



MSC 78A35

## КЛАССИФИКАЦИЯ КВАНТОВЫХ СОСТОЯНИЙ ЭЛЕКТРОНА, ДВИЖУЩЕГОСЯ В РЕЖИМЕ АКСИАЛЬНОГО КАНАЛИРОВАНИЯ В КРИСТАЛЛЕ

В.В. Сыщенко<sup>1</sup>, А.И. Тарновский<sup>1</sup>, А.Ю. Исупов<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Белгородский государственный университет,  
ул. Студенческая, 14, Белгород, 308007, Россия

<sup>2</sup>ЛФВЭ ОИЯИ, Дубна, 141980, Россия

**Аннотация.** В работе исследуются возможности так называемого спектрального метода для нахождения решений уравнения Шредингера в условиях задачи об аксиальном каналировании заряженных частиц. С помощью этого метода определяются характеристики квантовых состояний на примере электрона, движущегося вблизи атомной цепочки [110] кристалла кремния.

**Ключевые слова:** каналирование, спектральный метод, собственные функции, квантовый хаос.

**1. Введение.** При прохождении заряженных частиц через кристаллы может наблюдаться явление каналирования, заключающееся в увеличении длины пробега частиц вследствие их движения в каналах, образованных кристаллическими осями или плоскостями [1, 2]. Движение частицы в аксиальном канале с хорошей точностью может быть описано как движение в непрерывном потенциале атомной цепочки, то есть в потенциале составляющих цепочку атомов, усредненном вдоль оси цепочки. При движении в таком потенциале будет сохраняться продольная компонента импульса частицы  $p_{\parallel}$ , вследствие чего задача о движении частицы сводится к двумерной задаче о движении в поперечной плоскости. При этом могут оказаться существенными квантовые эффекты, в частности, квантование значений энергии поперечного движения частицы [1]. Сложный характер рельефа потенциальной энергии в рассматриваемых случаях не допускает аналитического интегрирования уравнения Шредингера. Это делает необходимым развитие высокоэффективных численных методов нахождения уровней энергии поперечного движения и других квантовых характеристик движения частиц в кристалле.

Целью настоящей работы является исследование возможностей так называемого спектрального метода [3] для нахождения решений уравнения Шредингера применительно к каналированию быстрых электронов, движущихся в поле атомной цепочки (на примере цепочки [110] кристалла кремния). Ранее этот метод был успешно использован для нахождения уровней энергии поперечного движения электрона в этой ситуации [4–6].

**2. Связанные состояния частицы в двумерном центрально-симметричном потенциале.** Поперечное движение электрона в непрерывном потенциале цепочки бу-



дет описываться двумерным уравнением Шредингера

$$\hat{H}\Psi(x, y, t) = i\hbar \frac{\partial}{\partial t}\Psi(x, y, t) \quad (1)$$

с гамильтонианом

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2E_{\parallel}/c^2} \left[ \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right] + U(x, y), \quad (2)$$

в котором величина  $E_{\parallel}/c^2$  играет роль массы частицы, а  $E_{\parallel} = \sqrt{m^2c^4 + p_{\parallel}^2c^2}$  — энергия ее продольного движения [1].

Поле, создаваемое отдельной цепочкой (без учета влияния соседних цепочек в кристалле), обладает центральной симметрией:  $U(x, y) = U(r)$ . Наличие такой симметрии позволяет провести качественный анализ квантовых состояний электрона. Переходя к полярным координатам, получаем

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2E_{\parallel}/c^2} \left[ \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left( r \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right] + U(r). \quad (3)$$

Уравнение для собственных функций и собственных значений оператора (3)

$$-\frac{\hbar^2}{2E_{\parallel}/c^2} \left[ \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left( r \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right] \psi(r, \varphi) + U(r)\psi(r, \varphi) = E_{\perp}\psi(r, \varphi) \quad (4)$$

допускает разделение переменных, его решения будут иметь вид

$$\psi_{n_r, m}(r, \varphi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{im\varphi} \rho_{n_r, |m|}(r), \quad (5)$$

где функция  $\psi_{n_r}(r)$  является решением уравнения

$$\left[ \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left( r \frac{\partial}{\partial r} \right) - \frac{m^2}{r^2} \right] \rho_{n_r, |m|}(r) + \frac{2E_{\parallel}/c^2}{\hbar^2} (E_{\perp} - U(r)) \rho_{n_r, |m|}(r) = 0. \quad (6)$$

Таким образом, квантовые состояния частицы в аксиально-симметричном потенциале  $U(r)$  будут характеризоваться радиальным квантовым числом  $n_r$ , совпадающим с числом нулей радиальной части волновой функции (3) при конечных значениях  $r$  (за исключением нуля в точке  $r = 0$ ), и проекцией  $m$  орбитального момента на ось симметрии поля. При этом состояния с  $m = 0$  оказываются не вырождены, а для состояний с ненулевыми значениями проекции орбитального момента имеет место двукратное вырождение по знаку  $m$  (см. также задачу 4.7 в [7]). Собственные значения гамильтониана (3), то есть собственные значения энергии поперечного движения канализованного электрона, будут, в общем случае, зависеть от обоих квантовых чисел:  $E_{\perp} = E_{n_r, |m|}$ .

**3. Спектральный метод.** Идея спектрального метода [3] основана на численном моделировании эволюции начальной волновой функции  $\Psi(x, y, 0)$  в соответствии с уравнением Шредингера (1). Оказывается, что корреляционная функция

$$P(t) = \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^*(x, y, 0)\Psi(x, y, t) dx dy \quad (7)$$



между начальным и текущим значениями волновой функции содержит информацию о собственных значениях оператора (2). Действительно, представим решение уравнения (1) в виде суперпозиции собственных функций  $\psi_{n,j}(x, y)$  гамильтониана

$$\Psi(x, y, t) = \sum_{n,j} A_{n,j} \psi_{n,j}(x, y) \exp\left(-\frac{i}{\hbar} E_n t\right), \quad (8)$$

где индекс  $n$  нумерует собственные значения энергии  $E_n$ , а индекс  $j$  — вырожденные состояния, соответствующие этой энергии. Подставляя волновую функцию (8) в (7), получим корреляционную функцию

$$\begin{aligned} P(t) &= \sum_{n,n',j,j'} \exp\left(-\frac{i}{\hbar} E_n t\right) A_{n,j}^* A_{n',j'} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \psi_{n,j}^*(x, y) \psi_{n',j'}(x, y) dx dy = \\ &= \sum_{n,n',j,j'} \exp\left(-\frac{i}{\hbar} E_n t\right) A_{n,j}^* A_{n',j'} \delta_{nn'} \delta_{jj'} = \sum_{n,j} |A_{n,j}|^2 \exp\left(-\frac{i}{\hbar} E_n t\right), \end{aligned} \quad (9)$$

фурье-образ которой

$$P(E) = \int_{-\infty}^{\infty} P(t) \exp\left(\frac{i}{\hbar} Et\right) dt = 2\pi\hbar \sum_{n,j} |A_{n,j}|^2 \delta(E - E_n). \quad (10)$$

будет иметь вид набора  $\delta$ -образных пиков, соответствующих собственным значениям  $E_n$  энергии системы.

Таким образом, для нахождения спектра энергий квантовой системы необходимо знание волновой функции  $\Psi(x, y, t)$ , значения которой можно получить численным интегрированием нестационарного уравнения Шредингера (1). Детали использованной нами процедуры описаны в [3, 4]. Подчеркнем, что начальное значение волновой функции  $\Psi(x, y, 0)$  следует выбирать в виде волнового пакета достаточно общего вида, с тем, чтобы в суперпозиции (8) присутствовали все собственные функции гамильтониана  $\psi_{n,j}(x, y)$ , соответствующие собственным значениям энергии в интересующей нас области спектра.

Численное интегрирование в (10) может быть проведено только для конечного интервала времени  $T$ . С учетом этого выражение для фурье-образа корреляционной функции примет вид

$$P(E) = \int_0^T P(t) \exp\left(\frac{i}{\hbar} Et\right) dt = \sum_{n,j} |A_{n,j}|^2 \frac{\sin[(E_n - E'_n)T/2\hbar]}{(E_n - E'_n)/2\hbar} \exp\left[\frac{i}{2\hbar}(E - E_n)T\right]. \quad (11)$$

Фигурирующая в правой части (11) функция вида  $\sin(xT)/x$ , обладает главным максимумом при  $x = 0$ , тем более высоким и узким, чем больше промежуток времени  $T$ , а также максимумами и минимумами убывающей амплитуды по обе стороны от



главного максимума. В результате, вместо набора бесконечно узких пиков мы получаем суперпозицию максимумов, ширина которых обратно пропорциональна временному промежутку  $T$ . Выбор продолжительности последнего определяется желаемой разрешающей способностью вычислительной процедуры, которая, в свою очередь, определяется ожидаемым минимальным расстоянием  $\Delta E$  между соседними уровнями энергии и составляет

$$T > \frac{2\pi\hbar}{\Delta E}. \quad (12)$$

Во избежание перекрытия боковых полос функции  $\sin(xT)/x$  от соседних значений  $E_n$  данное требование может быть усилено. В наших вычислениях мы опирались на соотношение

$$T = \frac{16\pi\hbar}{\Delta E}. \quad (13)$$

Кроме того, разрешимость максимумов можно улучшить, домножив подынтегральную выражение в (11) на оконную функцию, например, на так называемую нормированную функцию Ханнинга [3]

$$w(t) = \frac{1}{T} \left( 1 - \cos \frac{2\pi t}{T} \right). \quad (14)$$

Волновые функции стационарных состояний также могут быть найдены с помощью спектрального метода [3]. Чтобы определить собственные функции  $\psi_n(x, y)$ , соответствующие собственным значениям  $E_n$ , необходимо разложение (8) умножить на величину  $\exp(iE_n t/\hbar)$  и проинтегрировать по временному промежутку  $T$ :

$$\begin{aligned} \int_0^T \Psi(x, y, t) \exp\left(\frac{i}{\hbar} E_n t\right) dt &= \sum_{n', j} A_{n', j} \psi_{n', j}(x, y) \int_0^T \exp\left[\frac{i}{\hbar} (E_n - E_{n'}) t\right] dt = \\ &= \sum_{n', j} A_{n', j} \psi_{n', j}(x, y) \frac{\sin[(E_n - E_{n'})T/2\hbar]}{(E_n - E_{n'})/2\hbar} \exp\left[\frac{i}{2\hbar} (E_n - E_{n'}) T\right]. \end{aligned} \quad (15)$$

При достаточно больших промежутках времени  $T$  интеграл в левой части (15) будет с хорошей точностью пропорционален либо собственной функции  $\psi_n(x, y)$  в отсутствие вырождения, либо суперпозиции собственных функций  $\psi_{n, j}(x, y)$ , если  $n$ -ый энергетический уровень является вырожденным. Для улучшения разрешающей способности можно и в этом случае домножить подынтегральное выражение на оконную функцию (14).

**4. Движение в поле атомной цепочки.** В качестве примера рассмотрим движение электрона с  $E_{\parallel} = 20$  МэВ вблизи атомной цепочки [110] кристалла кремния, непрерывный потенциал которой выберем в виде модифицированного потенциала Линдхарда [1]

$$U(x, y) = -U_0 \ln \left( 1 + \frac{\beta R^2}{x^2 + y^2 + \alpha R^2} \right), \quad (16)$$

где  $U_0 = 60$  эВ,  $\alpha = 0.37$ ,  $\beta = 3.5$ ,  $R = 0.194$  Å (радиус Томаса-Ферми).



Вычисления на основе спектрального метода были выполнены нами с использованием следующих параметров:

- все функции координат задавались на дискретной сетке размером  $256 \times 256$  узлов с шагом  $\Delta x = \Delta y = a/256$ , где  $a = 5.431 \text{ \AA}$  – период решетки кристалла кремния;
- шаг по времени  $\Delta t/\hbar = (1/75)U_{max}^{-1}$ , где  $U_{max} = U_0 \ln(1 + \beta/\alpha)$  – глубина потенциальной ямы (16), выбран из соображений устойчивости алгоритма;
- полное число шагов по времени составляет целую часть от величины  $N_T = 50 \cdot 16\pi \cdot (\Delta t/\hbar)^{-1}$ , что, согласно критерию (13), обеспечивает разрешающую способность не хуже  $\Delta E = 0.02 \text{ эВ}$ ;
- начальная волновая функция выбрана в виде гауссианы, смещенной относительно центра потенциальной ямы в направлении оси  $y$ :

$$\Psi(x, y, 0) = \frac{1}{\pi\sigma^2} \exp\left[-\frac{x^2 + (y - y_0)^2}{2\sigma^2}\right], \quad (17)$$

где  $\sigma = 0.025 \text{ \AA}$ ,  $y_0 = a/35$ .

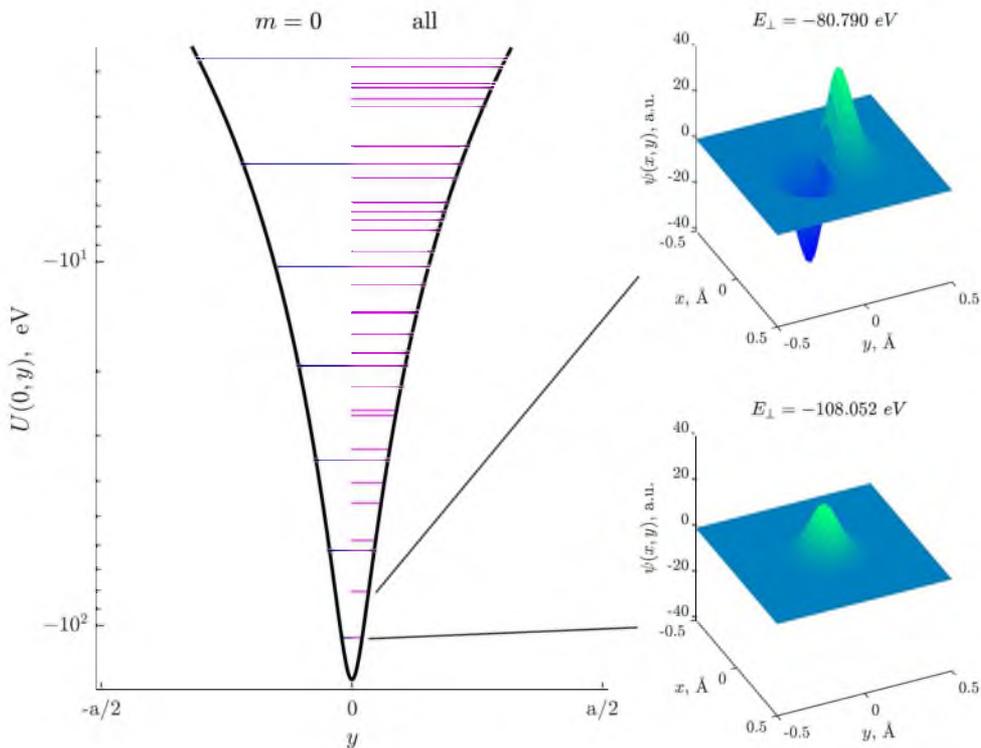


Рис. 1. Схема уровней энергии поперечного движения в непрерывном потенциале (15) цепочки [110] кристалла кремния для электрона с энергией продольного движения  $E_{\parallel} = 20 \text{ МэВ}$  (для удобства восприятия, по оси ординат использована логарифмическая шкала) и волновые функции основного и первого возбужденного состояний. Для нахождения уровней энергии, соответствующих  $m = 0$ , использовалась описанная в тексте процедура, по с центрально-симметричным начальным волновым пакетом, то есть пакетом вида (17) с  $y_0 = 0$ .

Графики найденных нами волновых функций представлены на рис. 2-9 в виде областей черного и белого цвета на плоскости  $(x, y)$ , соответствующих значениям  $\psi(x, y) < 0$  и  $\psi(x, y) > 0$ . Такое представление позволяет легко произвести классификацию собственных функций по квантовым числам  $n_r$  и  $m$ , просто подсчитывая нули волновой функции.

Действительно, при  $m = 0$  волновые функция  $\psi_{n_r,0}(r, \varphi)$  будут зависеть только от радиальной координаты, но не от угловой. Поэтому линии  $\psi(x, y) = 0$  будут иметь вид концентрических окружностей. Все такие волновые функции представлены на рис. 2.

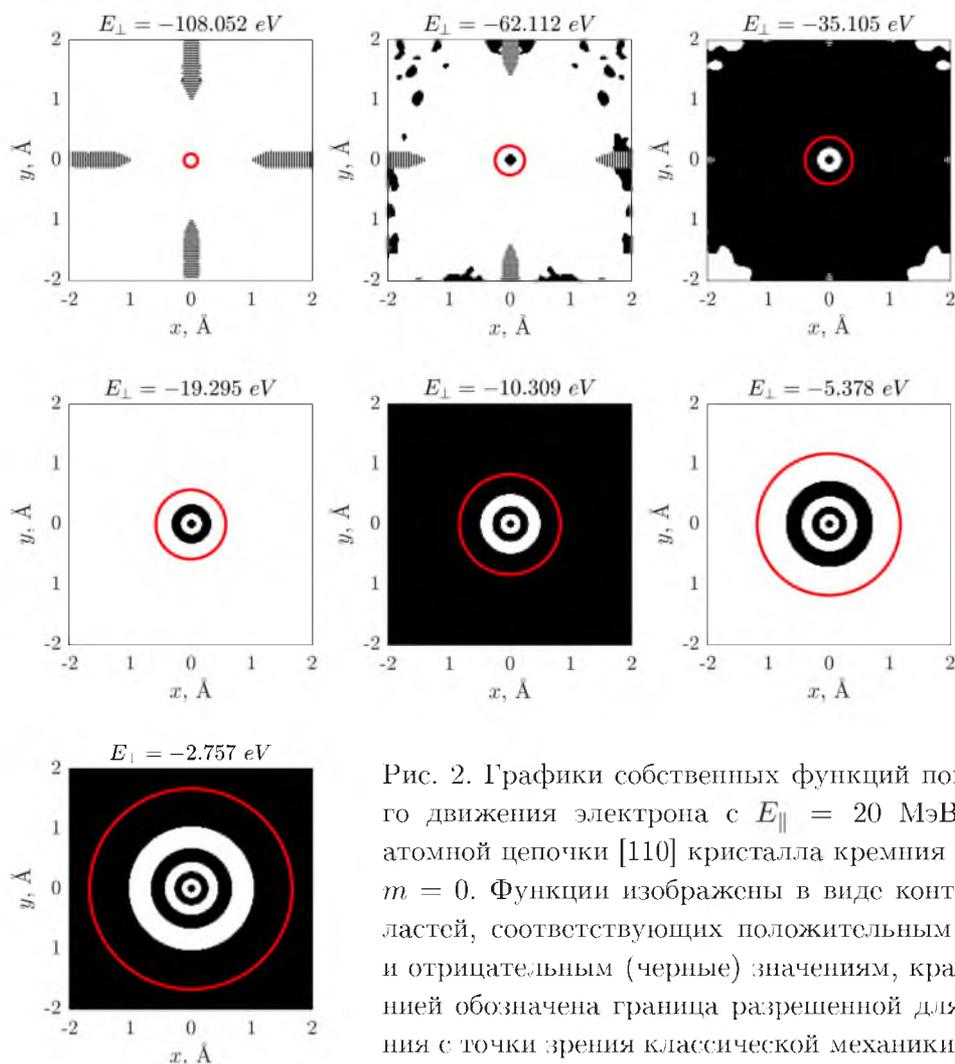


Рис. 2. Графики собственных функций поперечного движения электрона с  $E_{\parallel} = 20$  МэВ в поле атомной цепочки [110] кристалла кремния в случае  $m = 0$ . Функции изображены в виде контуров областей, соответствующих положительным (белые) и отрицательным (черные) значениям, красной линией обозначена граница разрешенной для движения с точки зрения классической механики области  $U(x, y) < E_{\perp}$ .

На рис. 1 и первом графике рис. 2 представлена волновая функция самого глубокого, основного состояния. Она вовсе лишена нулей (за исключением асимптотического стремления к нулю на бесконечности) и обладает единственным максимумом в центре. Соответственно этому, на первом графике рис. 2 она представлена единственной областью белого цвета (присутствующая на этом и некоторых других графиках



собственных функций нерегулярность в периферической области обусловлена погрешностью численных расчетов).

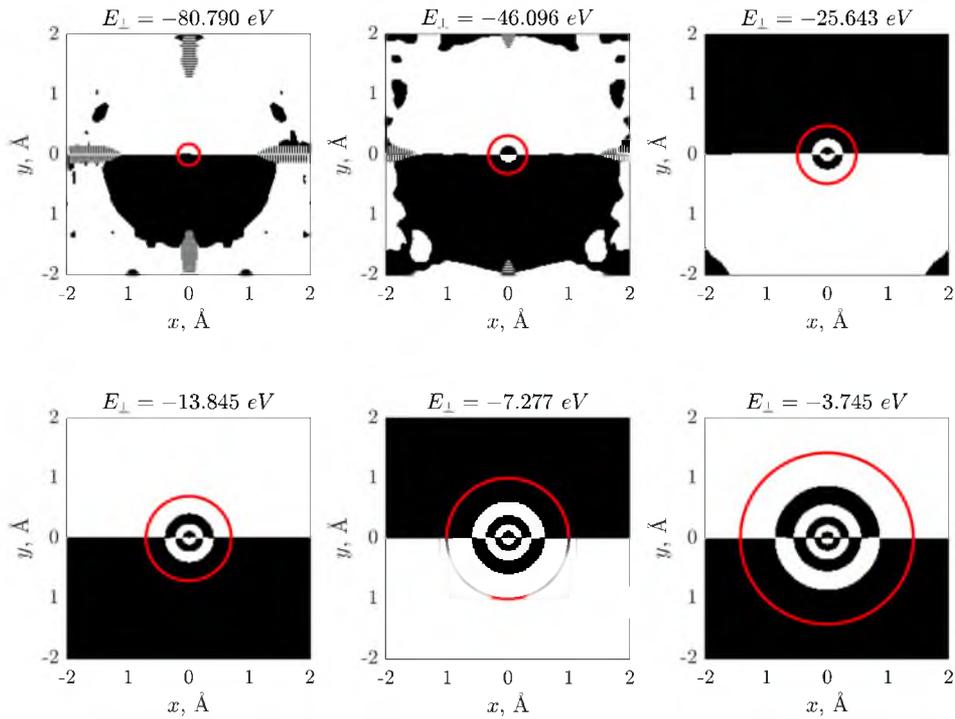


Рис. 3. То же, что и на рис. 2, при  $m = 1$ .

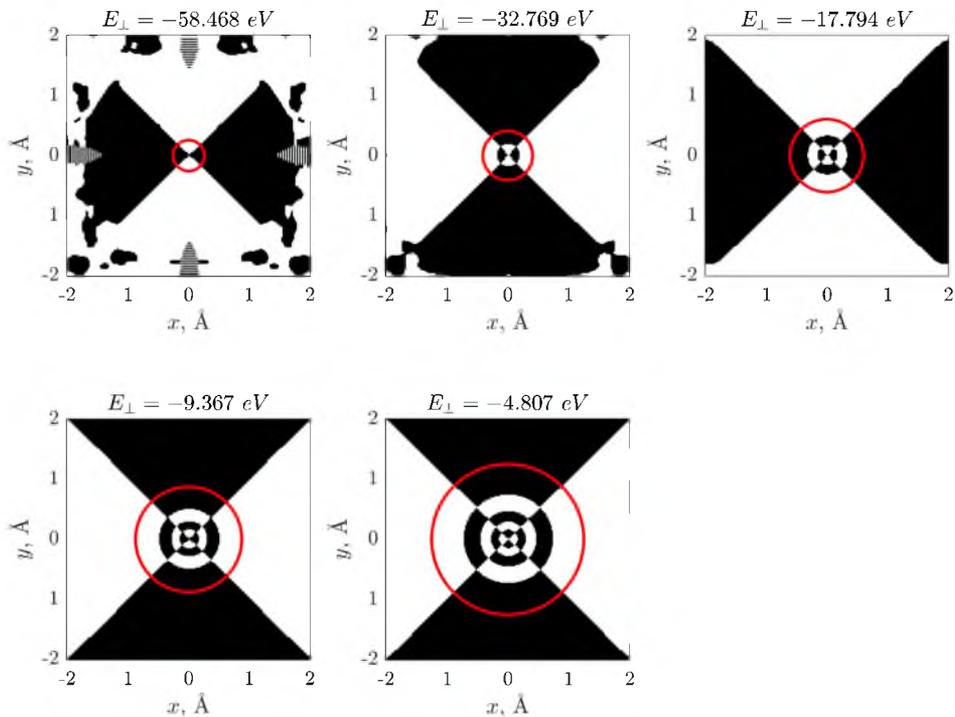


Рис. 4. То же, что и на рис. 2, при  $m = 2$ .

Каждое следующее (соответствующее более высокому собственному значению энергии) решение уравнения (6) при  $m = 0$  будет сопровождаться увеличением на единицу количества нулей функции  $\rho_{n_r,0}(r)$ . Таким образом, мы можем пронумеровать эти состояния квантовым числом  $n_r$ , равным числу нулей радиальной части волновой функции.

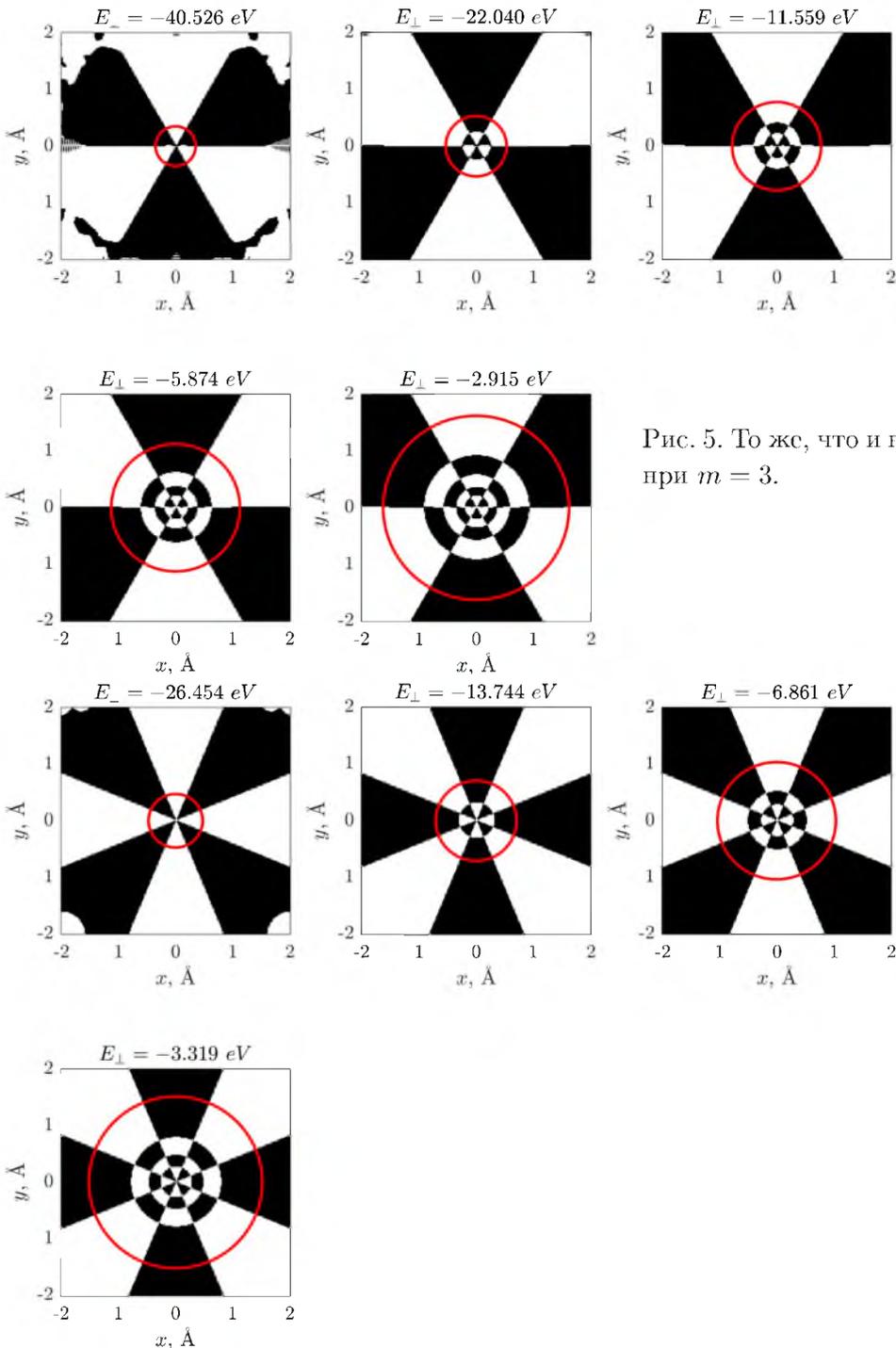


Рис. 5. То же, что и на рис. 2, при  $m = 3$ .

Рис. 6. То же, что и на рис. 2, при  $m = 4$ .

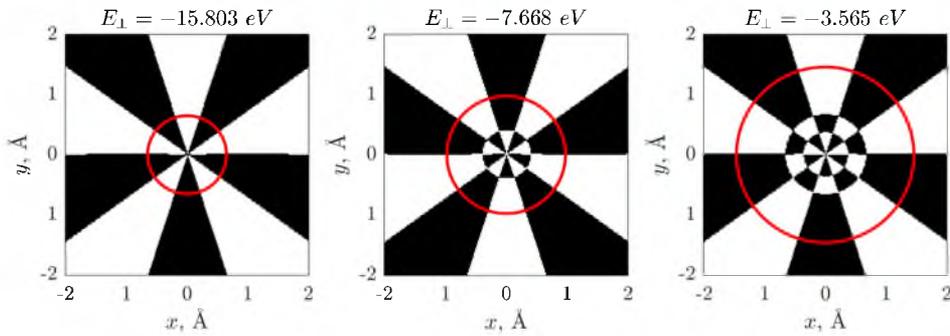


Рис. 7. То же, что и на рис. 2, при  $m = 5$ .

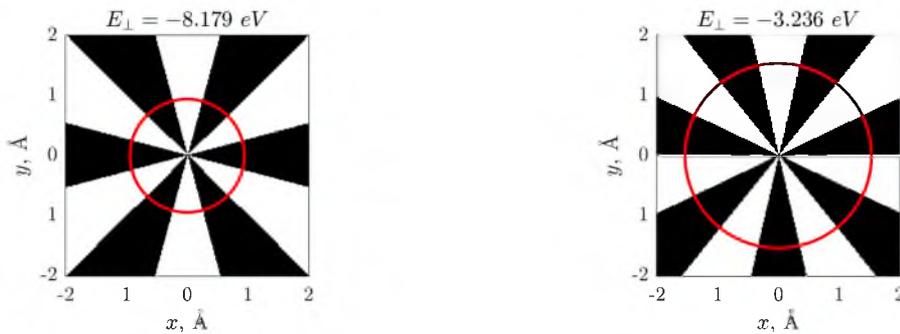


Рис. 8. То же, что и на рис. 2, при  $m = 6$ . Рис. 9. То же, что и на рис. 2, при  $m = 7$ .

Соответствующие  $n_r > 0$  графики волновых функций на рис. 2 имеют вид концентрических черных и белых колец; значения  $n_r$  легко определяются подсчетом числа границ между черными и белыми областями.

Аналогичная ситуация имеет место и в случае отличной от нуля проекции орбитального момента. Наличие вырождения по знаку  $m$  приводит к тому, что наш метод вместо собственных функций вида (5) дает суперпозицию функций  $\psi_{n_r, m}(r, \varphi)$  и  $\psi_{n_r, -m}(r, \varphi)$  с равными по абсолютной величине весами, сводящуюся к функции вида

$$\rho_{n_r, |m|}(r) \cos \left[ |m| \varphi + \alpha_m \right]. \tag{18}$$

Конкретно, в нашем случае, когда начальная гауссиана (17) смещена в положительном направлении оси  $y$ , собственные функции, вычисляемые спектральным методом, будут иметь вид

$$\rho_{n_r, |m|}(r) \cos \left[ |m| \left( \varphi - \frac{\pi}{2} \right) \right] \tag{19}$$

(если отсчитывать полярный угол  $\varphi$ , как обычно, от положительного направления оси  $x$  против часовой стрелки). Таким образом, значение  $m$  у найденной нами волновой функции будет равно числу белых (либо черных) секторов на графике функции (см. рис. 3-9).

Схема уровней энергии нашей системы с учетом классификации состояний по квантовым числам  $n_r$  и  $m$  представлена на рис. 10.



Характерной чертой найденных нами волновых функций стационарных состояний является наличие пересечений линий узлов функции  $\psi(x, y) = 0$ , что приводит к формированию характерной картины типа шахматной доски, а подсчет линий узлов позволяет легко найти квантовые числа и проклассифицировать собственные состояния системы. Это обстоятельство обусловлено интегрируемостью системы: число интегралов движения системы (энергия поперечного движения  $E_{\perp}$  и проекция орбитального момента на ось симметрии поля) равно числу степеней свободы системы (две), что приводит к возможности разделения переменных в уравнении движения и интегрированию последнего в квадратурах.

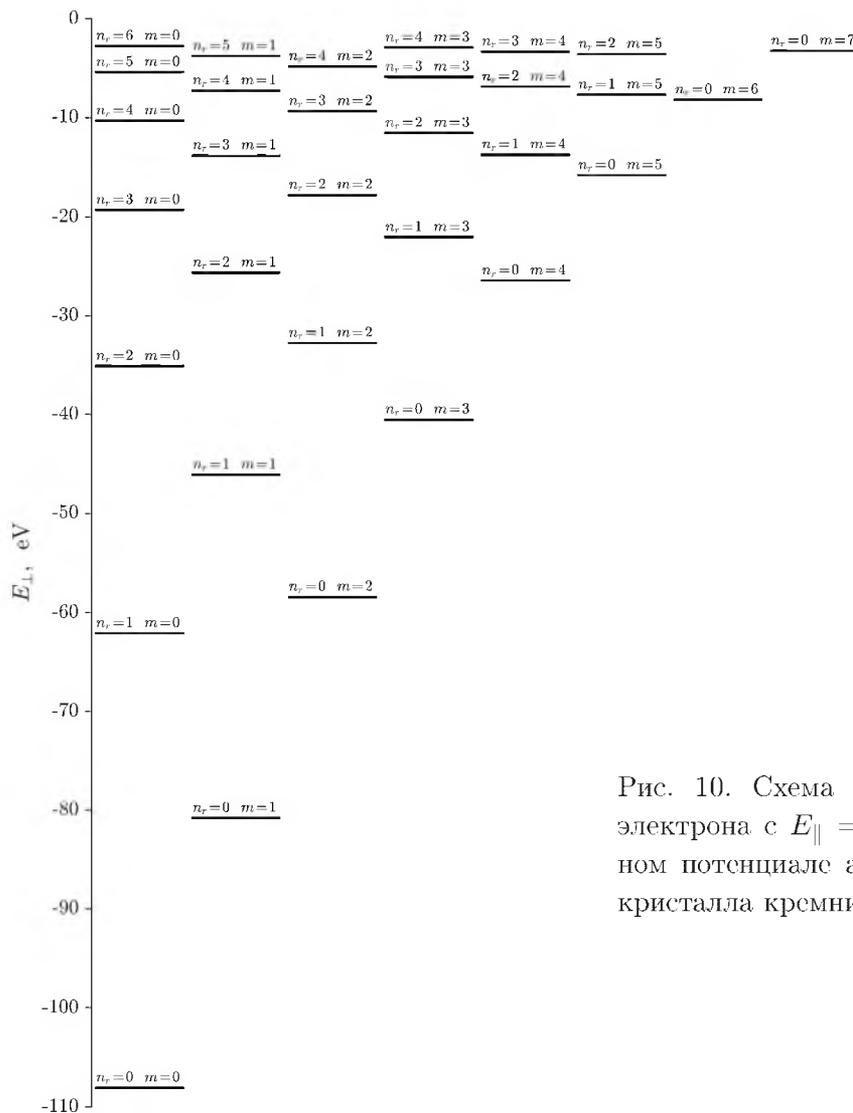


Рис. 10. Схема квантовых состояний электрона с  $E_{\parallel} = 20$  МэВ в непрерывном потенциале атомной цепочки [110] кристалла кремния.

Оказывается, что наличие пересечений (либо близких квазипересечений, рис. 11) линий узлов (поверхностей, в случае большего числа измерений) собственных функций есть общее свойство интегрируемых квантовых систем [8–11].

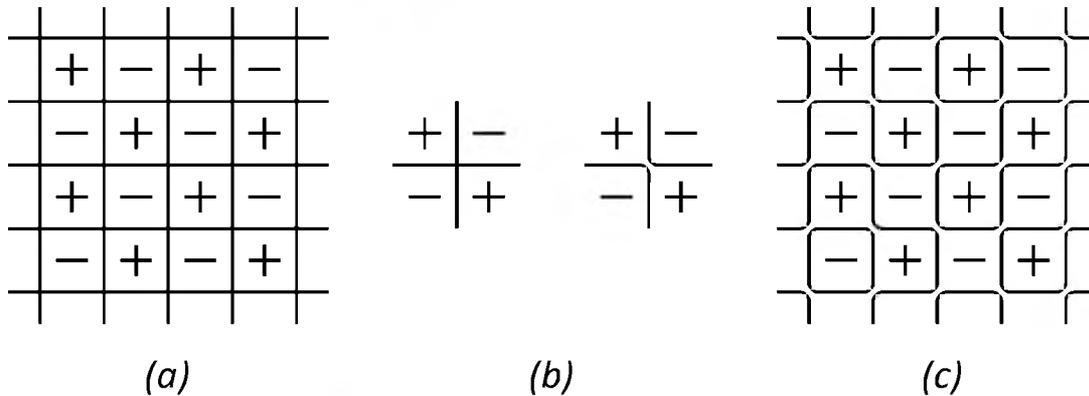


Рис. 11. Схематическое изображение пересечений линий узлов волновой функции  $\psi(x, y) = 0$  для интегрируемой (a) и неинтегрируемой (c) квантовой системы [8].

Совершенно иная картина наблюдается для неинтегрируемых систем. Примером такой системы может служить электрон в поле двух соседних атомных цепочек [110] кристалла кремния (влиянием других пар таких цепочек можно пренебречь). На рис. 12 представлены примеры собственных функций каналированного электрона в таком поле. В отсутствие аксиальной симметрии поля у двумерной системы остается, вообще говоря, единственный интеграл движения — энергия  $E_{\perp}$ , что приводит к драматическому изменению морфологии волновой функции: линии узлов не пересекаются, и вместо узора типа шахматной доски мы видим причудливую картину островков черного и белого цвета. Такое поведение является общим для неинтегрируемых систем [8–11].

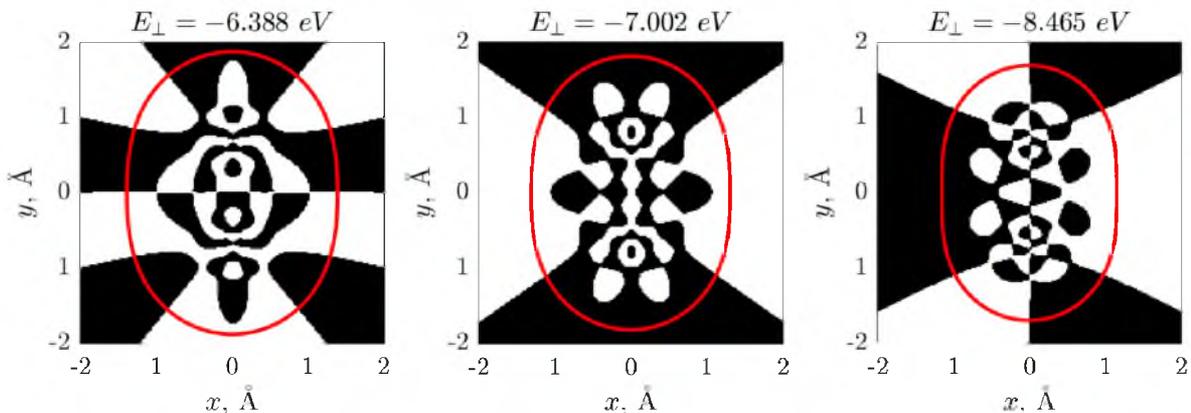


Рис. 12. Примеры собственных функций электрона с  $E_{\parallel} = 20$  МэВ в поле двух соседних атомных цепочек [110] кристалла кремния.

В классической механике интегрируемость либо неинтегрируемость системы оказывается тесно связана с регулярностью либо хаотичностью движения [9, 10, 12]. Под динамическим хаосом в классической механике понимается чувствительность системы к начальным условиям, приводящая к экспоненциальному разбеганию первоначально близких траекторий. В этом случае траектории, оставаясь детерминированными (предполагается отсутствие в системе шумов, случайных сил), становятся неотличимыми от случайных.



В квантовой механике экспоненциальная зависимость от начальных условий отсутствует. Тем не менее, в поведении квантовых систем, в классическом пределе демонстрирующих регулярное либо хаотическое поведение, присутствует ряд качественных различий. Поиск и исследование таких отличий составляет содержание проблематики квантового хаоса [13]. Различие в структуре волновых функций, а именно, в картине, образуемой линиями узлов, как раз является одним из проявлений квантового хаоса.

**Заключение.** В работе рассмотрена квантовомеханическая задача о движении быстрого электрона в аксиально-симметричном поле отдельной атомной цепочки (а также двух соседних атомных цепочек кристалла), на примере которой была продемонстрирована работоспособность спектрального метода для нахождения решений уравнения Шредингера (собственных функций и собственных значений энергии), описывающего движение быстрого электрона в кристалле в режиме аксиального каналирования. Этот подход может быть использован в задаче об исследовании проявлений квантового хаоса в задаче об аксиальном каналировании электронов в кристалле.

### Литература

1. Ахиезер А.И., Шульга Н.Ф. Электродинамика высоких энергий в веществе / М.: Наука, 1993. – 344 с.
2. Ахиезер А.И., Шульга Н.Ф., Трутень В.И., Гриненко А.А., Сыщенко В.В. Динамика заряженных частиц высоких энергий в прямых и изогнутых кристаллах // Успехи физических наук. – 1995. – 165; 10. – С.1165-1192.
3. M.D. Feit, J.A. Fleck, Jr., A. Steiger, Solution of the Schrödinger Equation by a Spectral Method // Journal of Computational Physics. – 1982. – 47. – P.412-433.
4. Шульга Н.Ф., Сыщенко В.В., Нерябова В.С. Спектральный метод в теории аксиального каналирования // Поверхность. – 2013. – №3. – С.91-96.
5. N.F. Shul'ga, V.V. Syshchenko, V.S. Neryabova, A.Yu. Isupov On spectral method in the axial channeling theory // Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B. – 2013. – 309. – P.153-156.
6. N.F. Shul'ga, V.V. Syshchenko, A.Yu. Isupov Statistical properties of the energy levels in the axial channeling quantum theory // Problems of Atomic Science and Technology. – 2014. – 5 (93). – P.120-123.
7. Галицкий В.М., Карнаков Б.М., Коган В.И. Задачи по квантовой механике / М.: Наука, 1981. – 648 с.
8. Stratt R.M., Handy N.C., Miller W.H. On the quantum mechanical implications of classical ergodicity // Journal of Chemical Physics. – 1979. – 71;8. – P.3311-3322.
9. Gutzwiller M.C. Chaos in Classical and Quantum Mechanics / New-York: Springer, 1990. – 432 p.
10. Шустер Г. Детерминированный хаос: Введение / М.: Мир, 1988. – 240 с.
11. Berezovoj V.P., Bolotin Yu.L., Cherkaskiy V.A. Signatures of quantum chaos in wave functions structure for multi-well 2D potentials // Physics Letters A. – 2004. – 323. – P.218-223.
12. Болотин Ю.Л., Тур А.В., Яновский В.В. Конструктивный хаос / Харьков: Институт монокристаллов, 2005. – 420 с.
13. Berry M.V. Quantum Chaology // Proceedings of the Royal Society A. – 1987. – 413. – P.183-198.



## CLASSIFICATION OF THE QUANTUM STATES OF AN ELECTRON MOVING IN THE AXIAL CHANNELING REGIME IN THE CRYSTAL

V.V. Syshchenko<sup>1</sup>, A.I. Tarnovsky,<sup>1</sup> A.Yu. Isupov<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Belgorod State National Research University,  
Studencheskya St., 14, Belgorod, 308007, Russia

<sup>2</sup>LHEP JINR, Dubna, 141980, Russia

**Abstract.** Possibilities of the so-called spectral method for solving of Schrodinger's equation in the problem of axial channeling are investigated. Characteristics of quantum states of an electron moving near [110] atomic string of the silicon crystal have been found as an example of application of this method.

**Key words:** channeling, spectral method, eigenfunctions, quantum chaos.