

УДК 539.412:539.1.09

ЯВЛЕНИЕ КАНАЛИРОВАНИЯ КАК 1D- И 2D-МОДЕЛИ АТОМА В СОПУТСТВУЮЩЕЙ СИСТЕМЕ КООРДИНАТ

© 2022 г. Н. П. Калашников^а, *, А. С. Ольчак^а, **

^аНациональный исследовательский ядерный университет “МИФИ”,
Москва, 115409 Россия

*e-mail: kalash@mephi.ru

**e-mail: asolchak@mephi.ru

Поступила в редакцию 17.06.2021 г.

После доработки 22.09.2021 г.

Принята к публикации 28.09.2021 г.

Движение каналированной частицы удобно рассматривать в так называемой сопутствующей системе отсчета, движущейся вдоль направления каналирования со скоростью, равной продольной компоненте скорости каналированной частицы. В такой системе движение частицы ограничено и сводится к колебательному в одномерном потенциале (при плоскостном каналировании) или двумерному финитному движению в центральном поле (при аксиальном каналировании). Математически в сопутствующей системе отсчета движение каналированной частицы описывается релятивистским квадратированным уравнением Шредингера, в котором роль массы выполняет релятивистская энергия частицы E . Само явление каналирования можно рассматривать как реализацию атомарных моделей размерностью 1D и 2D в терминах движения электрона внутри атома. Подбирая и ориентируя кристалл мишени, можно управлять параметрами потенциала, делая его отличным от кулоновского потенциала, действующего в атоме водорода, а меняя релятивистскую энергию каналированных частиц, можно в широких пределах менять число и энергию разрешенных квантовых уровней связанного движения частиц. При аксиальном каналировании можно реализовать для каналированных частиц практически все разнообразие эффектов, наблюдаемых в традиционной атомной физике: сложную структуру уровней и подуровней, соответствующих разной энергии и квантованным моментам импульса частиц в сопутствующей системе отсчета; тонкое расщепление энергетических уровней за счет спин-орбитального взаимодействия; расщепление энергетических уровней в магнитном поле (аналог эффекта Зеемана) и другие эффекты.

Ключевые слова: каналирование, монокристалл, атомная физика, квантовые уровни энергии, расщепление энергетических уровней, электромагнитное излучение.

DOI: 10.31857/S1028096022050132

ВВЕДЕНИЕ

Движение заряженной частицы в усредненном потенциале кристаллической плоскости (плоскостное каналирование) или атомной цепочки (аксиальное каналирование) удобно рассматривать в так называемой сопутствующей системе отсчета, движущейся вдоль направления каналирования со скоростью, равной продольной компоненте скорости каналированной частицы. В такой системе движение частицы ограничено и сводится к одномерному колебательному (при плоскостном каналировании) или двумерному финитному движению в центральном поле (при аксиальном каналировании). Математически в сопутствующей системе отсчета при достаточно больших (релятивистских) энергиях движение каналированной частицы описывается релятивистским квадратированным уравнением Шредин-

гера (например, [1–5]), в котором вместо массы частицы m фигурирует ее релятивистская энергия $E/c^2 \gg m$:

$$(\hbar^2 c^2 / 2E) \Delta \psi(\mathbf{r}) + (\epsilon_n - U(\rho)) \psi(\mathbf{r}) = 0. \quad (1)$$

Здесь \hbar – постоянная Планка, c – скорость света, ϵ_n – разрешенные квантованные значения поперечной энергии каналированной частицы, нумеруемые целочисленным индексом $n = 1, 2, 3, \dots$. При аксиальном каналировании \mathbf{r} – радиус-вектор, определяющий координаты точки на двумерной плоскости, перпендикулярной оси каналирования, $U(\rho)$ – усредненный осесимметричный потенциал атомной цепочки, зависящий только от полярной координаты ρ , Δ – двумерный оператор Лапласа, в полярных координатах имеющий вид:

$$\Delta\psi = \partial^2\psi/\partial\rho^2 + (1/\rho)\partial\psi/\partial\rho + (1/\rho^2)\partial^2\psi/\partial\varphi^2. \quad (2)$$

При плоскостном каналировании волновая функция поперечного движения и потенциал плоскостного канала зависят от единственной координаты x , перпендикулярной плоскости каналирования, и квадратов уравнение Шредингера становится еще проще:

$$(\hbar^2 c^2/2E)d^2\psi(x)/dx^2 + (\epsilon_n - U(x))\psi(x) = 0. \quad (3)$$

Поперечное движение каналированной частицы ограничено и обладает дискретным энергетическим спектром подобно тому, как это происходит с электроном в атоме. Используя удобные приближенные модели усредненного потенциала, можно рассчитать соответствующие спектры поперечной энергии, а также характеристики аналогов других эффектов, известных из атомной физики. Продемонстрируем это на примерах.

ПЛОСКОСТНОЕ КАНАЛИРОВАНИЕ – 1D МОДЕЛЬ АТОМА

В сопутствующей системе отсчета каналированные в плоскостном канале частицы совершают финитные колебания между соседними ионными плоскостями (если частицы положительно заряжены) или вблизи одной из таких плоскостей (если частицы отрицательно заряжены). В случае положительно заряженной каналированной частицы (протона, положительно заряженного иона или позитрона) взаимодействие с плоскостями, составленными из ионов кристаллической решетки, носит характер отталкивания. Усредненный потенциал плоскостного каналирования имеет максимумы на ионных плоскостях и минимумы в пространстве между ними. В межплоскостном пространстве симметрично перекрываются быстро спадающие усредненные потенциалы соседних плоскостей, и форма образующейся потенциальной ямы практически неизбежно становится параболической. Соответственно, усредненный межплоскостной потенциал проще всего (и реалистичнее всего) аппроксимировать параболической функцией:

$$U = kx^2/2 = 4U_0x^2/d^2, \quad (4)$$

где $x \leq d/2$, d – межплоскостное расстояние, а координата x отсчитывается от середины межплоскостного пространства. Соответственно, координаты соседних, ограничивающих пространство канала ионных плоскостей равны $\pm d/2$, U_0 – глубина усредненного потенциала плоскостного канала, которая определяется параметрами кристалла и выбранной кристаллографической плоскости, в большинстве случаев составляет $\sim 20\text{--}50$ эВ [2, 4, 9]. Заметим, что в релятивистских уравнениях (1), (3) фигурируют потенциальные функции U , рассчитанные именно в лабораторной

(покоящейся) системе отсчета. Релятивистские изменения учтены в уравнениях (1), (3) заменой массы на релятивистскую энергию [2, 5–8, 10, 11].

Если рассматривать каналированное движение в сопутствующей системе отсчета и в классическом подходе, то в параболическом потенциале (4) частица должна совершать гармонические колебания с циклической частотой

$$\omega_{\text{кл}} = c(k/E)^{1/2} = (2c/d)(2U_0/E)^{1/2}. \quad (5)$$

В квантовом приближении уровни поперечной энергии связанного одномерного движения можно определить, точно решив уравнение (3) с потенциалом (4), или для простоты можно воспользоваться правилом квантования Бора–Зоммерфельда, которое обычно записывается в виде:

$$\oint p dx = 2\pi\hbar(n + 1/2), \quad n = 0, 1, 2, 3, \dots, \quad (6)$$

где $p = c(2E(\epsilon_n - U(x)))^{1/2}$ – классический поперечный импульс каналированной частицы с поперечной энергией ϵ_n , движущейся в потенциале $U(x)$, а интеграл берется по всей классически допустимой области связанного движения $\epsilon_n > U(x)$.

Применение условия квантования (6) к параболическому потенциалу приводит к эквидистантным разрешенным значениям поперечной энергии $\epsilon_n = \hbar\omega_{\text{кл}}(n + 1/2)$, где классическая частота колебаний определяется выражением (5), а переходы между соседними уровнями приводят к испусканию фотонов той же частоты, что и при классическом рассмотрении. Общее число уровней связанного движения в потенциале (1) можно оценить величиной.

$$N \sim U_0/\hbar\omega_{\text{кл}} \sim (EU_0/2)^{1/2}(d/2c\hbar). \quad (7)$$

УПРОЩЕННЫЙ ЛИНЕЙНЫЙ ПОТЕНЦИАЛ ПЛОСКОСТНОГО КАНАЛИРОВАНИЯ ДЛЯ ЭЛЕКТРОНОВ

Реальный усредненный потенциал атомной плоскости для электронов тоже складывается из перекрывающихся потенциалов соседних плоскостей и представляет собой цепочку перевернутых парабол (4) с пологими максимумами между соседними ионными плоскостями и острыми минимумами на плоскостях. Вблизи ионных плоскостей соседние параболы пересекаются, и потенциал меняется почти линейно по мере удаления от плоскости:

$$U(x) \approx -U_0(1 - |x|/b) \quad \text{при } |x| \ll d, \quad (8)$$

где b – подгоночный параметр, примерно равный четверти межплоскостного расстояния, а координата x отсчитывается от атомной плоскости. Условие квантования (6) дает оценку числа квантовых уровней связанного движения в потенци-

але (8), по порядку величины совпадающую с оценкой (7) для параболического потенциала:

$$N \sim (EU_0)^{1/2} b/ch. \quad (9)$$

АКСИАЛЬНОЕ КАНАЛИРОВАНИЕ – 2D МОДЕЛЬ АТОМА

Еще в самом начале исследований каналированного движения для описания движения электронов в аксиальном канале Й. Линдхард предложил так называемый “стандартный потенциал” [1]:

$$U(\rho) = -\frac{Ze^2}{d} \ln \left[\frac{3R_{Т-Ф}^2}{\rho^2} \right] + 1, \quad (10)$$

где d – межатомное расстояние в цепочке, Z – атомный номер атомов кристалла, $R_{Т-Ф}$ – радиус экранирования Томаса–Ферми. К сожалению, использовать потенциал (10) в аналитических расчетах практически невозможно. Аналитическое рассмотрение допускает кулоновскую аппроксимацию потенциала, использованную в [4, 6]:

$$U(\rho) = -kZ \left(\frac{R_{Т-Ф}}{d} \right) e^2 / \rho, \quad (11)$$

где k – постоянная закона Кулона.

Волновая функция каналированной частицы ψ в двумерном потенциале (11) определяется решением уравнения (1) и может быть представлена в виде [4, 6], также трудно поддающемся дальнейшему аналитическому исследованию:

$$\begin{aligned} \Psi_{nm}(\rho, \varphi) = & \exp(im\varphi) \frac{1}{\sqrt{\rho}} \times \\ & \times \exp(-\gamma\rho/a) \left(\frac{\rho}{a} \right)^{|m|+\frac{1}{2}} \sum_{k=0}^n a_k \left(\frac{\rho}{a} \right)^k. \end{aligned} \quad (12)$$

Отметим, что появляется возможность классифицировать квантовые состояния аксиально каналированных частиц по квантовым числам n (главное) и m (азимутальное) подобно тому, как классифицируются состояния электронов в атомной физике: ($1s$, $2s$, $2p$ и т.д.). По утверждениям авторов [4, 6], результаты экспериментальных измерений спектров излучения каналированных электронов позволяют ассоциировать некоторые наблюдавшиеся спектральные максимумы с теми или иными переходами между расчетными уровнями. Однако, если учесть низкую точность спектральных измерений на каналированных частицах, то такое совпадение не удивительно. Аналитически проще рассмотреть движение быстрой отрицательно заряженной частицы, например, в потенциале притягивающей струны, имеющий вид прямоугольной ямы:

$$U(\rho) = \begin{cases} -U_0, & 0 \leq \rho \leq R \\ 0, & \rho > R, \end{cases} \quad (13)$$

где $2R$ – поперечный размер струны, U_0 – глубина потенциальной ямы.

Собственные волновые функции поперечного движения – решения уравнения (1) с потенциалом (13) – имеют вид $\psi(\rho, \varphi) = \exp(im\varphi)R(\rho)$, где функции $R(\rho)$ подчиняются уравнению

$$-\frac{\hbar^2}{2E} \left(\frac{d^2 R}{d\rho^2} \frac{1}{\rho} \frac{dR}{d\rho} - \frac{m^2}{\rho^2} R \right) + U(\rho)R = \varepsilon R. \quad (14)$$

Пренебрегая просачиванием через центробежный барьер, можно найти допустимые значения поперечной энергии связанного движения:

$$\varepsilon_{n,m} = \pi^2 n^2 / 2ER^2 + m^2 / 2ER^2 - U_0 \quad (15)$$

и оценить число связанных состояний в яме с глубиной U_0 :

$$N = (2EU_0)^{1/2} R / \pi\hbar c, \quad (16)$$

что с точностью до безразмерного множителя (порядка единицы) совпадает с оценками числа состояний в плоскостном канале (7) и (9).

Реалистичный усредненный потенциал атомной цепочки, к сожалению, не похож ни на кулоновский (11), ни на модельный (13). Для выбора простой, но реалистичной модели усредненного потенциала атомной цепочки приведем несколько очевидных физических соображений: потенциал каждой ионной цепочки для каналированного электрона является притягивающим, т.е. убывает при приближении к цепочке; вблизи каждой цепочки формально усредненный потенциал покоящихся строго на оси цепочки ионов с точечными ядрами в центре логарифмически расходится: $U(\rho) \rightarrow -\infty$ при $\rho \rightarrow 0$ [1, 2] (понятно, однако, что это не физическая расходимость, реальный потенциал будет всегда конечен, если учесть хотя бы неустранимое тепловое движение ионов и их ядер и дополнительно усреднить по нему); потенциалы соседних цепочек перекрываются, благодаря чему устраняется нефизическая логарифмическая расходимость [1, 2] формально усредненных потенциалов ионных цепочек на расстояниях $\rho \gg d$ от осей.

В результате потенциал нескольких параллельных цепочек будет иметь форму сложно искривленной поверхности с коническими углублениями, имеющими вершины на осях цепочек. То есть можно ожидать, что недалеко от оси цепочки потенциал будет меняться практически линейно, как и потенциал (8) в плоскостном случае, но с заменой $|x|$ на ρ :

$$U = U_0(1 - \rho/b), \quad (17)$$

где U_0 – эффективная глубина потенциала, $b \leq d/2$ – параметр, который можно подобрать так, чтобы обеспечить лучшее совпадение результата расчета с экспериментом.

Расчетная оценка числа состояний в потенциале (17) с точностью до безразмерного параметра (порядка единицы) совпадает с оценкой (16), что свидетельствует о слабой зависимости спектров каналированных состояний от выбора формы модельного потенциала.

ВЛИЯНИЕ МАГНИТНОЙ КОМПОНЕНТЫ УСРЕДНЕННОГО ПОТЕНЦИАЛА И СПИНОРБИТАЛЬНОГО ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ В СОПУТСТВУЮЩЕЙ СИСТЕМЕ ОТСЧЕТА

В атомной физике заметную роль играют эффекты, связанные с взаимодействием спина электрона с магнитными полями, являющимся результатом трансформации электростатического поля ядра в системе покоя электрона (спин-орбитальное взаимодействие). Очевидно, что подобного рода эффекты должны наблюдаться и при каналировании заряженных частиц в кристаллах вообще и особенно при аксиальном каналировании электронов, что усиливает аналогию между движением электронов в атомах.

В сопутствующей системе отсчета магнитное поле электрически заряженной ионной цепочки в приближении непрерывного усредненного потенциала, очевидно, направлено перпендикулярно оси каналирования, по касательным к окружностям с центрами на оси, а магнитный момент поперечного орбитального движения электрона направлен вдоль этой оси. Взаимодействие орбитального магнитного момента с перпендикулярным ему магнитным полем не меняет энергии поперечного движения. Однако взаимодействие спина электрона с полем атомной цепочки и с его орбитальным моментом может иметь энергетический эффект. Спин-орбитальное взаимодействие, опираясь на аналогию с известными формулами атомной физики [12, 13], можно оценить величиной:

$$\Delta \varepsilon \sim l \mu_0 \mu_B^2 / 2\pi r^3, \quad (18)$$

где μ_0 – магнитная постоянная, $\mu_B = e\hbar/2m_e c$ – магнетон Бора, r – радиус орбиты, l – орбитальное квантовое число. Если $r \sim b \sim 10^{-10}$ м, $l \sim 1$, то расщепление (18) составит $\sim 10^{-4}$ эВ. В случае высокоэнергетических состояний с $l \sim N \sim (b/c\hbar)(EU_0)^{1/2}$ эффект спин-орбитального взаимодействия может быть заметно сильнее.

Аккуратный метод учета влияния магнитного поля атомных осей и плоскостей на движение каналированных частиц был предложен в [14–16] и подробно рассмотрен для случая каналирования нейтронов в немагнитных кристаллах [14]. Подобный подход может быть применен и к вычислению магнитных поправок к энергии каналированных состояний электронов, которые, как и нейтроны, обладают спином 1/2. Такой расчет,

однако, требует отдельного рассмотрения, выходящего за рамки данной работы.

ОБСУЖДЕНИЕ И ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Движение заряженной каналированной частицы в кристаллической среде во многом похоже на движение частиц в 1D- и 2D-моделях атомов, но отличается возможностью физически варьировать некоторые параметры. Подбирая и ориентируя кристалл мишени, можно управлять величиной и формой потенциала каналирования, а задавая релятивистскую энергию каналированных частиц, можно в широких пределах менять число и энергию разрешенных квантовых уровней связанного движения частиц. Рассматривая каналированные частицы в сопутствующей системе отсчета и применяя математические выражения традиционной атомной физики, можно реализовать множество эффектов: сложную структуру уровней и подуровней, соответствующих разным значениям энергии и квантованным моментам импульса частиц в сопутствующей системе отсчета, тонкое расщепление энергетических уровней за счет спин-орбитального взаимодействия, расщепление энергетических уровней в магнитном поле, возбуждение переходов между квантовыми состояниями с помощью лазерного излучения [11, 17] и другие эффекты.

Энергетические характеристики спектров квантовых состояний при плоскостном и аксиальном каналировании достаточно слабо зависят от выбора формы модельного усредненного потенциала. Однако применение рассматриваемого подхода ограничено возможностью использования для расчета спектров квантовых состояний квадрированных релятивистских уравнений Шредингера (1), (3). Эти уравнения справедливы только в условиях, когда поперечное движение частицы в сопутствующей системе отсчета является нерелятивистским, что нарушается при очень высоких, ультрарелятивистских энергиях каналированных частиц, т.е. при $E > (mc^2)^2/U_0 \sim 10^{10}$ эВ для электронов [10, 11], однако при не столь высоких энергиях рассмотрение явления каналирования как модели атомов 1D и 2D в терминах движения электрона внутри атома вполне оправдано. Модели атомов 1D и 2D в сопутствующей системе отсчета позволяют наглядно рассмотреть комбинационное рассеяние лазерного пучка на каналированных частицах [18].

БЛАГОДАРНОСТИ

Работа выполнена в рамках Программы “ПРИОРИТЕТ 2030”.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Линдхард Й.* // УФН. 1969. Т. 99. № 2. С. 249.
2. *Калашников Н.П.* Когерентные взаимодействия заряженных частиц в монокристаллах. М.: Атомиздат, 1981. 224 с.
3. *Оцуки Е.-Х.* Взаимодействие заряженных частиц с твердыми телами. М.: Мир, 1985. 272 с.
4. *Воробьев С.А.* Каналирование электронных пучков. М.: Энергоатомиздат, 1984. 96 с.
5. *Барышевский В.Г.* Каналирование, излучение и реакции в кристаллах при высоких энергиях. Минск: БГУ им. В.И. Ленина, 1982. 256 с.
6. *Рябов В.А.* Эффект каналирования. М.: Энергоатомиздат, 1994. 240 с.
7. *Байер В.Н., Катков В.М., Страховенко В.М.* Электромагнитные процессы при высокой энергии в ориентированных кристаллах. Новосибирск: Наука СО РАН, 1989. 400 с.
8. *Ахизер А.И., Шулъга Н.Ф.* Электродинамика высоких энергий в веществе. М.: Наука, 1993. 344 с.
9. *Andersen J.U., Bonderup E., Loegsgaard E. et al.* // Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. B. 1982. V. 194. P. 209.
10. *Загайнов В.А., Калашников Н.П., Ольчак А.С.* // Поверхность. Рентген., синхротр. и нейтрон. исслед. 2020. № 3. С. 109.
<https://doi.org/10.1134/S102809602003022X>
11. *Kalashnikov N.P., Olchak A.S., Khangulian E.V.* // Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. B. 2013. V. 309. P. 67.
12. *Берестецкий В.Б., Лифишиц Е.М., Путаевский Л.П.* Теоретическая физика. Т. IV. Квантовая электродинамика. М.: ФИЗМАТЛИТ, 1989. 728 с.
13. *Флюгге Э.* Задачи по квантовой механике. Т. 2. М.: Мир, 1974. 315 с.
14. *Высоцкий В.И.* // Поверхность. Рентген., синхротр. и нейтрон. исслед. 2010. № 4. С. 100.
15. *Высоцкий В.И.* // Поверхность. Рентген., синхротр. и нейтрон. исслед. 2021. № 3. С. 105.
16. *Высоцкий В.И.* // ЖЭТФ. 2021. Т. 151. № 16. С. 25.
17. *Khokonov M.Kh., Bekulova I.Z., Lomonosov V.S.* // Reports of the L-th International Tulinov's Conference "Interaction of Charged Particles with Crystals". Moscow, 2021. P. 71.
18. *Калашников Н.П., Крохин О.Н.* // Квантовая электроника. 2014. Т. 44. № 12. С. 1109.

The Channeling Phenomenon as 1D and 2D Atomic Models in the Accompanying Reference System

N. P. Kalashnikov^{1, *}, A. S. Olchak^{1, **}

¹National Nuclear Research University MEPHI, Moscow, 115409 Russia

*e-mail: kalash@mephi.ru

**e-mail: asolchak@mephi.ru

The motion of the channeled particle is conveniently considered in the so-called accompanying reference system, moving along the direction of the channeling at a speed equal to the longitudinal component of the channeled particle speed. In such system, the motion of the particle is finite and reduced to oscillatory in the one-dimensional potential (in the case of the planar channeling) or two-dimensional finite motion in the central field (in the case of the axial channeling). Mathematically, in the accompanying reference frame, the motion of a channeled particle is described by the relativistic Schrödinger equation, in which the role of mass is performed by the relativistic particle energy E . The channeling phenomenon can be considered as 1D and 2D models of atoms in terms of the motion of the electron inside the atom. By selecting and orienting the target crystal, it is possible to control the potential parameters, making it different from the Coulomb potential acting in the hydrogen atom. And by changing the relativistic energy of the channeled particles, it is possible to change the number of the allowed quantum energy levels of the particles bound motion within wide limits. In the case of axial channeling, it is possible to realize almost all the variety of effects observed in traditional atomic physics for channeled particles: the complex structure of levels and sublevels corresponding to different energies and the particles quantized momentum in the accompanying reference system; the fine splitting of energy levels due to spin-orbital interaction; splitting of the energy levels in the magnetic field (analogue of the Zeeman effect), etc.

Keywords: channeling, single crystal, atomic physics, quantum energy levels, splitting of energy levels, electromagnetic radiation.