

УДК 530.1.19

СПЕКТРАЛЬНЫЙ МЕТОД В ТЕОРИИ ЯВЛЕНИЯ КАНАЛИРОВАНИЯ БЫСТРЫХ ЗАРЯЖЕННЫХ ЧАСТИЦ В КРИСТАЛЛЕ

А.В. Козлов¹, Н.Ф. Шульга², В.А. Черкасский²

¹⁾ Харьковский национальный университет им. В.Н. Каразина

²⁾ Институт теоретической физики имени А.И. Ахиезера

Национальный научный центр «Харьковский физико-технический институт»

ул. Академическая 1, Харьков, 61108, Украина

E-mail: shulga@kipt.kharkov.ua

Поступила в редакцию 24 февраля 2010 г.

При каналировании быстрых заряженных частиц в кристалле существенными могут быть квантовые эффекты во взаимодействии частицы с полем кристаллической решетки. Показана возможность использования спектрального метода для определения квантовых характеристик процесса взаимодействия частицы с кристаллом при каналировании. На основе данного метода развита процедура вычисления уровней поперечного движения при плоскостном каналировании и рассмотрена задача о взаимодействии волнового пакета с потенциальным барьером, образованным потенциалом кристаллической плоскости.

КЛЮЧЕВЫЕ СЛОВА: каналирование, спектральный метод, тунелирование, квантовые эффекты при каналировании.

SPECTRAL METHOD IN THEORY OF FAST CHARGED PARTICLES CHANNELING PHENOMENA IN A CRYSTAL

A.V. Kozlov¹, N.F. Shul'ga², V.A. Cherkaskiy²

¹⁾ Kharkov National University of V.N. Karazin

²⁾ Akhiezer Institute for Theoretical Physics

National Scientific Center "Kharkov Institute of Physics and Tecnology"

Academicheskaya Str. 1, 61108 Kharkov, Ukraine

Quantum effects in interaction of particle and field can be essential attached to the channeling of fast charged particles in a crystal. There was shown possibility of using spectral method for defining quantum characteristics of interaction of particle with crystal in the presence of channeling process. On the base of this method there was developed procedure for defining eigenlevels of transversal motion in the presence of flat channeling and there was considered the problem of interaction between the wave packet and potential barrier, made up by potential of crystalline plane.

KEY WORDS: channeling, spectral method, tunneling, quantum effects in the presence of channeling.

СПЕКТРАЛЬНИЙ МЕТОД В ТЕОРІІ ЯВИЩ КАНАЛЮВАННЯ ШВИДКИХ ЗАРЯДЖЕНИХ ЧАСТИНОК У КРИСТАЛІ

О.В. Козлов¹, М.Ф. Шульга², В.О. Черкасский²

¹⁾ Харківський національний університет ім. В.Н. Каразіна

²⁾ Інститут теоретичної фізики імені О.І. Ахієзера

Національний науковий центр «Харківський фізико-технічний інститут»

вул. Академічна 1, Харків, 61108, Україна

При каналюванні швидких заряджених частинок у кристалі істотними можуть бути квантові ефекти у взаємодії частинки з полем кристалічних ґраток. Вказана можливість використання спектрального методу для пошуку квантових характеристик процесу взаємодії частинки з кристалом при каналюванні. На основі даного методу розвинена процедура підрахунку рівнів поперечної енергії при площинному та осьовому каналюванні та розглянена задача про взаємодію хвильового пакета з потенціальним бар'єром, утвореним потенціалом кристалічної площини.

КЛЮЧОВІ СЛОВА: каналювання, спектральний метод, тунелювання, квантові ефекти при каналюванні

Движение быстрой заряженной частицы в кристалле вблизи одной из кристаллических осей или плоскостей определяется, в основном, непрерывным потенциалом кристаллической решетки – потенциалом кристалла, усредненным вдоль оси или плоскости, вблизи которых происходит движение. В таком поле сохраняется составляющая импульса частицы, параллельная кристаллической оси или плоскости. При этом задача о движении частицы в кристалле сводится к задаче о ее движении в поперечной плоскости [1,2]. Непрерывный потенциал кристалла содержит как потенциальные ямки, так и потенциальные барьеры, в поле которых частица может совершать как финитное (каналирование), так и инфинитное (надбарьерное) движение. При движении частицы в таком поле значительными могут быть квантовые эффекты во взаимодействии. Потенциальные ямки в рассматриваемой задаче имеют довольно сложный вид, поэтому требуется развитие методов, позволяющих находить уровни поперечного движения, соответствующие им волновые функции и другие квантовые характеристики взаимодействия частицы с непрерывным потенциалом кристаллических осей

и плоскостей. Существенным при этом является то, что число уровней энергии поперечного движения частицы в таких потенциальных ямках зависит от величины полной энергии частицы.

Целью настоящей работы является анализ возможностей использования в задачах о каналировании быстрых заряженных частиц в кристалле так называемого спектрального метода определения собственных значений оператора Гамильтона в уравнении Шредингера [3]. Спектральный метод был применен и развит в оптике для определения резонансных частот в волноводах и оптических жилах [3]. В работе [4] он был применен в задачах ядерной физики, связанных с описанием квантовых эффектов при движении частицы в многоямных потенциалах. На основе этого метода были рассмотрены также квантовые проявления явления динамического хаоса в задачах ядерной физики. В настоящей работе рассматривается возможность применения данного метода для определения квантовых характеристик процесса взаимодействия быстрых частиц с кристаллом при каналировании. Рассмотрен простейший вариант использования данного метода в задаче о плоскостном каналировании частицы в отдельной потенциальной ямке, образованной непрерывным потенциалом кристаллической плоскости. На основе спектрального метода развита процедура вычисления положений уровней поперечной энергии при плоскостном каналировании. На основе данного метода также рассмотрена задача о проникновении волнового пакета через потенциальный барьер, образованный непрерывным потенциалом кристаллической плоскости. Отмечается также возможность применения данного метода для анализа финитного и инфинитного движения частицы в периодическом потенциале кристаллических плоскостей атомов и при аксиальном каналировании частиц, когда потенциальные ямки в поперечной плоскости являются двумерными.

ПЛОСКОСТНОЕ КАНАЛИРОВАНИЕ БЫСТРЫХ ЗАРЯЖЕННЫХ ЧАСТИЦ В КРИСТАЛЛАХ

Рассмотрим движение быстрой заряженной частицы в кристалле вблизи одной из кристаллографических плоскостей. Движение в этом случае определяется в основном непрерывным потенциалом кристаллической плоскости атомов [2], который представляет собой суммарный потенциал атомов кристалла, усредненный по координатам плоскости

$$U(x) = \frac{1}{L_y L_z} \sum_{n=1}^M \int u(\vec{r} - \vec{r}_n) dy dz, \quad (1)$$

где L_y, L_z - размеры кристаллографической плоскости, \vec{r}_n - радиус-вектор положения n -го атома, M - число атомов в кристалле, $u(\vec{r} - \vec{r}_n)$ - потенциал, создаваемый n -тым атомом, расположенным в точке с радиус-вектором \vec{r}_n . Функция $U(x)$ является периодической функцией координаты x , перпендикулярной кристаллической плоскости. Потенциал (1) можно записать в виде суммы потенциалов отдельных кристаллических плоскостей, с которыми взаимодействует частица

$$U(x) = \sum_n U_p(x - nd), \quad (2)$$

где d - расстояние между плоскостями, $U_p(x)$ - потенциал отдельной кристаллической плоскости. При этом задача о движении частицы в непрерывном поле кристаллических плоскостей сводится к задаче о ее движении в поле отдельной кристаллической плоскости. Рассмотрим вначале особенности взаимодействия частицы с потенциалом отдельной кристаллической плоскости. Непрерывный потенциал отдельной кристаллической плоскости атомов определяется следующей формулой

$$U_p(x) = \frac{1}{L_y L_z} \sum_n \int u(x - x_n, y - y_n, z - z_n) dy dz, \quad (3)$$

где x_n, y_n, z_n - координаты положений атомов кристаллической плоскости. Положения атомов в кристалле $\vec{r}_n = \vec{r}_n^0 + \vec{u}_n$ имеют некоторый разброс относительно равновесных положений \vec{r}_n^0 , где \vec{u}_n - флуктуация положения атома в решетке, связанная с тепловыми колебаниями атомов. Поэтому $U_p(x)$ должен быть усреднен по случайным значениям u_{xn} . Полагая для простоты, что распределение атомов по u_{xn} имеет гауссов вид со средним значением квадрата флуктуации величины u_{xn} , равным $\overline{u^2}$, легко показать, что

$$U_p(x) = \frac{1}{a_y a_z \sqrt{2\pi u^2}} \int du_x e^{-\frac{u_x^2}{2u^2}} \int dy dz u(x + u_x, y, z),$$

где a_y, a_z - расстояния между соседними атомами кристаллической плоскости вдоль соответствующих осей.

В простейшем случае, когда потенциал отдельного атома кристалла представляет собой экранированный потенциал Кулона и $\overline{u^2} = 0$, $U_p(x)$ имеет следующий вид

$$U_p(x) = \frac{2\pi Z|e|}{a_y a_z} R e^{-\frac{|x|}{R}},$$

где $Z|e|$ - заряд ядра атома кристалла, R – радиус экранировки потенциала атома. Учет тепловых колебаний атомов приводит к размытию потенциала плоскости в области значений $x \approx \sqrt{u^2}$. При этом непрерывный потенциал кристаллической плоскости с учетом тепловых колебаний является довольно сложной функцией координаты x . Поэтому при исследовании взаимодействия частицы с непрерывным потенциалом $U_p(x)$ часто используются аппроксимации этой функции функциями более простого вида. Хорошая аппроксимация непрерывного потенциала плоскости с учетом тепловых колебаний атомов, в частности, достигается функцией вида [9]

$$U(x) = \frac{U_0}{ch^2 \frac{x}{b}}. \quad (4)$$

Величины U_0, b выбираются из условия наилучшей аппроксимации потенциала плоскости функцией данного вида. Для плоскости (110) кристалла кремния, например, хорошая аппроксимация достигается при $|e|U_0 = 22,9 \text{ eV}$ и $b = 0,303 \text{ \AA}$ [2]. Для электрона такой потенциал образует потенциальную ямку в потенциальной энергии $eU(x)$ взаимодействия частицы с непрерывным потенциалом плоскости (4) (см. рис. 1). Для позитронов этот потенциал образует потенциальный барьер вдоль оси x .

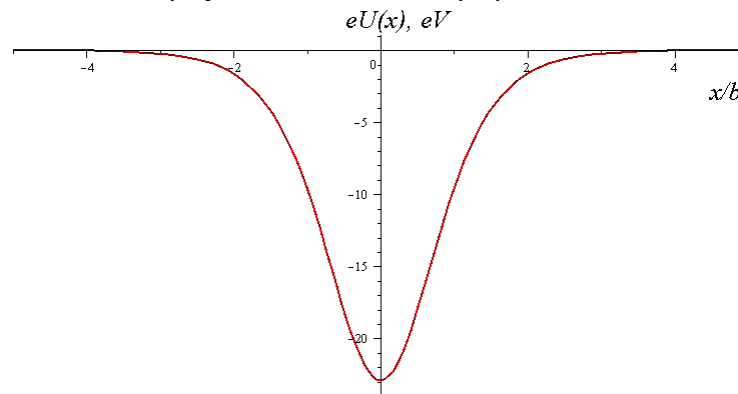


Рис. 1. График потенциальной энергии электрона в поле (4) одной кристаллической плоскости (110) кристалла кремния, находящегося при комнатной температуре.

При взаимодействии частицы большой энергии с потенциалом (4) существенными могут оказаться квантовые эффекты, связанные с наличием потенциальной ямки или потенциального барьера вдоль оси x . Действительно, уравнение Дирака для частицы, движущейся в поле (4) имеет следующий вид [5]

$$\{\gamma^\mu (i\hbar \partial_\mu - eA_\mu) - mc^2\} \Phi(t, \vec{r}) = 0, \quad A_\mu = (U_p(x), 0, 0, 0). \quad (5)$$

В таком поле сохраняется составляющая импульса частицы параллельная кристаллической плоскости. При этом волновая функция частицы в поле $U_p(x)$ может быть записана в виде

$$\Phi(\vec{r}, t) = \varphi(x, t) e^{-i(\vec{p}_\parallel \vec{r} - E_\parallel t)/\hbar},$$

где \vec{p}_\parallel - проекция вектора импульса частицы на плоскость (y, z) . В пренебрежении взаимодействием спин-поле в $\varphi(x, t)$ может быть выделен биспинор u , определяющий спиновые эффекты $\varphi(x, t) = \psi(x, t)u$. При этом функция $\psi(x, t)$ удовлетворяет уравнению, аналогичному уравнению Шредингера, с той лишь разницей, что вместо массы частицы в него входит соотношение E_\parallel / c^2 [2,6]

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(x, t) = \left\{ -\frac{\hbar^2}{2E_\parallel / c^2} \frac{d^2}{dx^2} + eU(x) \right\} \psi(x, t). \quad (6)$$

Для релятивистских электронов решения этого уравнения обладают уровнями поперечной энергии $\varepsilon_{\perp n}$, число которых растет пропорционально $\sqrt{E_\parallel}$. Причем при энергиях частицы порядка нескольких МэВ число этих уровней невелико. Для позитронов в этих условиях существенными могут быть эффекты, связанные с прохождением и отражением частицы от потенциального барьера.

Особый интерес представляет задача о движении волновых пакетов в поле (4). Анализ этого процесса позволяет получить многие квантовые характеристики взаимодействия частицы с полем (4), такие как уровни поперечной энергии, коэффициенты прохождения и отражения и др. Решение данной нестационарной задачи может быть осуществлено на основе так называемого спектрального метода, позволяющего проводить вычисления с полями сложного вида. Этот метод, кроме того, допускает обобщение на случай движения частицы в двумерном поле сложной конфигурации, что важно при анализе квантовых эффектов при аксиальном каналировании частицы в кристаллах. Ниже изложены основные положения спектрального метода и представлены результаты исследования квантовых эффектов при взаимодействии частицы с потенциалом (4) кристаллической плоскости.

СПЕКТРАЛЬНЫЙ МЕТОД РЕШЕНИЯ УРАВНЕНИЯ ШРЕДИНГЕРА

Спектральный метод предназначен для определения численными методами уровней энергии частицы в потенциальной ямке, образованной внешним полем $U(x)$. С этой целью вводится функция [3]

$$P_E = \frac{1}{T} \int_0^T dt \exp\left(\frac{iEt}{\hbar}\right) P(t) w(t) , \quad (7)$$

которая при $T \rightarrow \infty$ с точностью до множителя T^{-1} совпадает с Фурье-компонентой корреляционной

$$P(t) = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi_0^*(x) \psi(x, t) dx , \quad (8)$$

где $\psi(x, t)$ - решение уравнения (6), удовлетворяющее начальному условию $\psi(x, t=0) = \psi_0(x)$ и $w(t) = 1 - \cos(2\pi t/T)$. Важной особенностью функции P_E является то, что она содержит резкие максимумы при значениях энергии E , близких к собственным значениям оператора Гамильтона уравнения (6)

$$H = -\frac{\hbar^2}{2E_{\parallel}/c^2} \frac{d^2}{dx^2} + eU(x) .$$

Определение положений этих максимумов функции P_E и составляет основную задачу спектрального метода. Входящая в (7) функция $w(t)$ вводится для уменьшения погрешностей, связанных с конечностью величины T .

Для определения корреляционной функции (8) рассматривается движение локализованного волнового пакета в потенциальной ямке, образованной потенциалом $U_p(x)$. При этом решение уравнения (6) строится путем следующей итерационной процедуры.

Решение уравнения (6) в момент времени $t + \Delta t$ может быть выражено через волновую функцию ψ в момент времени t посредством следующего соотношения

$$\psi(x, t + \Delta t) = \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \Delta t H\right) \psi(x, t) . \quad (9)$$

Разбивая промежуток времени T на большое число малых интервалов времени Δt , решение уравнения (6) может быть найдено путем последовательных применений итерационной процедуры (9). Существенным при этом является то, что коммутатор входящих в (9) операторов $A = \frac{i\hbar}{2E_{\parallel}/c^2} \frac{d^2}{dx^2}$ и $B = -\frac{ieU(x)}{\hbar}$ отличен от нуля.

Для определения действия оператора эволюции на волновую функцию используется следующая формула

$$\exp[\Delta t(A+B)] = e^{\frac{\Delta t B}{2}} e^{\Delta t A} e^{\frac{\Delta t B}{2}} [1 + O(\Delta t^3)] . \quad (10)$$

Эта формула получена в пренебрежении коммутаторами более высокого порядка, чем коммутатор A и B , поэтому она справедлива с точностью до членов $\sim (\Delta t)^3$. Отметим что входящие в (10) экспоненты не содержат слагаемых $\sim (\Delta t)^2$. С тем чтобы показать это, запишем оператор (10) в виде

$$\exp[\Delta t(A+B)] = \exp\left[\Delta t\left(\frac{B}{2} + A + \frac{B}{2}\right)\right] \quad (11)$$

и воспользуемся следующим операторным соотношением (формула Зассенхауса) [7]

$$e^{\Delta t(C+D)} = e^{\Delta t C} e^{\Delta t D} e^{-\frac{1}{2}\Delta t^2[C,D]} e^{\frac{1}{6}\Delta t^3(2[D,[C,D]]+[C,[C,D]])} e^{\Delta t^4 \dots} ,$$

где $C=B/2$, $D=A+B/2$.

Выполнив аналогичную процедуру для оператора $e^{\Delta t D}$, находим с точностью до членов $\sim (\Delta t)^3$:

$$\exp\left\{-\frac{i}{\hbar}H\Delta t\right\} = e^{-\frac{i}{2\hbar}e^{U(x)\Delta t}} \exp\left[\frac{i\hbar\Delta t}{2E_{\parallel}/c^2} \frac{d^2}{dx^2}\right] e^{\frac{i}{2\hbar}e^{U(x)\Delta t}} + O(\Delta t^3). \quad (12)$$

Рассмотрим теперь действие оператора $\exp\left[i\zeta \frac{d^2}{dx^2}\right]$, где $\zeta = \frac{\hbar\Delta t}{2E_{\parallel}/c^2}$, на функцию $f(x,t) = e^{-\frac{iU(x)\Delta t}{2\hbar}} \psi(x,t)$. С этой целью воспользуемся следующим Фурье разложением $f(x,t)$:

$$f(x,t) = \int_{-\infty}^{+\infty} da e^{iax} F(a,t). \quad (13)$$

Действие оператора $\exp\left[i\zeta \frac{d^2}{dx^2}\right]$ на интеграл (13) сводится к умножению подынтегральной функции на $\exp(-i\zeta a^2)$:

$$\exp\left(i\zeta \frac{d^2}{dx^2}\right) f(x,t) = \int_{-\infty}^{+\infty} da \exp(-i\zeta a^2) e^{iax} F(a,t). \quad (14)$$

При рассмотрении движения локализованного волнового пакета в потенциальной ямке $U_p(x)$ в течении большого, но конечного времени T , можно ограничиться рассмотрением этого процесса в конечной области координат $-L/2 \leq x \leq L/2$, размер которой L велик по сравнению с размером потенциальной ямки и волнового пакета. Это позволяет существенно упростить процедуру численных расчетов функции (7) путем замены интеграла (8) на соответствующую сумму

$$P(t) = \Delta x \sum_{n=-\frac{N}{2}+1}^{\frac{N}{2}} \psi_0^*(x_n) \psi(x_n, t), \quad (15)$$

где $x_n = n\Delta x$, $\Delta x = L/N$, N – число разбиений интервала расстояний L . Иными словами, пространственная область $-L/2 \leq x \leq L/2$ разбивается на сетку, состоящую из большого числа малых участков размера $\Delta x = L/N$. На такой вычислительной сетке затем вычисляется корреляционная функция (15), при этом входящий в (13) интеграл может быть заменен на соответствующую сумму

$$f(x_n, t) = \Delta a \sum_{k=-\frac{N}{2}+1}^{\frac{N}{2}} e^{iakx_n} F(a_k, t). \quad (16)$$

Таким образом, численный метод вычисления функции (7) строится на вычислении интегралов (8) и (13) на заданной вычислительной сетке.

Отметим, что данный метод может быть применен также для анализа взаимодействия волновых пакетов с потенциальным барьером, в течении времени T , для которого движение пакета происходит в области $-L/2 \leq x \leq L/2$.

КВАНТОВЫЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ БЫСТРОЙ ЗАРЯЖЕННОЙ ЧАСТИЦЫ С НЕПРЕРЫВНЫМ ПОТЕНЦИАЛОМ КРИСТАЛЛИЧЕСКОЙ ПЛОСКОСТИ

Для отрицательно заряженных частиц потенциал (4) образует потенциальную ямку, число уровней в которой зависит от энергии частицы E_{\parallel} . Для определения положений этих уровней воспользуемся изложенным выше спектральным методом. С этой целью рассмотрим движение некоторого волнового пакета в данной потенциальной ямке и проведем анализ функции (7). Анализ проведем для простейшего случая движения в поле (4) волнового пакета, который в начальный момент времени представляет собой гауссов пакет, движущийся вдоль оси x ,

$$\psi_0(x) = \frac{1}{\sigma\sqrt{\pi}} \exp\left(-\frac{x^2}{2\sigma^2} + i\frac{p_{\perp}x}{\hbar}\right), \quad (17)$$

где σ – ширина пакета и p_{\perp} – поперечная составляющая импульса пакета. Величины σ и p_{\perp} в принципе могут быть произвольными, поскольку положение уровней энергии не зависит от выбора формы пакета. Выбор этих величин определяется только временем, необходимым для вычисления корреляционной функции с требуемой точностью. Значения σ и p_{\perp} в настоящей работе определяются из следующих условий. Будем

полагать, что ширина пакета мала по сравнению с шириной ямки ($\sigma < b$). Величину же p_{\perp} будем определять из условия, чтобы средняя энергия частицы в потенциальной ямке

$$\langle H \rangle = \frac{p_{\perp}^2}{2E_{\parallel}/c^2} + \frac{\hbar^2}{4\sigma^2 E_{\parallel}/c^2} + \int_{-\infty}^{+\infty} |\psi(x)|^2 U(x) dx \quad (18)$$

была мала по сравнению с глубиной ямки eU_0 . Приведем результаты вычисления функции (7) для электронов с энергией $E_{\parallel} = 22 \text{ MeV}$, для которых число уровней поперечной энергии E_{\perp} в потенциальной ямке (4) невелико.

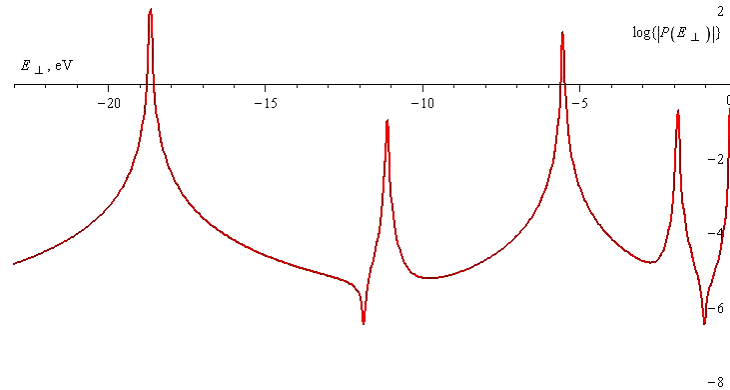


Рис. 2. Фурье-образ корреляционной функции (7) для потенциала (4) кристаллической плоскости (110).

Значения σ и p_{\perp} выбраны соответственно, $\sigma = 0,303 \text{ \AA}$ и $p_{\perp} = 932 \text{ eV}$. Результаты вычислений представлены на рис. 2. По оси ординат на этом рисунке отложено значение логарифма модуля функции (7). По оси абсцисс отложено значение энергии в потенциальной ямке.

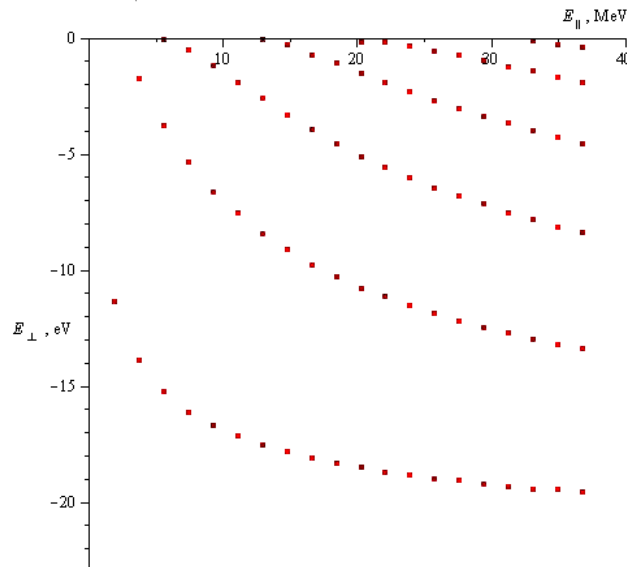


Рис. 3. Динамика энергетических уровней поперечного движения электрона, каналированного вдоль плоскости (110) кристалла кремния, с увеличением энергии частицы.

Результаты вычислений показывают, что при некоторых значениях E функция $P(E)$ имеет резкие максимумы. Ширины этих максимумов быстро уменьшаются с увеличением времени вычислений. При этом значения E , соответствующие максимумам функции $P(E)$ приближаются к собственным значениям энергии для частицы, движущейся в потенциальной ямке (4). В рассматриваемом случае, как показывает рис. 2 имеет место пять уровней энергии. Отметим, что положения этих уровней существенно зависят от энергии частицы E_{\parallel} . Кроме того, и полное число уровней в потенциальной ямке также зависит от E_{\parallel} . С тем, чтобы показать это, приведем результаты вычислений положения уровней для электрона в поле (4) в зависимости от энергии частицы E_{\parallel} (см. рис.3).

Приведенные результаты показывают, что с ростом E_{\parallel} в потенциальной ямке появляются новые уровни. Их возникновение обусловлено отщеплением от непрерывного спектра отдельных уровней и затягиванием их в потенциальную ямку. Этот эффект аналогичен эффекту возникновения новых уровней с ростом энергии

частицы в одномерном периодическом потенциале, рассмотренным в работе [6]. В последнем случае, однако, формирование уровней обусловлено затягиванием энергетических зон в потенциальную яму с ростом энергии частицы.

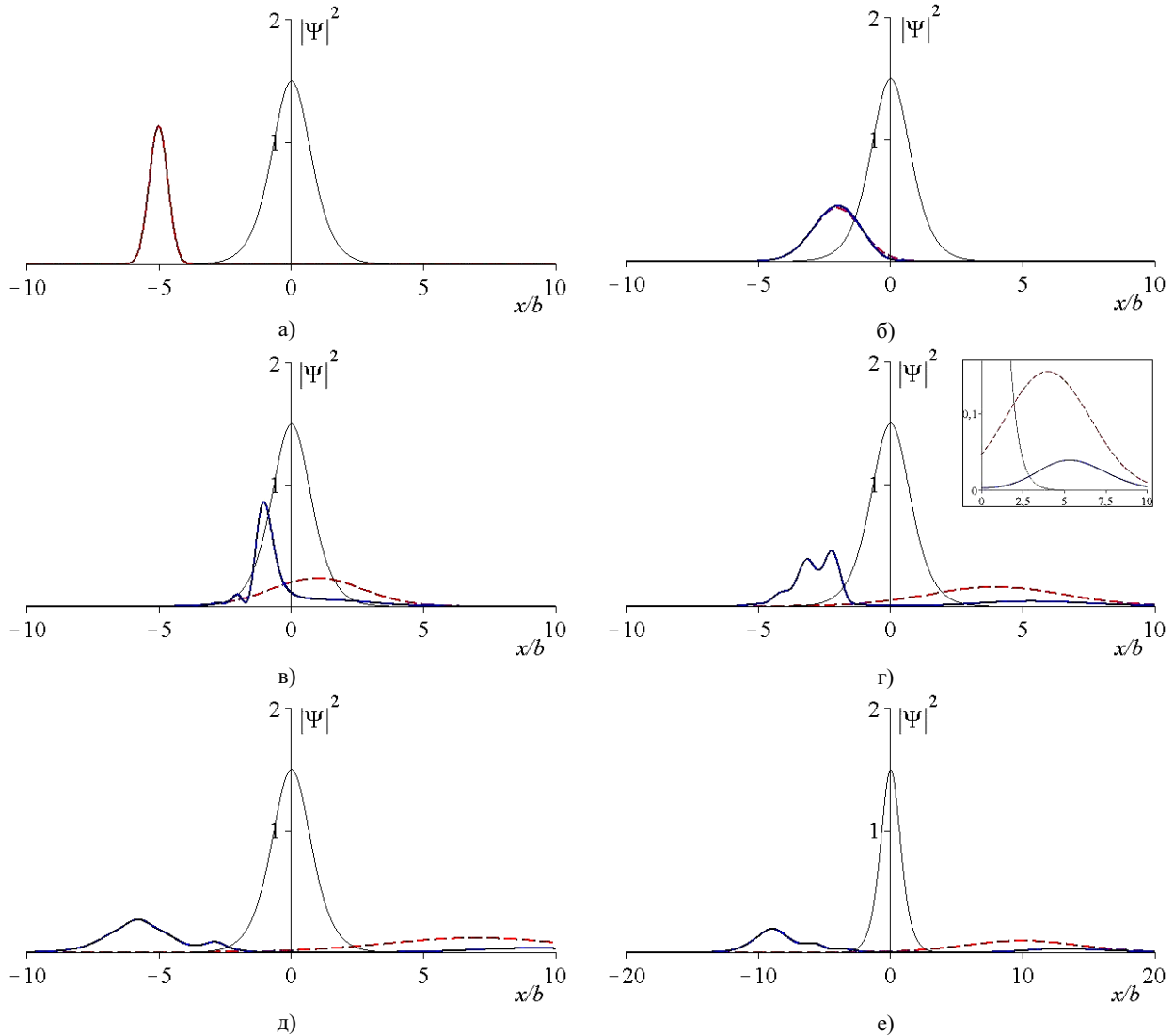


Рис. 4. Прохождение позитрона сквозь потенциал кристаллической плоскости (4) в последовательные моменты времени: толстые сплошные линии – распределение квадрата модуля волновой функции в текущий момент времени, пунктирная кривая – эволюция волнового пакета в свободном пространстве (при $U(x)=0$), тонкая сплошная линия – потенциал кристаллической плоскости (изображен схематически).

а - $t = 0$ сек.	г - $t = 6,24 \cdot 10^{-15}$ сек.
б - $t = 2,08 \cdot 10^{-15}$ сек.	д - $t = 8,33 \cdot 10^{-15}$ сек.
в - $t = 4,16 \cdot 10^{-15}$ сек.	е - $t = 10,41 \cdot 10^{-15}$ сек.

Для положительно заряженной частицы потенциал кристаллической плоскости образует потенциальный барьер. В результате мы приходим к задаче о взаимодействии волнового пакета с таким потенциальным барьером. Рассмотрение данной задачи также, как и задачи о движении волнового пакета в потенциальной яме, может быть проведено на основе спектрального метода. С тем, чтобы показать это, рассмотрим движение в поле (4) волнового пакета. В качестве начального состояния волнового пакета рассмотрим пакет вида (17), смещенный на относительно небольшое расстояние q_0 влево относительно потенциального барьера ($q_0 > b$):

$$\psi_0(x) = \frac{1}{\sigma\sqrt{\pi}} \exp\left(-\frac{(x-q_0)^2}{2\sigma^2} + i\frac{p_{\perp}x}{\hbar}\right). \quad (19)$$

Для описания движения такого пакета в поле (4) можно воспользоваться формулой (7) путем последовательных ее применений на интервале времен от $t_0 = 0$ до интересующего нас времени $t = T$. С этой целью разобьем интервал времени $0 < t < T$ на большое число малых промежутков времени Δt и на каждом из них воспользуемся формулами (10)-(12) для проведения итерационной процедуры (9).

На рис. 4 показана эволюция пакета (19) при его взаимодействии с потенциальным барьером. В качестве величин $E_{\parallel}, p_{\perp}, q_0, \sigma$ в вычислениях использованы следующие их значения

$E_{\parallel} = 35,7 \text{ MeV}, p_{\perp} = 32,48 \text{ KeV}, q_0 = -1,51 \text{ \AA}, \sigma = 0,15 \text{ \AA}$. Для таких значений параметров пакета среднее значение гамильтониана $\langle H \rangle = 16 \text{ eV}$ мало по сравнению с высотой потенциального барьера $U_{\text{max}} = 22,9 \text{ eV}$.

По оси ординат на рис.4 отложен квадрат модуля волновой функции в момент времени $t=0$ (пунктирная линия) и квадрат модуля волновой функции в последующие моменты времени (жирные линии). По оси абсцисс отложена координата x . На этом же рисунке тонкой линией схематически представлен потенциальный барьер, с которым взаимодействует волновой пакет.

При подлете пакета к потенциальному барьеру он слегка расплывается. Затем пакет модифицируется. Часть пакета проникает внутрь барьера и продолжает двигаться в направлении движения первоначального пакета, формируя затем прошедший через барьер пакет. Интенсивность этого пакета значительно меньше интенсивности первоначального пакета, что связано с ослаблением величины волновой функции внутри барьера.

Значительная часть падающего пакета отражается от барьера, образуя затем локализованный пакет отраженных волн, движущийся в направлении, противоположном направлению движения первоначального пакета.

На основе предложенного метода можно также определить коэффициенты отражения и прохождения через барьер. При этом коэффициент прохождения определяется интегрированием квадрата модуля волновой функции по области $x > 0$ после формирования прошедшего через барьер пакета. В рассматриваемом случае коэффициент прохождения равен 0,206 (предполагается, что интеграл от квадрата модуля волновой функции по всему пространству нормирован на единицу). Коэффициент же отражения представляет собой интеграл от квадрата модуля волновой функции по области $x < 0$ после формирования отраженного пакета. В рассматриваемом случае этот коэффициент равен 0,794.

Отметим, что аналогичная задача о взаимодействии с потенциальным барьером налетающего на него волнового пакета рассмотрена в работе [10]. В этой работе, однако, в отличие от настоящей работы, при рассмотрении эволюции волнового пакета, пренебрегалось некомутативностью входящих в гамильтониан операторов. Кроме того, потенциальный барьер, с которым взаимодействует пакет, предполагался близким к прямоугольному. Полученные в [10] результаты по прохождению и отражению от барьера близки к результатам, полученным нами. Вместе с тем имеется и существенное расхождение этих результатов в области, где потенциал отличен от нуля. А именно, полученные в [10] результаты показывают, что заметная часть пакета (порядка 10%) застревает на длительное время внутри потенциального барьера. В рассматриваемом нами методе такой эффект отсутствует: после взаимодействия пакета с потенциальным барьером, как показывают результаты наших вычислений, внутри барьера практически ничего не остается.

Возможные причины такого различия результатов связаны с использованием в [7] приближения, в котором пренебрегается коммутаторами операторов, а также с примененным методом для численных расчетов с потенциалом, имеющим скачки.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

При прохождении быстрых заряженных частиц через ориентированные кристаллы в условиях каналирования могут быть выполнены условия, при которых существенны квантовые эффекты во взаимодействии частиц с полями кристаллической решетки. В настоящей работе рассмотрена квантовомеханическая задача о взаимодействии частицы с непрерывным потенциалом отдельной кристаллической плоскости атомов в условиях плоскостного каналирования и надбарьерного ее движения по отношению к этой плоскости. Показана возможность использования в данной задаче спектрального метода определения собственных значений оператора Гамильтона. На основе этого метода разработана процедура вычисления уровней поперечного движения частицы в потенциальной ямке, образованной непрерывным потенциалом одной из кристаллических плоскостей атомов. Важнейшей особенностью рассматриваемой задачи является то, что число уровней поперечной энергии в такой потенциальной ямке быстро растет с ростом полной энергии частицы (число уровней поперечной энергии при плоскостном каналировании растет пропорционально корню квадратному от энергии частицы в МэВ'ах [2]). Это продемонстрировано в настоящей работе на основе спектрального метода. Полученные результаты указывают на возможность использования данного метода для анализа процедуры формирования новых уровней поперечного движения из непрерывного спектра на больших, но конечных промежутках времени пролета частицы через кристалл.

Преобразования, которые используются в спектральном методе, как показано в настоящей работе, могут быть использованы и в задачах, связанных с прохождением и отражением частиц от потенциального барьера. На основе этих преобразований рассмотрено прохождение волнового пакета через потенциальный барьер. Показано, что после взаимодействия локализованного волнового пакета с потенциальным барьером этот пакет расщепляется на два локализованных пакета, представляющих собой пакеты прошедших и отраженных волн. При этом удается проследить все стадии формирования этих пакетов в рассматриваемой задаче и определить коэффициенты отражения и прохождения частиц через барьер.

При аксиальном каналировании финитное движение частицы происходит в двумерных потенциальных ямках, образованных непрерывным потенциалом цепочек атомов кристалла, оси которых расположены периодически в поперечной плоскости [2]. Важной особенностью такого движения является возможность явления динамического хаоса при рассмотрении движения на основе классической механики [2]. При этом возникает проблема квантового хаоса: как будут вести себя квантовые характеристики взаимодействия частицы с двумерным непрерывным потенциалом цепочек атомов кристалла в условиях, когда при классическом рассмотрении данной задачи возможно явление динамического хаоса. Для анализа этой проблемы требуется развитие методов, позволяющих определять численными методами огромное (тысячи и более) число собственных значений оператора Гамильтона. Спектральный метод показал большую эффективность при рассмотрении аналогичных проблем в задачах ядерной физики [4]. Приведенные выше результаты позволяют надеяться на возможность использования спектрального метода и для анализа проблем квантового хаоса в задаче об аксиальном каналировании быстрых заряженных частиц в кристаллах.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Линдхард Й. Влияние кристаллической решетки на движение быстрых заряженных частиц // УФН. – 1969. – Т. 99. – С. 249-296.
2. Ахиезер А.И., Шульга Н.Ф. Электродинамика высоких энергий в веществе.- М.: Наука, 1993. - 343 с.
3. Feit M.D., Fleck J.A., Steiger A. Solution of the Schrodinger Equation by a Spectral Method // Journal of Comp. Phys. – 1982. –Vol. 47. - P. 412-433.
4. Болотин Ю.Л., Черкасский В.А. Энергетические спектры: от героического прошлого к хаотическому настоящему. Сборник научных трудов «Проблемы современной науки».- Харьков: ННЦ ХФТИ. – 2008. - С. 143-173.
5. Ахиезер А.И., Берестецкий В.Б. Квантовая электродинамика.-М.: Наука, 1981. - 439 с.
6. Базылев В.А., Жеваго Н.К. Излучение быстрых частиц в веществе и во внешних полях.- М.: Наука, 1987. - С. 128-130.
7. Scholz D., Weyrauch M. A note on the Zassenhaus product formula // J. Math. Phys. – 2006. – Vol. 47.
8. Барц Б.И., Шляхов Н.А., Шульга Н.Ф. Динамика перестройки надбарьерных состояний в спектре излучения релятивистских электронов в кристалле // ЖЭТФ. – 1989. - Т. 95. - С. 1485-1494.
9. Akhiezer A.I., Truten V.I., Shul'ga N.F. Dynamical chaos in the motion of charged particles through a crystal // Phys. Rep. – 1991. - Vol. 203. - P. 289-343.
10. Волков Е.А., Попов А.М., Рахимов А.Т. Квантовая механика на персональном компьютере. - М.: УРСС, 1995. - С. 165-168.