{dt} \bar{U}_y(\bar{x}, \bar{y}) \delta y. \end{aligned}$$

Найдя производные сложной функции, получим следующее выражение для скорости изменения флуктуации поперечной энергии со временем:

$$\delta \dot{E}_{\perp} = \bar{\ddot{x}} \delta F_x + \bar{\ddot{y}} \delta F_y.$$

Эволюция среднего квадрата флуктуаций поперечной энергии описывается уравнением

$$\frac{d(\overline{\delta E_{\perp}})^2}{dt} = 2\overline{\delta E_{\perp}} \dot{\overline{\delta E_{\perp}}}$$

или же

$$\begin{aligned} \frac{d \overline{\delta E_{\perp}}^2}{dt} = & 2m\overline{\dot{x}}^2 \overline{\delta F_x \delta \dot{x}} + 2m\overline{\dot{x}\dot{y}} \overline{\delta F_x \delta \dot{y}} + 2\overline{U_x} \overline{\dot{x} \delta F_x \delta x} + 2\overline{U_y} \overline{\dot{x} \delta F_x \delta y} + \\ & + 2m\overline{\dot{x}\dot{y}} \overline{\delta F_y \delta \dot{x}} + 2m\overline{\dot{y}}^2 \overline{\delta F_y \delta \dot{y}} + 2\overline{U_x} \overline{\dot{y} \delta F_y \delta x} + 2\overline{U_y} \overline{\dot{y} \delta F_y \delta y}. \end{aligned}$$

Перепишем последнее выражение, принимая во внимание выражения для корреляций флуктуаций силы и координаты и флуктуаций силы и скорости (см. приложение 1):

$$\frac{d(\overline{\delta E_{\perp}})^2}{dt} = \overline{\dot{x}}^2 D_{xx} + \overline{\dot{y}}^2 D_{yy} + \overline{\dot{x}\dot{y}} (D_{xy} + D_{yx}).$$

Совместное интегрирование классических уравнений движения

$$\begin{cases} m\ddot{x} = -\overline{U_x} \overline{x}, \overline{y} , \\ m\ddot{y} = -\overline{U_y} \overline{x}, \overline{y} , \end{cases}$$

и уравнения

$$\frac{d(\overline{\delta E_{\perp}})^2}{dt} = \overline{\dot{x}}^2 D_{xx} + \overline{\dot{y}}^2 D_{yy} + \overline{\dot{x}\dot{y}} (D_{xy} + D_{yx})$$

позволяет построить зависимость среднего квадрата флуктуации поперечной энергии как функции от глубины проникновения в кристалл, начальных значений поперечной координаты и скорости для случая осевого каналирования.

ПРИЛОЖЕНИЕ 3

Уравнение Фоккера-Планка для случая осевого каналирования

Определим коэффициенты сноса $A = A(E_{\perp}, t)$ и диффузии $B = B(E_{\perp}, t)$ уравнения Фоккера-Планка в пространстве поперечной энергии E_{\perp}

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

Определим скорость изменения поперечной энергии со временем (см. приложение 2). Получим:

$$\begin{aligned} \frac{dE_{\perp}}{dt} &= \frac{m}{2} (2\dot{x}\ddot{x} + 2\dot{y}\ddot{y}) + \bar{U}_x(x, y)\dot{x} + \bar{U}_y(x, y)\dot{y} = \\ &= \dot{x}(m\ddot{x} + \bar{U}_x(x, y)) + \dot{y}(m\ddot{y} + \bar{U}_y(x, y)) = \\ &= \dot{x}\delta F_x + \dot{y}\delta F_y. \end{aligned}$$

Вдоль классических траекторий будет выполняться соотношение

$$\frac{dE_{\perp}}{dt} = \bar{\dot{x}}\delta F_x + \bar{\dot{y}}\delta F_y,$$

где \bar{x} , \bar{y} — решения уравнений Ньютона в отсутствии флуктуаций

$$\begin{cases} m\bar{\ddot{x}} = -\bar{U}_x(\bar{x}, \bar{y}) \\ m\bar{\ddot{y}} = -\bar{U}_y(\bar{x}, \bar{y}) \end{cases}.$$

Отсюда следует, что изменение поперечной энергии имеет вид:

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

Теперь коэффициент сноса A перепишется в виде:

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

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

$$A = 0.$$

Определим диффузионный коэффициент B

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

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

где $D_{ij}(t', t'') \delta(t' - t'') = \overline{\delta F_i(t') \delta F_j(t'')}$, $i, j = x, y$ — компоненты диффузионной матрицы. В приложении 4 показано, что

$$D_{xx} \ x, y = D_{yy} \ x, y = D \ x, y,$$

$$D_{xy} \ x, y = D_{yx} \ x, y = 0.$$

Теперь диффузионный коэффициент запишем как

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

или же окончательно

$$B = D(x, y) \left(\overline{\dot{x}(t)^2} + \overline{\dot{y}(t)^2} \right).$$

Определив коэффициенты сноса и диффузии, уравнение Фоккера-Планка в случае осевого каналирования примет вид уравнения диффузии

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

Решением уравнения диффузии является функция распределения Гаусса

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

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

$$\frac{d \overline{\delta E_{\perp}^2}}{dt} = D(x, y) \overline{\dot{x}^2} + \overline{\dot{y}^2},$$

$E_{\perp 0} = \frac{m v_{x0}^2}{2} + \frac{m v_{y0}^2}{2} + U(x_0, y_0)$ — поперечная энергия в момент времени t_0 ,

$E_{\perp} = \frac{m v_x^2}{2} + \frac{m v_y^2}{2} + U(x, y) = \frac{m v^2}{2} + U(x_0, y_0)$ — поперечная энергия в момент времени t .

ПРИЛОЖЕНИЕ 4

Коэффициент диффузии для случая осевого каналирования

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

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

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

Согласно процедуре приведенной в п. 1.6.1, усреднение данного выражения по независимым тепловым колебаниям атомов кристалла при $n_1 \neq n_2$ приведет к равенству нулю рассматриваемого коррелятора

$$\langle \delta U_{nucl}(\vec{r}_1) \delta U_{nucl}(\vec{r}_2) \rangle_T = 0.$$

В случае $n_1 = n_2 = n$ среднее от корреляционной функции запишется следующим образом

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

Интегрирование по $d(\delta\vec{r}_n)$ приведет к следующему результату:

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

Бесконечная сумма в последнем выражении является дельта-функцией Дирака:

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

В свою очередь дельта-функция снимет интегрирование по dg_z . Далее, так же как и в п. 1.6.1, заменим регулярное расположение атомов на хаотическое, устремив σ_z к бесконечности, применим условие малоуглового рассеяния каналированных частиц, положим $\sigma_x = \sigma_y = \sigma$ и вычислим интеграл по dq_z , учитывая, что $z = vt$. Получим:

$$\begin{aligned} \langle \delta U_{nucl}(\vec{r}_1) \delta U_{nucl}(\vec{r}_2) \rangle_T = \int \frac{dg_x dg_y}{(2\pi)^3} \int \frac{dq_x dq_y}{(2\pi)^3} \frac{(4\pi Z_1 Z_2 e^2)^2}{(g_x^2 + g_y^2)^2 (q_x^2 + q_y^2)^2} \frac{2\pi}{a_z} \frac{2\pi}{v} \delta(t_1 - t_2) \times \\ \times \exp(i(g_x x_1 - q_x x_2) + i(g_y y_1 - q_y y_2)) \exp\left(-\frac{(g_x - q_x)^2 \sigma^2}{2} - \frac{(g_y - q_y)^2 \sigma^2}{2}\right). \end{aligned}$$

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

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

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

Усреднение данной корреляционной функции по квадрату модуля волновой функций атома кристалла приведет к результату, полученному в п. 1.6.2.

В результате усреднения $\langle \delta U_{el}(\vec{r}_1) \delta U_{el}(\vec{r}_2) \rangle_e$ по независимым тепловым колебаниям атома кристалла при $n_1 \neq n_2$, $j_1 \neq j_2$ получим:

$$\langle \delta U_{el}(\vec{r}_1) \delta U_{el}(\vec{r}_2) \rangle_{e,T} = 0.$$

В случае $n_1 = n_2 = n$, $j_1 = j_2 = j$ процедура усреднения по независимым тепловым колебаниям атома кристалла приведет к следующему результату:

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

Как и в предыдущем пункте, заменим бесконечную сумму дельта-функцией Дирака, проинтегрируем по dg_z , устремим 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:

$$\begin{aligned} \langle \delta U_{el}(\vec{r}_1) \delta U_{el}(\vec{r}_2) \rangle_{e,T} = & \int \frac{dg_x dg_y}{2\pi^3} \int \frac{dq_x dq_y}{2\pi^3} \frac{4\pi Z_1 e^2}{g_x^2 + g_y^2} \frac{2\pi}{q_x^2 + q_y^2} \frac{2\pi}{a_z} \frac{2\pi}{v} \delta t_1 - t_2 \times \\ & \times \exp i g_x x_1 - q_x x_2 + i g_y y_1 - q_y y_2 F |\vec{g} - \vec{q}| \exp \left(-\frac{g_x - q_x}{2} \sigma^2 - \frac{g_y - q_y}{2} \sigma^2 \right), \end{aligned}$$

где $F(|\vec{g} - \vec{q}|) = F\left(\sqrt{(g_x - q_x)^2 + (g_y - q_y)^2}\right)$.

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

Определим $D_{xx}^{nucl}(x, y)$. Используя (1.6.4) запишем:

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

Возьмем производные $\frac{\partial}{\partial x_1}$ и $\frac{\partial}{\partial x_2}$ и проинтегрируем по dt_2 получим:

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

Усредним полученное выражение для $D_{xx}^{nucl}(x, y)$ по x

$$\langle D_{xx}^{nucl}(x, y) \rangle_x = \int dx D_{xx}^{nucl}(x, y) = \int \frac{dg_x dg_y}{(2\pi)^3} \int dq_x dq_y \frac{(4\pi Z_1 Z_2 e^2)^2}{(g_x^2 + g_y^2)^2 (q_x^2 + q_y^2)^2} \frac{g_x q_x}{a_z v} \times \\ \times \delta(g_x - q_x) \exp(iy(g_y - q_y)) \exp\left(-\frac{(g_x - q_x)^2 \sigma^2}{2} - \frac{(g_y - q_y)^2 \sigma^2}{2}\right).$$

Проинтегрируем по dq_x

$$\langle D_{xx}^{nucl}(x, y) \rangle_x = \int \frac{dg_x dg_y}{(2\pi)^3} \int dq_y \frac{(4\pi Z_1 Z_2 e^2)^2}{(g_x^2 + g_y^2)^2 (g_x^2 + q_y^2)^2} \frac{g_x^2}{a_z v} \times \\ \times \exp(iy(g_y - q_y)) \exp\left(-\frac{(g_y - q_y)^2 \sigma^2}{2}\right).$$

Теперь вычислим интеграл по dg_x , перейдем к переменным Вигнера, введем ядерный кулоновский логарифм и вычислим интеграл по dq . В результате этого получим компоненту коэффициента диффузии в направлении x усредненную по x , зависящую только от координаты y :

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

Аналогично вычисляется компонента коэффициента диффузии в направлении x усредненная по y , зависящая только от координаты x :

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

Предположим, что коэффициент диффузии в направлении оси x , зависящий и от переменной x и от переменной y $D_{xx}^{nucl} x, y$ имеет такой вид,

что при интегрировании по $\frac{dx}{a_x}$ получим $\left\langle D_{xx}^{nucl} x, y \right\rangle_x$, а при интегрировании

по $\frac{dy}{a_y}$ получим $\left\langle D_{xx}^{nucl} x, y \right\rangle_y$. Другими словами, после интегрирования

коэффициента диффузии для случая осевого каналирования, должны получить коэффициент диффузии для случая плоскостного каналирования.

Нетрудно видеть, что эта функция запишется в виде:

$$D_{xx}^{nucl}(x, y) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} \exp\left(-\frac{x^2}{2\sigma^2}\right) \left\langle D_{xx}^{nucl}(x, y) \right\rangle_x$$

или

$$D_{xx}^{nucl}(x, y) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} \exp\left(-\frac{y^2}{2\sigma^2}\right) \left\langle D_{xx}^{nucl}(x, y) \right\rangle_y.$$

Таким образом, окончательно получим:

$$D_{xx}^{nucl}(x, y) = \frac{(Z_1 Z_2 e^2)^2}{a_z \nu \sigma^2} \exp\left(-\frac{x^2 + y^2}{2\sigma^2}\right) L_n.$$

Определим $D_{xx}^{el}(x, y)$. Используя (1.6.4) запишем:

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

где $F(|\vec{g} - \vec{q}|) = \int dx dy \frac{\rho(x, y)}{a_z} \exp i(g_x - q_x)x + i(g_y - q_y)y$.

Возьмем производные и проинтегрируем по времени. Усредним выражение для $D_{xx}^{el}(x, y)$ по x , проинтегрируем по dq_x и dg_x . После этого получим

$$\langle D_{xx}^{el}(x, y) \rangle_x = \int \frac{dg_y}{(2\pi)^3} \int dq_y \frac{(4\pi Z_1 e^2)^2}{g_y + q_y} \frac{\pi}{a_z v} \exp(iy(g_y - q_y)) \times \\ \times F(|\vec{g} - \vec{q}|) \exp\left(-\frac{(g_y - q_y)^2 \sigma^2}{2}\right),$$

где $F(|\vec{g} - \vec{q}|) = F(g_y, q_y)$ или $F(g_y, q_y) = \int dy \frac{\rho(y)}{a_x a_z} \exp i(g_y - q_y)y$.

Перейдем к переменным Вигнера:

$$\langle D_{xx}^{el}(x, y) \rangle_x = \int \frac{dQ}{Q} \int dq \frac{(Z_1 e^2)^2}{a_z v} \exp(iyq) F(q) \exp\left(-\frac{q^2 \sigma^2}{2}\right),$$

где $F(q) = \int dy \frac{\rho(y)}{a_x a_z} \exp(iqy)$. Введем электронный кулоновский логарифм.

Вычислим интеграл $\int dq F(q) \exp(iyq) \exp\left(-\frac{q^2 \sigma^2}{2}\right)$, так же как и в п.1.6.3. С

учетом выше сказанного, операция усреднения приведет к следующему выражению:

$$\langle D_{xx}^{el}(x, y) \rangle_x = \frac{2\pi a_x (Z_1 e^2)^2}{v} \langle \rho(y) \rangle_T L_e.$$

Не трудно видеть, что

$$\langle D_{xx}^{el}(x, y) \rangle_y = \frac{2\pi a_y (Z_1 e^2)^2}{\nu} \langle \rho(x) \rangle_T L_e.$$

Предположим, что электронный коэффициент диффузии в направлении оси x , зависящий и от переменной x и от переменной y $D_{xx}^{el}(x, y)$, имеет такой же вид, как и $\langle D_{xx}^{el}(x, y) \rangle_x$ или $\langle D_{xx}^{el}(x, y) \rangle_y$, но электронная плотность является функцией координат x и y . В этом случае при интегрировании $D_{xx}^{el}(x, y)$ по $\frac{dx}{a_x}$ получим $\langle D_{xx}^{el}(x, y) \rangle_x$, а при интегрировании $D_{xx}^{el}(x, y)$ по $\frac{dy}{a_y}$ получим $\langle D_{xx}^{el}(x, y) \rangle_y$. Нетрудно видеть, что эта функция запишется в виде:

$$D_{xx}^{el}(x, y) = \frac{2\pi (Z_1 e^2)^2}{\nu} \langle \rho(x, y) \rangle_T L_e.$$

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

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

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

\vec{g} — вектор обратной решетки, $g_x = \frac{2\pi n_x}{a_x}$, $g_y = \frac{2\pi n_y}{a_y}$, n_x , n_y — целые числа,

a_x , a_y — периоды кристаллической решетки в направлении осей OX , OY ;

x_i , y_i — координаты атомов элементарной ячейки кристалла.

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

$$D_{xx}(x, y) = \frac{(Z_1 Z_2 e^2)^2}{a_z \nu \sigma^2} \exp\left(-\frac{x^2 + y^2}{2\sigma^2}\right) L_n + \frac{2\pi (Z_1 e^2)^2}{\nu} \langle \rho(x, y) \rangle_T L_e.$$

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

Определим компоненту $D_{xy}^{nucl}(x, y)$ коэффициента диффузии. С учетом (1.6.4) имеем:

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

Усредним полученное выражение для $D_{xy}^{nucl}(x, y)$ по x :

$$\langle D_{xy}^{nucl}(x, y) \rangle_x = \int dx D_{xy}^{nucl}(x, y) = - \int \frac{dg_x dg_y}{(2\pi)^3} \int dq_x dq_y \frac{(4\pi Z_1 Z_2 e^2)^2}{(g_x^2 + g_y^2)^2 (q_x^2 + q_y^2)^2} \frac{g_x q_y}{a_z v} \times \\ \times \delta(g_x - q_x) \exp\left(iy(g_y - q_y)\right) \exp\left(-\frac{(g_x - q_x)^2 \sigma^2}{2} - \frac{(g_y - q_y)^2 \sigma^2}{2}\right).$$

Проинтегрируем по dq_x . Интеграл по dg_x равен нулю. Таким образом,

$$\langle D_{xy}^{nucl}(x, y) \rangle_x = 0.$$

Несложно видеть, что и

$$\langle D_{xy}^{nucl}(x, y) \rangle_y = 0.$$

Следовательно,

$$D_{xy}^{nucl}(x, y) = 0.$$

Определим компоненту $D_{xy}^{el}(x, y)$ коэффициента диффузии. С учетом (1.6.4) имеем:

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

где $F(|\vec{g} - \vec{q}|) = F(\sqrt{(g_x - q_x)^2 + (g_y - q_y)^2})$.

Возьмем производные $\frac{\partial}{\partial x_1}$, $\frac{\partial}{\partial y_1}$, проинтегрируем по dt_2 , усредним полученное выражение для $D_{xy}^{el}(x, y)$ по x и проинтегрируем по dq_x , получим:

$$\begin{aligned} \langle D_{xy}^{el}(x, y) \rangle_x = & \int \frac{dg_x dg_y}{(2\pi)^3} \int \frac{dq_y}{(2\pi)^3} \frac{(4\pi Z_1 e^2)^2}{(g_x^2 + g_y^2)(g_x^2 + q_y^2)} \frac{(2\pi)^3}{a_z \nu} g_x g_y \times \\ & \times \exp(iy(g_y - q_y)) F(|\vec{g} - \vec{q}|) \exp\left(-\frac{(g_y - q_y)^2 \sigma^2}{2}\right), \end{aligned}$$

причем $F(|\vec{g} - \vec{q}|) = F(g_y, q_y)$. Интеграл $\int_{-\infty}^{\infty} dg_x \frac{g_x}{(g_x^2 + g_y^2)(g_x^2 + g_y^2)}$ равен нулю,

поэтому

$$\langle D_{xy}^{el}(x, y) \rangle_x = 0.$$

Видно, что

$$\langle D_{xy}^{el}(x, y) \rangle_y = 0.$$

Следовательно,

$$D_{xy}^{el}(x, y) = 0.$$

Итак, компонента $D_{xy}(x, y)$ коэффициента диффузии равна нулю

$$D_{xy}(x, y) = 0.$$

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

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

$$D_{yx}^{nucl}(x, y) = 0,$$

$$D_{yx}^{el}(x, y) = 0.$$

Компонента $D_{yx}(x, y)$ коэффициента диффузии равна нулю

$$D_{yx}(x, y) = 0.$$

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

Аналогично выше приведенной процедуре определим компоненту $D_{yy}^{nucl}(x, y)$ коэффициента диффузии. Учитывая (1.6.4) имеем:

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

Усредним выражение для $D_{yy}^{nucl}(x, y)$ по x , проинтегрируем по dq_x и dg_x , перейдем к переменным Вигнера, введем ядерный кулоновский логарифм и проинтегрируем по dq . После проделанных операций получим:

$$\langle D_{yy}^{nucl}(x, y) \rangle_x = \frac{(Z_1 Z_2 e^2)^2}{a_z v} \frac{\sqrt{2\pi}}{\sigma} \exp\left(-\frac{y^2}{2\sigma^2}\right) L_n.$$

Подобное выражение получим, если усредним $D_{yy}^{nucl}(x, y)$ по y

$$\langle D_{yy}^{nucl}(x, y) \rangle_y = \frac{(Z_1 Z_2 e^2)^2}{a_z v} \frac{\sqrt{2\pi}}{\sigma} \exp\left(-\frac{x^2}{2\sigma^2}\right) L_n.$$

Как и прежде предположим, что коэффициент диффузии в направлении оси y , зависящий и от переменной x и от переменной y запишется в виде:

$$D_{yy}^{nucl}(x, y) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} \exp\left(-\frac{x^2}{2\sigma^2}\right) \langle D_{yy}^{nucl}(x, y) \rangle_x$$

или

$$D_{yy}^{nuc l}(x, y) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} \exp\left(-\frac{y^2}{2\sigma^2}\right) \left\langle D_{yy}^{nuc l}(x, y) \right\rangle_y.$$

Таким образом, окончательно получим:

$$D_{yy}^{nuc l}(x, y) = \frac{(Z_1 Z_2 e^2)^2}{a_z \nu \sigma^2} \exp\left(-\frac{x^2 + y^2}{2\sigma^2}\right) L_n.$$

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

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

где $F(|\vec{g} - \vec{q}|) = F\left(\sqrt{(g_x - q_x)^2 + (g_y - q_y)^2}\right)$,

$$F\left(\sqrt{(g_x - q_x)^2 + (g_y - q_y)^2}\right) = \int dx dy \frac{\rho}{a_z} \exp\left(i(g_x - q_x)x + i(g_y - q_y)y\right).$$

Как и прежде, проделаем следующие операции: возьмем производные $\frac{\partial}{\partial y_1}$,

$\frac{\partial}{\partial y_2}$, проинтегрируем по dt_2 , усредним полученное выражение для $D_{yy}^{el}(x, y)$

по x , проинтегрируем по dq_x и dg_x , перейдем к переменным Вигнера, введем электронный кулоновский логарифм, вычислим интеграл по dq . В итоге получим следующее выражение для $\left\langle D_{yy}^{el}(x, y) \right\rangle_x$:

$$\left\langle D_{yy}^{el}(x, y) \right\rangle_x = \frac{2\pi a_x (Z_1 e^2)^2}{\nu} \left\langle \rho(y) \right\rangle_T L_e.$$

Выражение для $D_{yy}^{el}(x, y)$ усредненное по y имеет вид:

$$\left\langle D_{yy}^{el}(x, y) \right\rangle_y = \frac{2\pi a_y (Z_1 e^2)^2}{\nu} \left\langle \rho(y) \right\rangle_T L_e.$$

С учетом предположений, о которых говорилось в П.4.3, электронный коэффициент диффузии в направлении оси x , зависящий и от переменной x и от переменной y запишется в виде:

$$D_{yy}^{el}(x, y) = \frac{2\pi(Z_1 e^2)^2}{\nu} \langle \rho(x, y) \rangle_T L_e.$$

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

$$D_{yy}(x, y) = \frac{(Z_1 Z_2 e^2)^2}{a_z \nu \sigma^2} \exp\left(-\frac{x^2 + y^2}{2\sigma^2}\right) L_n + \frac{2\pi(Z_1 e^2)^2}{\nu} \langle \rho(x, y) \rangle_T L_e.$$

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

ПРИЛОЖЕНИЕ 5

Выражение, используемое для разложения в интеграл Фурье

Разложение в интеграл Фурье будем осуществлять с помощью формулы

$$\frac{1}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|} = 4\pi \int \frac{1}{g^2} \exp i\vec{g} \cdot \vec{r}_1 - \vec{r}_2 \frac{d^3\vec{g}}{2\pi^3},$$

которую несложно проверить. Перейдем в сферическую систему координат, в которой элемент объема переписывается в виде $d^3\vec{g} = g^2 \sin\theta d\varphi dg d\theta$, а векторное произведение — $\vec{g}(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) = |g||\vec{r}_1 - \vec{r}_2| \cos\theta$. Правая часть используемой формулы примет вид

$$4\pi \int \frac{1}{g^2} \exp i\vec{g} \cdot \vec{r}_1 - \vec{r}_2 \frac{d^3\vec{g}}{2\pi^3} = \frac{4\pi}{2\pi^3} \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^\infty dg \int_0^\pi \exp ig|\vec{r}_1 - \vec{r}_2| \cos\theta \sin\theta d\theta.$$

Возьмем внутренний интеграл, произведя замену $dt = \sin\theta d\theta$, $t = -\cos\theta$. В этом случае пределы интегрирования будут изменяться от -1 до 1

$$\begin{aligned} \int_0^\pi \exp ig|\vec{r}_1 - \vec{r}_2| \cos\theta \sin\theta d\theta &= \int_{-1}^1 \exp -ig|\vec{r}_1 - \vec{r}_2| t dt = \\ &= -\frac{\exp -ig|\vec{r}_1 - \vec{r}_2| - \exp ig|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|}{ig|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|}. \end{aligned}$$

Применив формулу Эйлера $\sin(z) = \frac{\exp(iz) - \exp(-iz)}{2i}$, искомый интеграл будет равен:

$$\int_0^\pi \exp ig|\vec{r}_1 - \vec{r}_2| \cos\theta \sin\theta d\theta = \frac{2 \sin g|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|}{g|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|}.$$

Интеграл по dg согласно [3] равен:

$$\int_0^\infty \frac{\sin g|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|}{g} dg = \frac{\pi}{2}.$$

Окончательно получим:

$$\frac{1}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|} = \frac{4\pi}{(2\pi)^3} 2\pi \frac{2}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|} \frac{\pi}{2} = \frac{1}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|},$$

что и требовалось доказать.

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

Потенциальная энергия взаимодействия налетающего атома с зарядом $Z_1 e$ с атомом кристалла с зарядом $Z_2 e$ $V_{at.-at.}(g)$ в виде разложения в интеграл Фурье имеет вид

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

Перейдем в сферическую систему координат, в которой элемент объема переписывается в виде $d^3 \vec{g} = g^2 \sin \theta dg d\theta d\varphi$, а векторное произведение — $\vec{g}\vec{r} = |g||r|\cos \theta$.

$$V_{at.-at.}(r) = \frac{4\pi Z_1 Z_2 e^2}{(2\pi)^3} \int_0^\infty \frac{g^4}{(g^2 + \mu_1^2)(g^2 + \mu_2^2)} dg \int_0^\pi \exp(-igr \cos \theta) \sin \theta d\theta \int_0^{2\pi} d\varphi.$$

Интеграл по $d\theta$ вычислим, используя замену $dt = \sin \theta d\theta$, $t = -\cos \theta$. В этом случае пределы интегрирования будут изменяться от -1 до 1

$$\int_0^\pi \exp(-igr \cos \theta) \sin \theta d\theta = \int_{-1}^1 \exp(-igr t) dt = \frac{1}{-igr} (\exp(-igr) - \exp(igr)) = \frac{2 \sin(gr)}{gr}.$$

Теперь выражение для $V_{at.-at.}(r)$ примет следующий вид:

$$V_{at.-at.}(r) = \frac{2Z_1 Z_2 e^2}{\pi r} \int_0^\infty \frac{g^3 \sin(gr)}{(g^2 + \mu_1^2)(g^2 + \mu_2^2)} dg.$$

Полученный интеграл вычислим с помощью теории вычетов. В данном случае имеем два полюса $i\mu_1$ и $i\mu_2$ первого порядка

$$\int_0^{\infty} \frac{g^3 \sin(gr) dg}{(g^2 + \mu_1^2)(g^2 + \mu_2^2)} dg = \frac{1}{2} \operatorname{Im} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{g^3 \exp(igr)}{(g^2 + \mu_1^2)(g^2 + \mu_2^2)} dg =$$

$$= \frac{1}{2} \operatorname{Im} \left(2\pi i \operatorname{Выч} \left(\frac{g^3 \exp(igr)}{(g^2 + \mu_1^2)(g^2 + \mu_2^2)}, i\mu_1 \right) + 2\pi i \operatorname{Выч} \left(\frac{g^3 \exp(igr)}{(g^2 + \mu_1^2)(g^2 + \mu_2^2)}, i\mu_2 \right) \right).$$

Отдельно определим вычеты функции

$$\operatorname{Выч} \left(\frac{g^3 \exp(igr)}{(g^2 + \mu_1^2)(g^2 + \mu_2^2)}, i\mu_1 \right) = \lim_{g \rightarrow i\mu_1} (g - i\mu_1) \frac{g^3 \exp(igr)}{(g^2 + \mu_1^2)(g^2 + \mu_2^2)} =$$

$$= \lim_{g \rightarrow i\mu_1} \frac{g^3 \exp(igr)}{(g + i\mu_1)(g^2 + \mu_2^2)} = \frac{\mu_1^2}{2(\mu_1^2 - \mu_2^2)} \exp(-\mu_1 r),$$

$$\operatorname{Выч} \left(\frac{g^3 \exp(igr)}{(g^2 + \mu_1^2)(g^2 + \mu_2^2)}, i\mu_2 \right) = -\frac{\mu_2^2}{2(\mu_1^2 - \mu_2^2)} \exp(-\mu_2 r).$$

Теперь рассматриваемый интеграл будет равен следующему выражению:

$$\int_0^{\infty} \frac{g^3 \sin(gr) dg}{(g^2 + \mu_1^2)(g^2 + \mu_2^2)} dg = \frac{\pi}{2} \frac{\mu_1^2 \exp(-\mu_1 r) - \mu_2^2 \exp(-\mu_2 r)}{(\mu_1^2 - \mu_2^2)}.$$

Окончательно получим следующее выражение для потенциала взаимодействия налетающего атома с зарядом $Z_1 e$ с атомом кристалла с зарядом $Z_2 e$:

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

ПРИЛОЖЕНИЕ 7

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

Потенциальная энергия взаимодействия двух атомов с зарядом Ze $V_{at.-at.}(g)$ в виде разложения в интеграл Фурье имеет вид

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

Перейдем в сферическую систему координат

$$V_{at.-at.}(r) = \frac{4\pi(Ze)^2}{(2\pi)^3} \int_0^\infty \frac{g^4}{(g^2 + \mu^2)^2} dg \int_0^\pi \exp(-igr \cos \theta) \sin \theta d\theta \int_0^{2\pi} d\varphi.$$

Интеграл по $d\theta$ вычислен в приложении 5. Имеем:

$$V_{at.-at.}(r) = \frac{2(Ze)^2}{\pi r} \int_0^\infty \frac{g^3 \sin(gr)}{(g^2 + \mu^2)^2} dg.$$

Оставшийся интеграл вычислим с помощью теории вычетов

$$\int_0^\infty \frac{g^3 \sin(gr)}{(g^2 + \mu^2)^2} dg = \frac{1}{2} \text{Im} \int_{-\infty}^\infty \frac{g^3 \exp(igr)}{(g^2 + \mu^2)^2} dg = \frac{1}{2} \text{Im} \left(2\pi i \text{Выч} \left(\frac{g^3 \exp(igr)}{(g^2 + \mu^2)^2}, i\mu \right) \right).$$

Отдельно определим вычет функции $\frac{g^3 \exp(igr)}{(g^2 + \mu^2)^2}$, которая имеет полюс $i\mu$

второго порядка

$$\begin{aligned} \text{Выч} \left(\frac{g^3 \exp(igr)}{(g^2 + \mu^2)^2}, i\mu \right) &= \lim_{g \rightarrow i\mu} \frac{d}{dg} (g - i\mu)^2 \frac{g^3 \exp(igr)}{(g^2 + \mu^2)^2} = \lim_{g \rightarrow i\mu} \frac{d}{dg} \frac{g^3 \exp(igr)}{(g + i\mu)^2} = \\ &= \lim_{g \rightarrow i\mu} \frac{g^2 (irg^2 + g - \mu rg + 3i\mu) \exp(igr)}{(g + i\mu)^3} = \frac{(2 - \mu r) \exp(-\mu r)}{4}. \end{aligned}$$

Теперь рассматриваемый интеграл примет вид:

$$\int_0^\infty \frac{g^3 \sin(gr)}{(g^2 + \mu^2)^2} dg = \frac{\pi}{4} (2 - \mu r) \exp(-\mu r).$$

Таким образом, потенциал взаимодействия налетающего атома с зарядом Ze с атомами кристалла так же с зарядом Ze запишется в виде:

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

ПРИЛОЖЕНИЕ 8

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

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

Фурье:

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

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

Осуществим переход к сферическим координатам, где $d^3 \vec{g} = g^2 \sin \theta d\varphi dg d\theta$, $\vec{g}\vec{r} = |g||r|\cos\theta$ и вычислим получившийся тройной интеграл

$$V_{at.-at.}(r) = \frac{1}{2\pi^2} Z_1 Z_2 e^2 \sum_{i,j=1}^3 \alpha_i \alpha_j \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^\infty \frac{g^4}{(\mu_i^2 + g^2)(\mu_j^2 + g^2)} dg \int_0^\pi \exp(-igr \cos \theta) \sin \theta d\theta.$$

Внутренний интеграл и интеграл по dg вычислялись в приложениях 5 и 6 соответственно. Окончательно потенциальная энергия взаимодействия быстрого атома с атомами кристалла в случае потенциала изолированного атома, выбранного в приближении Мольер, определяется выражением

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

ПРИЛОЖЕНИЕ 9

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

Потенциальная энергия взаимодействия налетающего атома с атомом кристалла с учетом принципа Паули при $Z_{\min} = Z_1$ $V_{at.-at.}^*(g)$ в виде разложения в интеграл Фурье имеет вид

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

Запишем данное выражение в виде суммы

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

Первое слагаемое совпадает с выше рассмотренным случаем взаимодействия налетающего атома с атомом кристалла без учета принципа Паули $V_{at.-at.}(g)$ (см. приложение 6). Рассмотрим второе слагаемое. Перейдем в сферическую систему координат

$$\begin{aligned}
& \int \frac{4\pi Z_1 Z_2 e^2 \mu_1^2 g^2}{(g^2 + \mu_1^2)^2 (g^2 + \mu_2^2)} \exp(-i\vec{g}\vec{r}) \frac{d^3 \vec{g}}{(2\pi)^3} = \\
& = \frac{4\pi Z_1 Z_2 e^2 \mu_1^2}{(2\pi)^3} \int_0^\infty \frac{g^4}{(g^2 + \mu_1^2)^2 (g^2 + \mu_2^2)} dg \int_0^\pi \exp(-igr \cos \theta) \sin \theta d\theta \int_0^{2\pi} d\varphi = \\
& = \frac{2Z_1 Z_2 e^2 \mu_1^2}{\pi r} \int_0^\infty \frac{g^3 \sin(gr) dg}{(g^2 + \mu_1^2)^2 (g^2 + \mu_2^2)}.
\end{aligned}$$

Оставшийся интеграл вычислим с помощью теории вычетов. В данном случае имеем два полюса: полюс $i\mu_1$ второго порядка и полюс $i\mu_2$ первого порядка

$$\begin{aligned}
& \int_0^\infty \frac{g^3 \sin(gr) dg}{(g^2 + \mu_1^2)^2 (g^2 + \mu_2^2)} dg = \frac{1}{2} \text{Im} \int_{-\infty}^\infty \frac{g^3 \exp(igr)}{(g^2 + \mu_1^2)^2 (g^2 + \mu_2^2)} dg = \\
& = \frac{1}{2} \text{Im} \left(2\pi i \text{Выч} \left(\frac{g^3 \exp(igr)}{(g^2 + \mu_1^2)^2 (g^2 + \mu_2^2)}, i\mu_1 \right) + 2\pi i \text{Выч} \left(\frac{g^3 \exp(igr)}{(g^2 + \mu_1^2)^2 (g^2 + \mu_2^2)}, i\mu_2 \right) \right).
\end{aligned}$$

Отдельно определим вычеты функции

$$\begin{aligned}
& \text{Выч} \left(\frac{g^3 \exp(igr)}{(g^2 + \mu_1^2)^2 (g^2 + \mu_2^2)}, i\mu_1 \right) = \lim_{g \rightarrow i\mu_1} \frac{d}{dg} (g - i\mu_1)^2 \frac{g^3 \exp(igr)}{(g^2 + \mu_1^2)^2 (g^2 + \mu_2^2)} = \\
& = \lim_{g \rightarrow i\mu_1} \frac{d}{dg} \frac{g^3 \exp(igr)}{(g + i\mu_1)^2 (g^2 + \mu_2^2)} = \\
& \lim_{g \rightarrow i\mu_1} \frac{g^2 (irg^4 - g^3 - \mu_1 r g^3 + i\mu_1 g^2 + i\mu_2^2 r g^2 + \mu_2^2 g - \mu_1 \mu_2^2 r g + 3i\mu_1 \mu_2^2) \exp(igr)}{(g + i\mu_1)^3 (g^2 + \mu_2^2)^2} = \\
& = \frac{\mu_1^3 r - \mu_1 \mu_2^2 r + 2\mu_2^2}{4(\mu_1^2 - \mu_2^2)^2} \exp(-\mu_1 r), \\
& \text{Выч} \left(\frac{g^3 \exp(igr)}{(g^2 + \mu_1^2)^2 (g^2 + \mu_2^2)}, i\mu_2 \right) = \lim_{g \rightarrow i\mu_2} (g - i\mu_2) \frac{g^3 \exp(igr)}{(g^2 + \mu_1^2)^2 (g^2 + \mu_2^2)} = \\
& = \lim_{g \rightarrow i\mu_2} \frac{g^3 \exp(igr)}{(g^2 + \mu_1^2)^2 (g + i\mu_2)} = -\frac{\mu_2^2}{2(\mu_1^2 - \mu_2^2)^2} \exp(-\mu_2 r).
\end{aligned}$$

Таким образом, рассматриваемый интеграл равен следующему выражению

$$\int_0^{\infty} \frac{g^3 \sin(gr) dg}{(g^2 + \mu_1^2)^2 (g^2 + \mu_2^2)} dg = \frac{\pi}{4} \frac{(\mu_1^3 r - \mu_1 \mu_2^2 r + 2\mu_2^2) \exp(-\mu_1 r) - 2\mu_2^2 \exp(-\mu_2 r)}{(\mu_1^2 - \mu_2^2)^2}.$$

Окончательно выражение для потенциала взаимодействия налетающего атома с атомами кристалла с учетом принципа Паули при $Z_{\min} = Z_1$ примет вид:

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

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

ПРИЛОЖЕНИЕ 10

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

Потенциальная энергия взаимодействия налетающего атома с атомом кристалла с учетом принципа Паули при $Z_{\min} = Z_2$ в виде разложения в интеграл Фурье имеет вид

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

Запишем данное выражение в виде суммы

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

Первое слагаемое совпадает с выше рассмотренным случаем взаимодействия налетающего атома с атомом кристалла без учета принципа Паули $V_{at.-at.}(g)$ (см. приложение 6). Что касается второго слагаемого, то подобный интеграл рассматривался в приложении 9, поэтому

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

Окончательно выражение для потенциала взаимодействия налетающего атома с атомами кристалла с учетом принципа Паули при $Z_{\min} = Z_2$ примет вид:

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

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

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

Потенциальная энергия взаимодействия двух атомов с зарядом Ze с учетом принципа Паули в виде разложения в интеграл Фурье имеет вид

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

Запишем последнее выражение в виде суммы

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

Здесь первое слагаемое совпадает с выше рассмотренным случаем взаимодействия налетающего атома с зарядом Ze с атомом кристалла с зарядом Ze без учета принципа Паули $V_{at.-at.}(g)$ (см. приложение 7).

Рассмотрим второе слагаемое. Перейдем в сферическую систему координат

$$\begin{aligned} & \int \frac{4\pi(Ze)^2 \mu^2 g^2}{(g^2 + \mu^2)^3} \exp(-i\vec{g}\vec{r}) \frac{d^3\vec{g}}{(2\pi)^3} = \\ & = \frac{4\pi(Ze)^2 \mu^2}{(2\pi)^3} \int_0^\infty \frac{g^4}{(g^2 + \mu^2)^3} dg \int_0^\pi \exp(-igr \cos \theta) \sin \theta d\theta \int_0^{2\pi} d\varphi = \\ & = \frac{2(Ze)^2 \mu^2}{\pi r} \int_0^\infty \frac{g^3 \sin(gr)}{(g^2 + \mu^2)^3} dg. \end{aligned}$$

Оставшийся интеграл вычислим с помощью теории вычетов. В данном случае имеем один полюс $i\mu$ третьего порядка

$$\int_0^{\infty} \frac{g^3 \sin(gr)}{(g^2 + \mu^2)^3} dg = \frac{1}{2} \operatorname{Im} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{g^3 \exp(igr)}{(g^2 + \mu^2)^3} dg = \frac{1}{2} \operatorname{Im} \left(2\pi i \operatorname{Выч} \left(\frac{g^3 \exp(igr)}{(g^2 + \mu^2)^3}, i\mu \right) \right).$$

Отдельно определим вычет функции

$$\begin{aligned} \operatorname{Выч} \left(\frac{g^3 \exp(igr)}{(g^2 + \mu^2)^3}, i\mu \right) &= \frac{1}{2!} \lim_{g \rightarrow i\mu} \frac{d^2}{dg^2} (g - i\mu)^3 \frac{g^3 \exp(igr)}{(g^2 + \mu^2)^3} = \\ &= \frac{1}{2} \lim_{g \rightarrow i\mu} \frac{d^2}{dg^2} \frac{g^3 \exp(igr)}{(g + i\mu)^3} = \\ &= -\frac{1}{2} \lim_{g \rightarrow i\mu} \frac{g(r^2 g^4 + 2ir^2 g^3 + (6r\mu - \mu^2 r^2)g^2 + 6i\mu(1 + \mu r)g + 6\mu^2)}{(g + i\mu)^3} \exp(igr) = \\ &= -\frac{r(\mu r - 3)}{16\mu} \exp(-\mu r). \end{aligned}$$

Таким образом, рассматриваемый интеграл равен следующему выражению

$$\int_0^{\infty} \frac{g^3 \sin(gr)}{(g^2 + \mu^2)^3} dg = -\frac{\pi}{16\mu} r(\mu r - 3) \exp(-\mu r).$$

Теперь выражение для потенциала взаимодействия налетающего атома с зарядом Ze с атомами кристалла с зарядом Ze с учетом принципа Паули примет вид:

$$V_{at.-at.}^*(\vec{r}) = \frac{(Ze)^2}{2r} (2 - \mu r) \exp(-\mu r) + \frac{(Ze)^2 \mu}{8} (\mu r - 3) \exp(-\mu r)$$

или

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

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

Потенциальная энергия взаимодействия двух атомов с зарядом Ze с учетом принципа Паули в виде разложения в интеграл Фурье имеет вид

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

Запишем последнее выражение в виде суммы

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

Первое слагаемое представляет собой разложение в интеграл Фурье потенциальной энергии взаимодействия двух одинаковых атомов без учета принципа Паули при выборе потенциалов изолированных атомом в приближении Мольер (см. выражение (2.2.4)). Рассмотрим второе слагаемое.

Перейдем в сферическую систему координат:

$$\int 4\pi (Ze)^2 g^2 \sum_{i=1}^3 \sum_{i=1}^3 \sum_{j=1}^3 \frac{\alpha_i^2 \alpha_j \mu_i^2}{(g^2 + \mu_i^2)^2 (g^2 + \mu_j^2)} \exp(-i\vec{g}\vec{r}) \frac{d^3 \vec{g}}{(2\pi)^3} = \\ = \frac{4\pi (Ze)^2}{(2\pi)^3} \sum_{i=1}^3 \sum_{i=1}^3 \sum_{j=1}^3 \alpha_i^2 \alpha_j \mu_i^2 \int_0^\infty \frac{g^4 dg}{(g^2 + \mu_i^2)^2 (g^2 + \mu_j^2)} \int_0^\pi \exp(-igr \cos \theta) \sin \theta d\theta \int_0^{2\pi} d\varphi.$$

Интеграл по $d\theta$ и интеграл, аналогичный интегралу по dg , вычислялись в приложениях 5 и 9 соответственно. Запишем окончательный результат:

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

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

Потенциальная энергия взаимодействия налетающего иона с зарядом $Z_e e$ с атомами кристалла с зарядом $Z_2 e$ в виде разложения в интеграл Фурье имеет вид:

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

Запишем последнее выражение в виде суммы

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

Рассмотрим первое слагаемое. Перейдем в сферическую систему координат и вычислим интегралы по $d\phi$ и $d\theta$, получим следующее выражение

$$\int \frac{4\pi Q Z_2 e^2}{g^2 + \mu_2^2} \exp(-i\vec{g}\vec{r}) \frac{d^3 \vec{g}}{(2\pi)^3} = \frac{2Q Z_2 e^2}{\pi r} \int_0^\infty \frac{g \sin(gr) dg}{(g^2 + \mu_2^2)}.$$

Интеграл вычислим с помощью теории вычетов. В данном случае имеем один полюс $i\mu_2$ первого порядка

$$\int_0^\infty \frac{g \sin(gr)}{(g^2 + \mu_2^2)} dg = \frac{1}{2} \text{Im} \int_{-\infty}^\infty \frac{g \sin(gr)}{(g^2 + \mu_2^2)} dg = \frac{1}{2} \text{Im} \left(2\pi i \text{Выч} \left(\frac{g \sin(gr)}{(g^2 + \mu_2^2)}, i\mu_2 \right) \right)$$

Отдельно определим вычет функции

$$\text{Выч}\left(\frac{g \sin(gr)}{(g^2 + \mu_2^2)}, i\mu_2\right) = \lim_{g \rightarrow i\mu_2} (g - i\mu_2) \frac{g \exp(igr)}{(g^2 + \mu_2^2)} = \lim_{g \rightarrow i\mu_2} \frac{g \exp(igr)}{(g + i\mu_2)} = \frac{\exp(-\mu_2 r)}{2}.$$

Таким образом, рассматриваемый интеграл будет равен следующему выражению

$$\frac{2QZ_2e^2}{\pi r} \int_0^\infty \frac{g \sin(gr) dg}{(g^2 + \mu_2^2)} = \frac{QZ_2e^2}{r} \exp(-\mu_2 r).$$

После интегрирования второго слагаемого по $d\varphi$ и $d\theta$ получим:

$$\int \frac{4\pi(Z_1 - Q)Z_2e^2g^2}{(g^2 + \mu_e^2)(g^2 + \mu_2^2)} \exp(-l\vec{g}\vec{r}) \frac{d^3\vec{g}}{(2\pi)^3} = \frac{2(Z_1 - Q)Z_2e^2}{\pi r} \int_0^\infty \frac{g^3 \sin(gr) dg}{(g^2 + \mu_e^2)(g^2 + \mu_2^2)}.$$

Интеграл аналогичный последнему рассматривался в приложении 6. Таким образом, второе слагаемое перепишется в виде:

$$\begin{aligned} \int \frac{4\pi(Z_1 - Q)Z_2e^2g^2}{(g^2 + \mu_e^2)(g^2 + \mu_2^2)} \exp(-l\vec{g}\vec{r}) \frac{d^3\vec{g}}{(2\pi)^3} &= \frac{2(Z_1 - Q)Z_2e^2}{\pi r} \int_0^\infty \frac{g^3 \sin(gr)}{(g^2 + \mu_1^2)(g^2 + \mu_2^2)} dg = \\ &= \frac{(Z_1 - Q)Z_2e^2}{r} \frac{1}{\mu_e^2 - \mu_2^2} (\mu_e^2 \exp(-\mu_e r) - \mu_2^2 \exp(-\mu_2 r)). \end{aligned}$$

Итак, окончательно получим следующее выражение для потенциальной энергии взаимодействия налетающего иона с зарядом $Z_e e$ с атомами кристалла с зарядом $Z_2 e$ без учета принципа Паули:

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

ПРИЛОЖЕНИЕ 14

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

Потенциальная энергия взаимодействия налетающего иона с зарядом $Z_e e$ с атомами кристалла с зарядом $Z_2 e$ при выборе потенциалов в приближении Мольер в виде разложения в интеграл Фурье имеет вид:

$$V(\vec{r}) = \int 4\pi Q Z_2 e^2 \sum_{j=1}^3 \frac{\alpha_j}{\mu_j^2 + g^2} \exp -\iota \vec{g} \vec{r} \frac{d^3 \vec{g}}{2\pi^3} + \\ + \int 4\pi g^2 Z_1 - Q Z_2 e^2 \sum_{i,j=1}^3 \frac{\alpha_i \alpha_j}{\mu_i^2 + g^2 \mu_j^2 + g^2} \exp -\iota \vec{g} \vec{r} \frac{d^3 \vec{g}}{2\pi^3}.$$

Первое слагаемое есть ни что иное, как потенциал в приближении Мольер

$$\int 4\pi Q Z_2 e^2 \sum_{j=1}^3 \frac{\alpha_j}{\mu_j^2 + g^2} \exp -\iota \vec{g} \vec{r} \frac{d^3 \vec{g}}{2\pi^3} = \frac{Q Z_2 e^2}{r} \sum_{j=1}^3 \alpha_j \exp -\mu_j r .$$

После перехода к сферическим координатам во втором слагаемом, получим:

$$V(r) = \frac{Q Z_2 e^2}{r} \sum_{j=1}^3 \alpha_j \exp(-\mu_j r) + \\ + \frac{(Z_1 - Q) Z_2 e^2}{r} \sum_{i,j=1}^3 \frac{\alpha_i \alpha_j}{\mu_i^2 - \mu_j^2} (\mu_i^2 \exp(-\mu_i r) - \mu_j^2 \exp(-\mu_j r)).$$

ПРИЛОЖЕНИЕ 15

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

Потенциальная энергия взаимодействия налетающего иона с зарядом $Z_e e$ с атомами кристалла с зарядом $Z_2 e$ при $Z_{\min} = Z_e$ с учетом принципа Паули в виде разложения в интеграл Фурье имеет вид

$$V_{ion-at.}^*(g) = \int_0^\infty \left(\frac{4\pi Q Z_2 e^2}{g^2 + \mu_2^2} + \frac{4\pi (Z_1 - Q) Z_2 e^2 g^2}{(g^2 + \mu_e^2)(g^2 + \mu_2^2)} \left(1 - \frac{\mu_e^2}{g^2 + \mu_e^2} \right) \right) \exp(-l\vec{g}\vec{r}) \frac{d^3\vec{g}}{(2\pi)^3}$$

или же

$$V_{ion-at.}^*(g) = \int_0^\infty \frac{4\pi Q Z_2 e^2}{g^2 + \mu_2^2} \exp(-l\vec{g}\vec{r}) \frac{d^3\vec{g}}{(2\pi)^3} + \int_0^\infty \frac{4\pi (Z_1 - Q) Z_2 e^2 g^2}{(g^2 + \mu_e^2)(g^2 + \mu_2^2)} \exp(-l\vec{g}\vec{r}) \frac{d^3\vec{g}}{(2\pi)^3} - \\ - \int_0^\infty \frac{4\pi (Z_1 - Q) Z_2 e^2 \mu_e^2 g^2}{(g^2 + \mu_e^2)^2 (g^2 + \mu_2^2)} \exp(-l\vec{g}\vec{r}) \frac{d^3\vec{g}}{(2\pi)^3}.$$

Два первых слагаемых соответствуют случаю взаимодействия налетающего иона с атомами кристалла без учета принципа Паули (см. приложение 13). Слагаемое, аналогичное третьему слагаемому, рассматривалось в приложении 9

$$\int_0^\infty \frac{4\pi Q Z_2 e^2 \mu_e^2 g^2}{(g^2 + \mu_e^2)^2 (g^2 + \mu_2^2)} \exp(-l\vec{g}\vec{r}) \frac{d^3\vec{g}}{(2\pi)^3} = \frac{2(Z_1 - Q) Z_2 e^2 \mu_e^2}{\pi r} \int_0^\infty \frac{g^3 \sin(gr) dg}{(g^2 + \mu_e^2)^2 (g^2 + \mu_2^2)} = \\ = \frac{(Z_1 - Q) Z_2 e^2 \mu_e^2}{2r} \frac{1}{(\mu_e^2 - \mu_2^2)^2} \left((\mu_e^3 r - \mu_e \mu_2^2 r + 2\mu_2^2) \exp(-\mu_e r) - 2\mu_2^2 \exp(-\mu_2 r) \right).$$

Итак, окончательно выражение для потенциала взаимодействия налетающего иона с зарядом $Z_e e$ с атомами кристалла с зарядом $Z_2 e$ с учетом принципа Паули в случае $Z_{\min} = Z_e$ примет вид

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

ПРИЛОЖЕНИЕ 16

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

Потенциальная энергия взаимодействия налетающего иона с зарядом $Z_e e$ с атомами кристалла с зарядом $Z_2 e$ при $Z_{\min} = Z_2$ с учетом принципа Паули в виде разложения в интеграл Фурье имеет вид

$$V_{ion-at.}^*(g) = \int_0^\infty \left(\frac{4\pi Q Z_2 e^2}{g^2 + \mu_2^2} + \frac{4\pi (Z_1 - Q) Z_2 e^2 g^2}{(g^2 + \mu_e^2)(g^2 + \mu_2^2)} \left(1 - \frac{\mu_2^2}{g^2 + \mu_2^2} \right) \right) \exp(-l \vec{g} \vec{r}) \frac{d^3 \vec{g}}{(2\pi)^3}$$

или же

$$V_{ion-at.}^*(g) = \int_0^\infty \frac{4\pi Q Z_2 e^2}{g^2 + \mu_2^2} \exp(-l \vec{g} \vec{r}) \frac{d^3 \vec{g}}{(2\pi)^3} + \int_0^\infty \frac{4\pi (Z_1 - Q) Z_2 e^2 g^2}{(g^2 + \mu_e^2)(g^2 + \mu_2^2)} \exp(-l \vec{g} \vec{r}) \frac{d^3 \vec{g}}{(2\pi)^3} - \\ - \int_0^\infty \frac{4\pi (Z_1 - Q) Z_2 e^2 \mu_2^2 g^2}{(g^2 + \mu_e^2)(g^2 + \mu_2^2)^2} \exp(-l \vec{g} \vec{r}) \frac{d^3 \vec{g}}{(2\pi)^3}.$$

Два первых слагаемых соответствуют случаю взаимодействия налетающего иона с атомами кристалла без учета принципа Паули (см. приложение 13).

Слагаемое, аналогичное третьему, рассматривалось в приложении 9:

$$\int_0^\infty \frac{4\pi (Z_1 - Q) Z_2 e^2 \mu_2^2 g^2}{(g^2 + \mu_e^2)(g^2 + \mu_2^2)^2} \exp(-l \vec{g} \vec{r}) \frac{d^3 \vec{g}}{(2\pi)^3} = \frac{2(Z_1 - Q) Z_2 e^2 \mu_2^2}{\pi r} \int_0^\infty \frac{g^3 \sin(g r) dg}{(g^2 + \mu_e^2)(g^2 + \mu_2^2)^2} = \\ = -\frac{(Z_1 - Q) Z_2 e^2}{2r} \frac{\mu_2^2}{(\mu_e^2 - \mu_2^2)^2} \left(2\mu_e^2 \exp(-\mu_e r) - (\mu_2^3 r - \mu_e^2 \mu_2 r + 2\mu_e^2) \exp(-\mu_2 r) \right).$$

Итак, окончательно выражение для потенциальной энергии взаимодействия налетающего иона с зарядом $Z_e e$ с атомами кристалла с зарядом $Z_2 e$ с учетом принципа Паули в случае $Z_{\min} = Z_2$ примет вид:

$$\begin{aligned}
V_{ion-at.}^*(r) = & \frac{QZ_2e^2}{r} \exp(-\mu_2r) + \\
& + \frac{(Z_1-Q)Z_2e^2}{r} \frac{1}{\mu_e^2 - \mu_2^2} \left(\mu_e^2 \exp(-\mu_e r) - \mu_2^2 \exp(-\mu_2 r) \right) + \\
& + \frac{(Z_1-Q)Z_2e^2}{2r} \frac{\mu_2^2}{(\mu_e^2 - \mu_2^2)^2} \left(2\mu_e^2 \exp(-\mu_e r) - (\mu_2^3 r - \mu_e^2 \mu_2 r + 2\mu_e^2) \exp(-\mu_2 r) \right).
\end{aligned}$$

ПРИЛОЖЕНИЕ 17

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

Потенциальная энергия взаимодействия заряженной частицы с атомами, образующими кубическую кристаллическую решетку со сложным базисом, имеет вид:

$$U(\vec{r}) = \sum_{\vec{g}} U(\vec{g}) \exp(i\vec{g}\vec{r}),$$

где $U(\vec{g})$ — фурье-компонента потенциальной энергии, которая в свою очередь определяется как:

$$U(\vec{g}) = \frac{1}{d^3} \sum_i V(g) \exp\left(-\frac{\sigma^2 g^2}{2} - i\vec{g}\vec{r}_i\right).$$

Здесь \vec{g} — вектор обратной решетки, $g = \sqrt{g_x^2 + g_y^2}$, $g_x = \frac{2\pi n_x}{a_x}$, $g_y = \frac{2\pi n_y}{a_y}$ —

проекции вектора обратной решетки на оси OX и OY соответственно, n_x , n_y — целые числа, a_x , a_y — периоды кристаллической решетки в направлении осей OX и OY соответственно; d — период решетки кристалла; σ — средняя амплитуда тепловых колебаний атомов кристалла; $V(g)$ — фурье-компонента потенциала взаимодействия ядро-атом, ион-атом или атом-атом.

Подставим выражение для $U(\vec{g})$ в выражение для $U(\vec{r})$

$$U(\vec{r}) = \frac{1}{d^3} \sum_{\vec{g}} \sum_i V(g) \exp\left(-\frac{\sigma^2 g^2}{2}\right) \exp(-i\vec{g}(\vec{r} - \vec{r}_i)).$$

Так как потенциальная энергия — величина действительная, то, применив формулу Эйлера $\exp(i\varphi) = \cos \varphi + i \sin \varphi$, и, выделив только действительную часть $\operatorname{Re}(\exp(i\varphi)) = \cos \varphi$, получим:

$$U(\vec{r}) = \frac{1}{d^3} \sum_{\vec{g}} \sum_i V(g) \exp\left(-\frac{\sigma^2 g^2}{2}\right) \cos(\vec{g}(\vec{r} - \vec{r}_i)).$$

Запишем скалярное произведение векторов в координатной форме, учтем, что рассматриваемые алмазоподобные кристаллы содержат 8 атомов в элементарной кристаллической ячейке, в итоге получим потенциальную энергию взаимодействия налетающей частицы с непрерывным потенциалом осевого канала кристалла в виде разложения в двойной ряд Фурье

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

где x_i, y_j — координаты атомов элементарной ячейки кристалла.

В работе используется последнее выражение, зависящее от безразмерных координат X и Y , которые определяются как:

$$X = \frac{x}{d}, Y = \frac{y}{d},$$

где x, y — размерные координаты. Обезразмеривание потенциальной энергии взаимодействия налетающей частицы с непрерывным потенциалом осевого канала кристалла приведет к выражению вида:

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

где X_i, Y_j — безразмерные координаты атомов элементарной ячейки кристалла, выбранные в единицах a_x и a_y соответственно (см. табл. 1.2.1).

Приведенные выше выражения применимы при рассмотрении осевого канала кристалла. В случае плоскостного канала имеем:

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

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

ПРИЛОЖЕНИЕ 18

Вычисление форм-фактора водородоподобного иона, электрон которого находится в состоянии 2s, исходя из волновых функций уравнения Шредингера

Имеем

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

Интегралы, содержащиеся в выражении для форм-фактора, вычислим с помощью [17]

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

$$\int_0^\infty x^2 \exp -ax \sin mx = \frac{2m}{a^2 + m^2} \frac{3a^2 - m^2}{3},$$

где $a > 0$;

$$\int_0^\infty x^{p-1} \exp -ax \sin mx = \frac{\Gamma(p) \sin p\theta}{a^2 + m^2} \frac{1}{r^{p/2}},$$

где $p, a, m > 0$, $\sin \theta = \frac{m}{r}$, $\cos \theta = \frac{a}{r}$, $r = (a^2 + m^2)^{1/2}$. Здесь $\Gamma(p)$ — гамма-функция, представляющая собой обобщение факториала на случай произвольного комплексного числа. В случае положительных действительных чисел

$$\Gamma(p) = (p-1)!.$$

Из последнего выражения получим частный случай при $p = 4$.

Примем во внимание, что $\sin 4\theta = 4\cos\theta\sin\theta \cos^2\theta - \sin^2\theta$, тогда

$$\int_0^{\infty} x^3 \exp -ax \sin mx = \frac{24am}{a^2 + m^2} \frac{a^2 - m^2}{4}.$$

Таким образом, выражение для форм-фактора примет вид:

$$\begin{aligned} F(g) &= \frac{1}{2a^3 g} \left(\frac{2a^3 g}{\left(1 + (ag)^2\right)^2} - \frac{2a^3 g \left(3 - (ag)^2\right)}{\left(1 + (ag)^2\right)^3} + \frac{6a^3 g \left(1 - (ag)^2\right)}{\left(1 + (ag)^2\right)^4} \right) = \\ &= \frac{1}{\left(1 + (ag)^2\right)^2} \left(1 - \frac{3 - (ag)^2}{1 + (ag)^2} + \frac{3 \left(1 - (ag)^2\right)}{\left(1 + (ag)^2\right)^2} \right). \end{aligned}$$

ПРИЛОЖЕНИЕ 19

Вычисление форм-фактора водородоподобного иона, электрон которого находится в состоянии $2p$, исходя из волновых функций уравнения Шредингера

Имеем

$$F(g) = \frac{1}{16a^5} \int_0^\infty r^4 \exp\left(-\frac{r}{a}\right) dr \int_0^\pi \cos^2 \theta \sin \theta \exp(-igr \cos \theta) d\theta.$$

Интеграл по $d\theta$ вычислим, сделав замену $\sin \theta d\theta = dt$, тогда $t = -\cos \theta$, пределы интегрирования будут изменяться от -1 до 1

$$\int_0^\pi \cos^2 \theta \sin \theta \exp(-igr \cos \theta) d\theta = \int_{-1}^1 t^2 \exp(igt) dt$$

Полученный интеграл возьмем два раза по частям и применим формулы Эйлера:

$$\cos z = \frac{\exp(iz) + \exp(-iz)}{2}, \quad \sin z = \frac{\exp(iz) - \exp(-iz)}{2i},$$

$$\begin{aligned} \int_{-1}^1 t^2 \exp igt \, dt &= t^2 \frac{\exp igt}{igr} \Big|_{-1}^1 - \frac{2}{igr} \int_{-1}^1 t \exp igt \, dt = \\ &= \frac{2 \sin gr}{gr} - \frac{2}{igr} \left(t \frac{\exp igt}{igr} \Big|_{-1}^1 - \frac{1}{igr} \int_{-1}^1 \exp igt \, dt \right) = \\ &= \frac{2 \sin gr}{gr} - \frac{2}{igr} \left(\frac{2 \cos gr}{igr} - \frac{\exp igt}{igr^2} \Big|_{-1}^1 \right) = \\ &= \frac{2 \sin gr}{gr} + \frac{4 \cos gr}{gr^2} - \frac{4 \sin gr}{gr^3}. \end{aligned}$$

Теперь рассматриваемое выражение для форм-фактора переписывается в виде:

$$F(g) = \frac{1}{16a^5 g} \int_0^\infty \left(2r^3 \sin(gr) + \frac{4r^2 \cos(gr)}{g} - \frac{4r \sin(gr)}{g^2} \right) \exp\left(-\frac{r}{a}\right) dr.$$

Интегралы с синусами рассматривались в приложении 18. Согласно [17] для слагаемого с косинусом имеем:

$$\int_0^\infty x^2 \exp -ax \cos mx = \frac{2a a^2 - 3m^2}{a^2 + m^2^3},$$

где $a > 0$. Таким образом, окончательно получим

$$\begin{aligned} F(g) &= \frac{1}{16a^5 g} \left(\frac{48a^5 g (1 - (ag)^2)}{(1 + (ag)^2)^4} + \frac{8a^3 (1 - 3(ag)^2)}{g (1 + (ag)^2)^3} - \frac{8a^3}{g (1 + (ag)^2)^2} \right) = \\ &= \frac{1}{(1 + (ag)^2)^2} \left(\frac{3(1 - (ag)^2)}{(1 + (ag)^2)^2} + \frac{1}{2(ag)^2} \frac{1 - 3(ag)^2}{1 + (ag)^2} - \frac{1}{2(ag)^2} \right). \end{aligned}$$

ПРИЛОЖЕНИЕ 20

Вычисление форм-фактора водородоподобного иона, электрон которого находится в состоянии $2p$, $m = \pm 1$, исходя из волновых функций уравнения Шредингера

Имеем

$$F(g) = \frac{1}{32a^5} \int_0^\infty r^4 \exp\left(-\frac{r}{a}\right) dr \int_0^\pi \exp(-igr \cos \theta) \sin^3 \theta d\theta.$$

Интеграл по $d\theta$ вычислим, сделав замену $\sin \theta d\theta = dt$, тогда $t = -\cos \theta$, пределы интегрирования будут изменяться от -1 до 1

$$\begin{aligned} \int_0^\pi \exp(-igr \cos \theta) \sin^3 \theta d\theta &= \int_{-1}^1 (1-t^2) \exp(igt) dt = \\ &= \int_{-1}^1 \exp(igt) dt - \int_{-1}^1 t^2 \exp(igt) dt = \frac{2 \sin(gr)}{gr} - \int_{-1}^1 t^2 \exp(igt) dt. \end{aligned}$$

Оставшийся интеграл вычислялся в приложении 20. окончательно запишем:

$$\int_0^\pi \exp(-igr \cos \theta) \sin^3 \theta d\theta = -\frac{4 \cos(gr)}{(gr)^2} + \frac{4 \sin(gr)}{(gr)^3}.$$

Теперь выражение для форм-фактора переписется следующим образом:

$$F(g) = \frac{1}{8a^5} \int_0^\infty \left(-\frac{r^2 \cos(gr)}{g^2} + \frac{r \sin(gr)}{g^3} \right) \exp\left(-\frac{r}{a}\right) dr.$$

Оставшиеся интегралы рассматривались в приложениях 19 и 18 соответственно. Таким образом, форм-фактор определяется выражением:

$$\begin{aligned}
 F(g) &= \frac{1}{8a^5} \left(-\frac{2a^3}{g^2} \frac{1-3(ag)^2}{(1+(ag)^2)^3} + \frac{2a^3}{g^2} \frac{1}{(1+(ag)^2)^2} \right) = \\
 &= \frac{1}{4(ag)^2} \frac{1}{(1+(ag)^2)^2} \left(1 - \frac{1-3(ag)^2}{1+(ag)^2} \right).
 \end{aligned}$$

ПРИЛОЖЕНИЕ 21

Вычисление нормировочного коэффициента волновой функции уравнения Дирака водородоподобного иона, электрон которого находится в состоянии $1s_{1/2}$

Определим постоянную A в выражении для волновой функции

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

Предварительно вычислим произведение $\psi^+ \psi$.

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

Так как $\psi^+ \psi$ не содержит угловых зависимостей, то условие нормировки запишется в виде:

$$4\pi \int_0^\infty \psi^+ \psi r^2 dr = 2mA^2 (2\lambda)^{2(\gamma-1)} \int_0^\infty r^{2\gamma} \exp(-2\lambda r) dr = 1.$$

Из [17] известно, что

$$\int_0^\infty x^n \exp(-ax) dx = \frac{\Gamma(n+1)}{a^{n+1}},$$

где $a > 0$; $n + 1 > 0$; $\Gamma(n)$ — гамма-функция. Для гамма-функции справедливо соотношение

$$\Gamma(n + 1) = n\Gamma(n).$$

Таким образом, получим

$$2mA^2 \frac{\Gamma(2\gamma + 1)}{(2\lambda)^3} = 1,$$

откуда

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

ПРИЛОЖЕНИЕ 22

Вычисление форм-фактора водородоподобного иона, электрон которого находится в состоянии $1s_{1/2}$, исходя из волновых функций уравнения Дирака

Вычислим интеграл

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

Согласно [17]

$$\int_0^{\infty} x^{p-1} \exp(-ax) \sin(mx) = \frac{\Gamma(p) \sin(p\theta)}{(a^2 + m^2)^{\frac{p}{2}}},$$

где $p, a, m > 0$, $\sin \theta = \frac{m}{r}$, $\cos \theta = \frac{a}{r}$, $r = \sqrt{a^2 + m^2}$, $\theta = \arctan\left(\frac{m}{a}\right)$.

С учетом свойства Γ -функции $\Gamma(n+1) = n\Gamma(n)$ интеграл равен:

$$\int_0^{\infty} r^{2\gamma-1} \exp(-2\lambda r) \sin(gr) dr = \frac{\Gamma(2\gamma) \sin(2\gamma\theta)}{((2\lambda)^2 + g^2)^{\gamma}}, \text{ где } \theta = \arctan\left(\frac{g}{2\lambda}\right).$$

Теперь форм-фактор электрона в состоянии $1s_{1/2}$ перепишется следующим образом:

$$F(g) = \frac{(2\lambda)^{2\gamma+1}}{2\gamma g} \frac{\sin(2\gamma\theta)}{((2\lambda)^2 + g^2)^{\gamma}}.$$

ПРИЛОЖЕНИЕ 23

Вычисление нормировочного коэффициента волновой функции уравнения Дирака водородоподобного иона, электрон которого находится в состоянии $2s_{1/2}$

Волновая функция состояния $2s_{1/2}$ выглядит следующим образом

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

Определим произведение $\psi^+ \psi$, которое после несложных преобразований может быть записано в виде:

$$\psi^+ \psi = \left(\frac{A}{\sqrt{4\pi}} (2\lambda r)^{\gamma-1} \exp(-\lambda r) \right)^2 \times \\ \times \left[\left\{ 2m \left(1 + \frac{1}{\left(x - \frac{Z\alpha m}{\lambda} \right)^2} \right) + \frac{4\varepsilon}{x - \frac{Z\alpha m}{\lambda}} \right\} - \frac{8\lambda r}{2\gamma+1} \left(m + \frac{1}{x - \frac{Z\alpha m}{\lambda}} \right) + 2m \left(\frac{2\lambda r}{2\gamma+1} \right)^2 \right].$$

Теперь произведем нормировку волновой функции на единицу:

$$4\pi \int_0^\infty \psi^+ \psi r^2 dr = A^2 2\lambda^{2\gamma-1} \left[\left[2m \left(1 + \frac{1}{\left(x - \frac{Z\alpha m}{\lambda} \right)^2} \right) + \frac{4\varepsilon}{x - \frac{Z\alpha m}{\lambda}} \right] \int_0^\infty r^{2\gamma} \exp -2\lambda r dr - \right. \\ \left. - \frac{8\lambda}{2\gamma+1} \left(m + \frac{1}{x - \frac{Z\alpha m}{\lambda}} \right) \int_0^\infty r^{2\gamma-1} \exp -2\lambda r dr + 2m \left(\frac{2\lambda}{2\gamma+1} \right)^2 \int_0^\infty r^{2\gamma-2} \exp -2\lambda r dr \right] = 1.$$

Полученные интегралы вычислялись в приложении 21. Упростив полученное выражение, получаем:

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

Постоянная A равна

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

ПРИЛОЖЕНИЕ 24

Вычисление нормировочного коэффициента волновой функции уравнения Дирака водородоподобного иона, электрон которого

находится в состоянии $2p_{3/2}$, $m = \frac{1}{2}$

Волновая функция налетающего водородоподобного иона, электрон которого находится в состоянии $2p_{3/2}$ при $m = \frac{1}{2}$ имеет вид:

$$\psi = \frac{A}{\sqrt{8\pi}} (2\lambda r)^{\gamma-1} \exp(-\lambda r) \begin{pmatrix} 2i\sqrt{m+\varepsilon} \cos \theta \\ -i\sqrt{m+\varepsilon} \sin \theta \exp(i\varphi) \\ \sqrt{m-\varepsilon}(1-3\cos^2 \theta) \\ -3\sqrt{m-\varepsilon} \cos \theta \sin \theta \exp(i\varphi) \end{pmatrix}.$$

Перед нормировкой полученной волновой функции определим произведение $\psi^+ \psi$. Получим:

$$\psi^+ \psi = \left(\frac{A}{\sqrt{8\pi}} (2\lambda r)^{\gamma-1} \exp(-\lambda r) \right)^2 2m(1+3\cos^2 \theta).$$

Условие нормирования приведет к выражению вида:

$$\frac{A^2}{8\pi} 2m(2\lambda)^{2(\gamma-1)} \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^\infty r^{2\gamma} \exp(-2\lambda r) dr \int_0^\pi (1+3\cos^2 \theta) \sin \theta d\theta = 1$$

Интеграл по $d\theta$ вычислим, произведя замену $t = -\cos \theta$, $dt = \sin \theta d\theta$.

В этом случае пределы интегрирования будут изменяться от -1 до 1

$$\int_0^\pi (1+3\cos^2 \theta) \sin \theta d\theta = \int_{-1}^1 (1+3t^2) dt = \left(t + t^3 \right) \Big|_{-1}^1 = 4.$$

Интеграл по dr вычислим по формуле, приведенной в приложении 21. В итоге получим:

$$\frac{2mA^2\Gamma(2\gamma+1)}{(2\lambda)^3}=1,$$

откуда

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

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

Вычислим интегралы в выражении для форм-фактора налетающего водородоподобного иона, электрон которого находится в состоянии $2p_{3/2}$ при значении магнитного квантового числа $m = \frac{1}{2}$

$$F(g) = \frac{(2\lambda)^3}{8\pi\Gamma(2\gamma+1)} (2\lambda)^{2(\gamma-1)} \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^\infty r^{2\gamma} \exp(-2\lambda r) dr \times \\ \times \int_0^\pi (1+3\cos^2\theta) \exp(-igr\cos\theta) \sin\theta d\theta.$$

Для вычисления внутреннего интеграла используем замену $t = -\cos\theta$, $dt = \sin\theta d\theta$. Теперь пределы интегрирования будут изменяться от -1 до 1 :

$$\int_0^\pi (1+3\cos^2\theta) \exp(-igr\cos\theta) \sin\theta d\theta = \int_{-1}^1 (1+3t^2) \exp(igrt) dt = \\ = \int_{-1}^1 \exp(igrt) dt + 3 \int_{-1}^1 t^2 \exp(igrt) dt.$$

Интеграл во втором слагаемом рассматривался в приложении 18.

$$\int_{-1}^1 t^2 \exp igrt dt = \frac{2\sin gr}{gr} + \frac{4\cos gr}{gr^2} - \frac{4\sin gr}{gr^3}.$$

Теперь интеграл по $d\theta$ равен

$$\begin{aligned}
& \int_0^\pi (1 + 3 \cos^2 \theta) \exp(-igr \cos \theta) \sin \theta d\theta = \\
& = \frac{2 \sin(gr)}{gr} + \frac{6 \sin(gr)}{gr} + \frac{12 \cos(gr)}{(gr)^2} - \frac{12 \sin(gr)}{(gr)^3} = \\
& = \frac{8 \sin(gr)}{gr} + \frac{12 \cos(gr)}{(gr)^2} - \frac{12 \sin(gr)}{(gr)^3}.
\end{aligned}$$

Интеграл по dr переписывается в виде

$$\begin{aligned}
& \int_0^\infty r^{2\gamma} \left(\frac{8 \sin(gr)}{gr} + \frac{12 \cos(gr)}{(gr)^2} - \frac{12 \sin(gr)}{(gr)^3} \right) \exp(-2\lambda r) dr = \\
& = \frac{8}{g} \int_0^\infty r^{2\gamma-1} \exp(-2\lambda r) \sin(gr) dr + \frac{12}{g^2} \int_0^\infty r^{2\gamma-2} \exp(-2\lambda r) \cos(gr) dr - \\
& \quad - \frac{12}{g^3} \int_0^\infty r^{2\gamma-3} \exp(-2\lambda r) \sin(gr) dr.
\end{aligned}$$

Интеграл от слагаемых с синусом рассматривался выше (см. приложение 22).

Интеграл от слагаемого с косинусом согласно [17]

$$\int_0^\infty x^{p-1} \exp(-ax) \cos(mx) = \frac{\Gamma(p) \cos(p\theta)}{(a^2 + m^2)^{\frac{p}{2}}},$$

где $p, a, m > 0$, $\sin \theta = \frac{m}{r}$, $\cos \theta = \frac{a}{r}$, $r = \sqrt{a^2 + m^2}$, $\theta = \arctan\left(\frac{m}{a}\right)$. Теперь

выражение для форм-фактора запишется в форме

$$\begin{aligned}
F_g = & \frac{2\lambda^{2\gamma+1}}{g\Gamma(2\gamma+1) \sqrt{2\lambda^2 + g^2}^\gamma} \left\{ 2\Gamma(2\gamma) \sin 2\gamma\theta + \right. \\
& \left. + \frac{3}{g} \Gamma(2\gamma-1) \sqrt{2\lambda^2 + g^2} \cos 2\gamma\theta - \frac{3}{g^2} \Gamma(2\gamma-2) \sqrt{2\lambda^2 + g^2} \sin 2\gamma\theta \right\},
\end{aligned}$$

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

ПРИЛОЖЕНИЕ 26

Вычисление нормировочного коэффициента волновой функции уравнения Дирака водородоподобного иона, электрон которого

находится в состоянии $2p_{3/2}$, $m = \frac{3}{2}$

Волновая функция налетающего водородоподобного иона, электрон которого находится в состоянии $2p_{3/2}$ при значении магнитного квантового числа $m = \frac{3}{2}$:

$$\psi = \sqrt{\frac{3}{8\pi}} A (2\lambda r)^{\gamma-1} \exp(-\lambda r) \begin{pmatrix} -i\sqrt{m+\varepsilon} \sin \theta \exp(i\varphi) \\ 0 \\ \sqrt{m-\varepsilon} \cos \theta \sin \theta \exp(i\varphi) \\ \sqrt{m-\varepsilon} \sin^2 \theta \exp(2i\varphi) \end{pmatrix}.$$

Определим произведение $\psi^+ \psi$

$$\psi^+ \psi = \frac{3}{8\pi} A^2 (2\lambda r)^{2(\gamma-1)} \exp(-2\lambda r) 2m \sin^2 \theta.$$

Произведем нормировку волновой функции на единицу

$$\frac{3}{8\pi} A^2 2m (2\lambda)^{2(\gamma-1)} \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^\infty r^{2\gamma} \exp(-2\lambda r) dr \int_0^\pi \sin^2 \theta \sin \theta d\theta = 1.$$

Интеграл по $d\theta$ вычислим, произведя замену $t = -\cos \theta$, $dt = \sin \theta d\theta$.

Используя основное тригонометрическое тождество, получим $\sin^2 \theta = 1 - t^2$. В этом случае пределы интегрирования будут изменяться от -1 до 1 :

$$\int_0^\pi \sin^2 \theta \sin \theta d\theta = \int_{-1}^1 (1 - t^2) dt = \left(t - \frac{t^3}{3} \right) \Big|_{-1}^1 = \frac{4}{3}.$$

Интеграл по dr вычислялся в приложении 21. Теперь получаем:

$$\frac{2mA^2\Gamma(2\gamma+1)}{(2\lambda)^3}=1,$$

откуда

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

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

Определим форм-фактор налетающего водородоподобного иона, электрон которого находится в состоянии $2p_{3/2}$ при значении магнитного квантового числа $m = \frac{3}{2}$:

$$\begin{aligned} F(g) &= \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^\infty r^2 dr \int_0^\pi \psi^+ \psi \exp(-igr \cos \theta) \sin \theta d\theta = \\ &= \frac{3(2\lambda)^{2\gamma+1}}{8\pi\Gamma(2\gamma+1)} \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^\infty r^{2\gamma} \exp(-2\lambda r) dr \int_0^\pi \sin^2 \theta \exp(-igr \cos \theta) \sin \theta d\theta. \end{aligned}$$

Для вычисления внутреннего интеграла воспользуемся заменой, что и при нормировке волновой функции (см. приложение 26):

$$\begin{aligned} \int_0^\pi \sin^2 \theta \exp(-igr \cos \theta) \sin \theta d\theta &= \int_{-1}^1 (1-t^2) \exp(igt) dt = \\ &= \int_{-1}^1 \exp(igt) dt - \int_{-1}^1 t^2 \exp(igt) dt. \end{aligned}$$

Полученные интегралы вычислялись в приложении 25. Окончательно получим:

$$\int_0^\pi \sin^2 \theta \exp(-igr \cos \theta) \sin \theta d\theta = -\frac{4 \cos(gr)}{(gr)^2} + \frac{4 \sin(gr)}{(gr)^3}.$$

Теперь интеграл по dr перепишется в виде:

$$\begin{aligned} & \int_0^{\infty} r^{2\gamma} \left(-\frac{4\cos(gr)}{(gr)^2} + \frac{4\sin(gr)}{(gr)^3} \right) \exp(-2\lambda r) dr = \\ & = -\frac{4}{g^2} \int_0^{\infty} r^{2\gamma-2} \exp(-2\lambda r) \cos(gr) dr + \frac{4}{g^3} \int_0^{\infty} r^{2\gamma-3} \exp(-2\lambda r) \sin(gr) dr. \end{aligned}$$

После интегрирования по dr (см. приложения 22 и 25) выражение для фактора $F(g)$ запишется в форме

$$\begin{aligned} F(g) &= \frac{3}{g^2} \frac{2\lambda^{2\gamma+1}}{\Gamma(2\gamma+1) \sqrt{2\lambda^2 + g^2}^{\gamma-\frac{1}{2}}} \times \\ & \times \left(-\Gamma(2\gamma-1) \cos(2\gamma-1)\theta + \frac{1}{g} \Gamma(2\gamma-2) \sqrt{2\lambda^2 + g^2} \sin(2\gamma-2)\theta \right), \end{aligned}$$

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

ПРИЛОЖЕНИЕ 28

Вычисление коммутаторов для операторов координаты и импульса

Вычислим коммутатор, полученный для оператора координаты

$$\begin{aligned}\hat{r}\varphi &= \frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \hat{r}] \varphi = \frac{i}{\hbar} (\hat{H}\hat{r} - \hat{r}\hat{H}) \varphi = \frac{i}{\hbar} \left(\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + U \right) \hat{r} \varphi - \hat{r} \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + U \right) \varphi \right) = \\ &= \frac{i}{\hbar} \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta (\hat{r} \varphi) + \hat{r} \frac{\hbar^2}{2m} \Delta \varphi \right).\end{aligned}$$

Не сложно показать, что

$$\Delta (\hat{r} \varphi) = \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) (\vec{i}x + \vec{j}y + \vec{k}z) \varphi = 2\nabla \varphi + \vec{r} \Delta \varphi.$$

Таким образом

$$\hat{r}\varphi = \frac{i}{\hbar} \left(-\frac{\hbar^2}{2m} (2\nabla \varphi + \vec{r} \Delta \varphi) + \hat{r} \frac{\hbar^2}{2m} \Delta \varphi \right) = -i \frac{\hbar}{m} \nabla \varphi$$

или в операторной форме

$$\hat{r} = -i \frac{\hbar}{m} \nabla.$$

Учитывая, что $\hat{p} = -i\hbar \nabla$ — оператор импульса, окончательно запишем

$$\hat{r} = \frac{\hat{p}}{m}.$$

Перейдем к вычислению коммутатора, полученного для оператора импульса

$$\begin{aligned}\hat{\vec{p}}\varphi &= \frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \hat{\vec{p}}] \varphi = \frac{i}{\hbar} (\hat{H}\hat{\vec{p}}\varphi - \hat{\vec{p}}\hat{H}\varphi) = \\ &= \frac{i}{\hbar} \left(\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + U \right) (-i\hbar \nabla) \varphi - (-i\hbar \nabla) \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + U \right) \varphi \right)\end{aligned}$$

Понятно, что $\Delta \nabla \varphi = \nabla \Delta \varphi$. Теперь имеем

$$\hat{\vec{p}}\varphi = \frac{i}{\hbar} (-i\hbar U \nabla \varphi + i\hbar \nabla (U \varphi)).$$

Известно, что $\nabla (U \varphi) = U \nabla \varphi + \varphi \nabla U$. Теперь последнее выражение запишется

в виде

$$\hat{\vec{p}}\varphi = -\varphi \nabla U,$$

что соответствует операторной форме

$$\hat{\vec{p}} = -\nabla U.$$

ПРИЛОЖЕНИЕ 29

Система уравнений для средних квадратов квантовых флуктуаций операторов координаты и импульса

Определим средний квадрат квантовых флуктуаций оператора координаты $\frac{d}{dt}\langle\P|(\delta\hat{x})^2|\Psi\rangle$ вдоль классической траектории движения в плоскостных каналах кристалла

$$\begin{aligned}\frac{d}{dt}\langle\P|(\delta\hat{x})^2|\Psi\rangle &= \frac{d}{dt} \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^* (\delta\hat{x})^2 \Psi dx = \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^* \left[\frac{d}{dt} (\delta\hat{x} \delta\hat{x}) \right] \Psi dx = \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^* \left(\frac{d(\delta\hat{x})}{dt} \delta\hat{x} + \delta\hat{x} \frac{d(\delta\hat{x})}{dt} \right) \Psi dx = \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^* \left(\frac{d(\delta\hat{x})}{dt} \delta\hat{x} \right) \Psi dx + \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^* \left(\delta\hat{x} \frac{d(\delta\hat{x})}{dt} \right) \Psi dx.\end{aligned}$$

С помощью системы уравнений (5.1.4) далее запишем

$$\begin{aligned}\frac{d}{dt}\langle\P|(\delta\hat{x})^2|\Psi\rangle &= \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^* \left(\frac{1}{m} \delta\hat{p}_x \delta\hat{x} \right) \Psi dx + \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^* \left(\delta\hat{x} \frac{1}{m} \delta\hat{p}_x \right) \Psi dx = \\ &= \frac{2}{m} \left[\frac{(\langle\P|\delta\hat{p}_x \delta\hat{x}|\Psi\rangle + \langle\P|\delta\hat{x} \delta\hat{p}_x|\Psi\rangle)}{2} \right].\end{aligned}$$

Аналогично строятся еще два уравнения:

$$\begin{aligned}
& \frac{d}{dt} \left[\frac{(\langle \Psi | \delta \hat{p}_x \delta \hat{x} | \Psi \rangle + \langle \Psi | \delta \hat{x} \delta \hat{p}_x | \Psi \rangle)}{2} \right] = \\
& = \frac{1}{2} \left[\frac{d}{dt} \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^* \delta \hat{p}_x \delta \hat{x} \Psi dx + \frac{d}{dt} \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^* \delta \hat{x} \delta \hat{p}_x \Psi dx \right] = \\
& = \frac{1}{2} \left[\int_{-\infty}^{\infty} \Psi^* \left(\frac{d(\delta \hat{p}_x)}{dt} \delta \hat{x} + \frac{d(\delta \hat{x})}{dt} \delta \hat{p}_x \right) \Psi dx + \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^* \left(\frac{d(\delta \hat{x})}{dt} \delta \hat{p}_x + \frac{d(\delta \hat{p}_x)}{dt} \delta \hat{x} \right) \Psi dx \right] = \\
& = \frac{1}{2} \left[\int_{-\infty}^{\infty} \Psi^* \left(-U_{xx} (\delta \hat{x})^2 + \frac{1}{m} (\delta \hat{p}_x)^2 \right) \Psi dx + \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^* \left(\frac{1}{m} (\delta \hat{p}_x)^2 - U_{xx} (\delta \hat{x})^2 \right) \Psi dx \right] = \\
& = \frac{1}{m} \langle \Psi | (\delta \hat{p}_x)^2 | \Psi \rangle - U_{xx} \langle \Psi | (\delta \hat{x})^2 | \Psi \rangle,
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\frac{d}{dt} \langle \Psi | (\delta \hat{p}_x)^2 | \Psi \rangle &= \frac{d}{dt} \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^* (\delta \hat{p}_x)^2 \Psi dx = \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^* \left[\frac{d}{dt} (\delta \hat{p}_x \delta \hat{p}_x) \right] \Psi dx = \\
&= \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^* \left(\frac{d(\delta \hat{p}_x)}{dt} \delta \hat{p}_x + \delta \hat{p}_x \frac{d(\delta \hat{p}_x)}{dt} \right) \Psi dx = \\
&= -U_{xx} \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^* (\delta \hat{x} \delta \hat{p}_x) \Psi dx - U_{xx} \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^* (\delta \hat{p}_x \delta \hat{x}) \Psi dx = \\
&= -2U_{xx} \left[\frac{(\langle \Psi | \delta \hat{x} \delta \hat{p}_x | \Psi \rangle + \langle \Psi | \delta \hat{p}_x \delta \hat{x} | \Psi \rangle)}{2} \right].
\end{aligned}$$

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

Вычислим коррелятор $(\langle \Psi | \delta \hat{x} \delta \hat{p}_x | \Psi \rangle + \langle \Psi | \delta \hat{p}_x \delta \hat{x} | \Psi \rangle)$ для волновых функций минимизирующих соотношение неопределенностей Гейзенберга. Это условие достигается в волновых пакетах, описываемых функциями вида [2]

$$\Psi(x) = \frac{1}{(2\pi)^{\frac{1}{4}} \sqrt{\delta x}} \exp \left(\frac{i}{\hbar} p_0 x - \frac{x^2}{4(\delta x)^2} \right),$$

где p_0 и δx — постоянные. Волновая функция в импульсном представлении имеет вид

$$\Psi(p_x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} \Psi(x) \exp \left(-\frac{i}{\hbar} p_x x \right) dx.$$

Вычисление последнего интеграла [3] приведет к функции вида

$$\begin{aligned} \Psi(p_x) &= \frac{1}{(2\pi)^{\frac{3}{4}} \sqrt{\hbar \delta x}} \int_{-\infty}^{\infty} \exp \left(\frac{i}{\hbar} (p_0 - p_x) x - \frac{x^2}{4(\delta x)^2} \right) dx = \\ &= \left(\frac{2}{\pi} \right)^{\frac{1}{4}} \frac{\sqrt{\delta x}}{\sqrt{\hbar}} \exp \left(-\frac{(p_0 - p_x)^2 (\delta x)^2}{\hbar^2} \right). \end{aligned}$$

По определению

$$\delta \hat{x} = \hat{x} - x.$$

Определим среднее значение оператора координаты x

$$x = \langle \Psi(x) | \hat{x} | \Psi(x) \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^*(x) \hat{x} \Psi(x) dx.$$

Комплексно-сопряженная волновая функция, зависящая от координаты, запишется в виде

$$\Psi^*(x) = \frac{1}{(2\pi)^{\frac{1}{4}} \sqrt{\delta x}} \exp\left(-\frac{i}{\hbar} p_0 x - \frac{x^2}{4(\delta x)^2}\right),$$

оператор координаты равен самой координате

$$\hat{x} = x,$$

поэтому имеем

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

Так как подынтегральная функция нечетная, то интеграл в указанных пределах равен нулю

$$x = \langle \Psi | \hat{x} | \Psi \rangle = 0.$$

Таким образом

$$\delta \hat{x} = \hat{x}.$$

Аналогично определим среднее значение оператора импульса. Вычисления произведем в импульсном пространстве

$$\begin{aligned} p_x &= \langle \Psi(p_x) | \hat{p}_x | \Psi(p_x) \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^*(p_x) p_x \Psi(p_x) dp_x = \\ &= \sqrt{\frac{2}{\pi}} \frac{\delta x}{\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} p_x \exp\left(-\frac{2(p_0 - p_x)^2 (\delta x)^2}{\hbar^2}\right) dp_x. \end{aligned}$$

Введем новую переменную $t = p_0 - p_x$, $dt = -dp_x$

$$\begin{aligned} p_x &= -\sqrt{\frac{2}{\pi}} \frac{\delta x}{\hbar} \int_{\infty}^{-\infty} (p_0 - t) \exp\left(-\frac{2t^2 (\delta x)^2}{\hbar^2}\right) dt = \\ &= \sqrt{\frac{2}{\pi}} \frac{\delta x}{\hbar} \left(p_0 \int_{-\infty}^{\infty} \exp\left(-\frac{2t^2 (\delta x)^2}{\hbar^2}\right) dt - \int_{-\infty}^{\infty} t \exp\left(-\frac{2t^2 (\delta x)^2}{\hbar^2}\right) dt \right). \end{aligned}$$

Интеграл в первом слагаемом равен [3]

$$\int_{-\infty}^{\infty} \exp\left(-\frac{2t^2(\delta x)^2}{\hbar^2}\right) dt = 2 \int_0^{\infty} \exp\left(-\frac{2t^2(\delta x)^2}{\hbar^2}\right) dt = \sqrt{\frac{\pi}{2}} \frac{\hbar}{\delta x}.$$

Таким образом, окончательно запишем

$$p_x = p_0.$$

Теперь флуктуация оператора импульса определяется как

$$\delta \hat{p}_x = \hat{p}_x - p_x = \hat{p}_x - p_0.$$

Рассматриваемый коррелятор переписывается в виде

$$\begin{aligned} & \langle \Psi(x) | \delta \hat{x} \delta \hat{p}_x | \Psi(x) \rangle + \langle \Psi(x) | \delta \hat{p}_x \delta \hat{x} | \Psi(x) \rangle = \\ & = \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^*(x) (\delta \hat{x} \delta \hat{p}_x) \Psi(x) dx + \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^*(x) (\delta \hat{p}_x \delta \hat{x}) \Psi(x) dx = \\ & = \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^*(x) (x(\hat{p}_x - p_0) + (\hat{p}_x - p_0)x) \Psi(x) dx = \\ & = \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^*(x) (x\hat{p}_x + \hat{p}_x x - 2xp_0) \Psi(x) dx. \end{aligned}$$

Рассмотрим в отдельности каждое слагаемое. Вычислим первый коррелятор

$$\begin{aligned} & \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^*(x) x \hat{p}_x \Psi(x) dx = \\ & = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\delta x} \int_{-\infty}^{\infty} x \exp\left(-\frac{i}{\hbar} p_0 x - \frac{x^2}{4(\delta x)^2}\right) \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \exp\left(\frac{i}{\hbar} p_0 x - \frac{x^2}{4(\delta x)^2}\right)\right) dx = \\ & = \frac{-i\hbar}{\sqrt{2\pi}\delta x} \int_{-\infty}^{\infty} x \left(\frac{i}{\hbar} p_0 - \frac{x}{2(\delta x)^2}\right) \exp\left(-\frac{x^2}{2(\delta x)^2}\right) dx = \\ & = \frac{-i\hbar}{\sqrt{2\pi}\delta x} \left(\frac{i}{\hbar} p_0 \int_{-\infty}^{\infty} x \exp\left(-\frac{x^2}{2(\delta x)^2}\right) dx - \frac{1}{2(\delta x)^2} \int_{-\infty}^{\infty} x^2 \exp\left(-\frac{x^2}{2(\delta x)^2}\right) dx\right). \end{aligned}$$

Первый интеграл в сумме равен нулю, так как подынтегральная функция нечетная. Подынтегральная функция во втором слагаемом четная, поэтому можем записать [3]

$$\int_{-\infty}^{\infty} x^2 \exp\left(-\frac{x^2}{2(\delta x)^2}\right) dx = 2 \int_0^{\infty} x^2 \exp\left(-\frac{x^2}{2(\delta x)^2}\right) dx = \sqrt{2\pi} (\delta x)^3.$$

Окончательно, рассматриваемый коррелятор равен

$$\int_{-\infty}^{\infty} \Psi^*(x) x \hat{p}_x \Psi(x) dx = \frac{i\hbar}{2}.$$

Далее вычислим

$$\begin{aligned} & \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^*(x) \hat{p}_x x \Psi(x) dx = \\ &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}\delta x} \int_{-\infty}^{\infty} \exp\left(-\frac{i}{\hbar} p_0 x - \frac{x^2}{4(\delta x)^2}\right) \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x} x \exp\left(\frac{i}{\hbar} p_0 x - \frac{x^2}{4(\delta x)^2}\right)\right) dx = \\ &= \frac{-i\hbar}{\sqrt{2\pi}\delta x} \int_{-\infty}^{\infty} \left(\exp\left(-\frac{x^2}{2(\delta x)^2}\right) + \left(\frac{i}{\hbar} p_0 x - \frac{x^2}{2(\delta x)^2}\right) \exp\left(-\frac{x^2}{2(\delta x)^2}\right)\right) dx. \end{aligned}$$

Выше все полученные интегралы были определены

$$\int_{-\infty}^{\infty} \Psi^*(x) \hat{p}_x x \Psi(x) dx = -\frac{i\hbar}{2}.$$

Определим последний коррелятор

$$-2p_0 \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^*(x) x \Psi(x) dx = -2p_0 \frac{1}{\sqrt{2\pi}(\delta x)^{\frac{3}{2}}} \int_{-\infty}^{\infty} x \exp\left(-\frac{x^2}{2(\delta x)^2}\right) dx = 0.$$

Итак рассматриваемый коррелятор $\langle \Psi(x) | \delta \hat{x} \delta \hat{p}_x | \Psi(x) \rangle + \langle \Psi(x) | \delta \hat{p}_x \delta \hat{x} | \Psi(x) \rangle$ равен нулю

$$\begin{aligned} & \langle \Psi(x) | \delta \hat{x} \delta \hat{p}_x | \Psi(x) \rangle + \langle \Psi(x) | \delta \hat{p}_x \delta \hat{x} | \Psi(x) \rangle = \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^*(x) (x \hat{p}_x + \hat{p}_x x - 2xp_0) \Psi(x) dx = \frac{i\hbar}{2} - \frac{i\hbar}{2} - 0 = 0. \end{aligned}$$