

Квантовое описание каналирования позитронов вблизи направления $\langle 111 \rangle$ кристалла кремния

Сыщенко В. В. , Парахин А. С. 

Белгородский государственный национальный исследовательский университет,
Россия, 308015, г. Белгород, ул. Победы, 85
syshch@yandex.ru

Аннотация. Движение быстрой заряженной частицы в кристалле под малым углом к одной из плотно упакованных атомами кристаллографических осей с хорошей точностью описывается как движение в непрерывных потенциалах параллельных атомных цепочек, при котором сохраняется параллельная оси цепочки компонента импульса частицы. При этом финитное движение частицы в поперечной плоскости называется аксиальным каналированием. Известно, что в аксиальном каналировании могут проявляться квантовые эффекты, в частности, квантование значений энергии движения в поперечной плоскости. В статье представлен численный метод поиска уровней энергии и соответствующих им волновых функций поперечного движения позитронов, каналирующих в направлении $\langle 111 \rangle$ кристалла кремния.

Ключевые слова: каналирование, быстрые частицы, высокие энергии, спектральный метод, гексагональная сетка, кремний

Для цитирования: Сыщенко В. В., Парахин А. С. 2024. Квантовое описание каналирования позитронов вблизи направления $\langle 111 \rangle$ кристалла кремния. *Прикладная математика & Физика*, 56(1): 50–59.

DOI 10.52575/2687-0959-2024-56-50-59

Short Communication

Quantum Description of the Positrons Channeling Near $\langle 111 \rangle$ Direction of the Silicon Crystal

Vladislav V. Syshchenko , Alexander S. Parakhin 

Belgorod National Research University,
85 Pobedy st., Belgorod, 308015, Russia
syshch@yandex.ru

Abstract. The fast charged particle's motion in the crystal under small angle to one of the crystallographic axes densely packed with atoms can be described with high accuracy as the motion in the uniform potentials of the parallel atomic strings that conserves the particle's momentum component parallel to the string axis. The finite motion in the transverse plane in this case is called as the axial channeling. The quantum effects in the axial channeling can manifest inselves, first of all, as the energy quantization for the motion in the transverse plane. This paper describes the numerical method for the transverse energy levels and the corresponding wave functions for the positrons channeling in the $\langle 111 \rangle$ direction of the Silicon crystal.

Keywords: Channeling, Fast Particles, High Energy, Spectral Method, Hexagonal Grid, Silicon

For citation: Syshchenko V. V., Parakhin A. S. 2024. Quantum Description of the Positrons Channeling Near $\langle 111 \rangle$ Direction of the Silicon Crystal. *Applied Mathematics & Physics*, 56(1): 50–59. (in Russian)

DOI 10.52575/2687-0959-2024-56-50-59

1. Введение. Быстрая заряженная частица, движущаяся в кристалле вблизи одной из плотно упакованных атомами кристаллографических осей или плоскостей, может захватываться в образованную этими осями или плоскостями потенциальную яму, совершая финитное движение в плоскости, перпендикулярной соответствующей оси (плоскости) и аномально глубоко проникая в кристалл. Такое явление называется, соответственно, аксиальным или плоскостным каналированием. Оно было предсказано на основе численного моделирования в [1]; последующие теоретические и экспериментальные исследования отражены в многочисленных монографиях и обзорах (см., например, [2, 3, 4, 5]). Движение частицы в режиме аксиального каналирования с хорошей точность может быть описано как движение в непрерывном потенциале атомной цепочки, то есть в потенциале, усредненном вдоль оси цепочки [6]. В таком потенциале сохраняется продольная компонента импульса частицы p_z , и задача о движении частицы сводится к двумерной задаче о движении в поперечной плоскости.

В предыдущей статье [7] было развито классическое описание каналирования позитронов в направлении $\langle 111 \rangle$ кристалла кремния. Известно, однако (см., например, [2]), что в каналировании быстрых частиц в кристаллах могут проявляться квантовые эффекты. В настоящей статье будет дано квантовое описание поперечного движения позитронов в направлении $\langle 111 \rangle$ кристалла кремния, описан численный метод нахождения собственных функций и собственных значений энергии поперечного движения, найдены уровни энергии поперечного движения позитрона в потенциальной ямке, образованной непрерывными потенциалами трех соседних цепочек $\langle 111 \rangle$ кристалла кремния. Обсуждаются нефизические артефакты, возникающие при численном интегрировании уравнения Шрёдингера с таким потенциалом на квадратной дискретной сетке. Показано, что использование вместо последней гексагональной сетки, учитывающей симметрию потенциала, приводит к устранению этих недостатков.

2. Квантовое описание каналирования. При движении частицы под малым углом $\psi \ll 1$ к оси атомной цепочки и сохранении параллельной оси цепочки компоненты импульса p_z в непрерывном потенциале цепочки U_s движение частицы в поперечной плоскости будет описываться нестационарным уравнением Шрёдингера

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

с гамильтонианом

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

что аналогично описанию двумерного движения нерелятивистской частицы с точностью до замены

$$m \rightarrow E_z/c^2, \quad (3)$$

где $E_z = \sqrt{m^2c^4 + p_z^2c^2} = \text{const} \approx E$.

Непрерывный потенциал уединенной атомной цепочки может быть описан простой модификацией потенциала Линдхарда [2]

$$U^{(1)}(x, y) = U_0 \ln \left[1 + \frac{\beta R^2}{x^2 + y^2 + \alpha R^2} \right], \quad (4)$$

где в случае цепочки $\langle 111 \rangle$ кристалла кремния $U_0 = 58.8$ эВ, $\alpha = 0.37$, $\beta = 2.0$, $R = 0.194 \text{ \AA}$ (радиус Томаса – Ферми). Такие цепочки образуют в поперечной им плоскости (111) гексагональную центрированную решетку. Для электронов потенциал (4) является притягивающим, поэтому каналирование электрона будет происходить в потенциале одной цепочки, слабо возмущенной потенциалами шести ближайших соседей, то есть поле будет обладать осью симметрии шестого порядка. Иная ситуация возникает при движении в кристалле положительно заряженной частицы, например, позитрона или протона (в дальнейшем, для определенности, мы будем говорить о позитроне). Для них потенциалы отдельных цепочек будут отталкивающими, однако между тремя ближайшими соседними цепочками (чьи оси расположены в вершинах равностороннего треугольника со стороной $a = a_z/\sqrt{6} \approx 2.217 \text{ \AA}$, где a_z – основной период кристалла кремния, то есть период цепочки $\langle 100 \rangle$) возникает небольшая потенциальная ямка с осью симметрии третьего порядка, в которой возможно финитное в поперечной плоскости движение частицы. Таким образом, потенциальная энергия позитрона в поле трех ближайших атомных цепочек будет описываться формулой

$$U_s^{(+)}(x, y) = U^{(1)}(x, y - a/\sqrt{3}) + U^{(1)}(x + a/2, y + a/2\sqrt{3}) + U^{(1)}(x - a/2, y + a/2\sqrt{3}) - 7.8571 \text{ eV}, \quad (5)$$

где константа выбрана таким образом, чтобы потенциал в центре треугольника был равен нулю. Глубина центральной ямки (или высота седловой точки потенциала) составляет приблизительно

$$U_0 = 0.3278 \text{ эВ}. \quad (6)$$

Интегрирование уравнения Шрёдингера (1) с потенциалом (5) возможно только численно; нами использован для этой цели так называемый спектральный метод [8].

Спектральный метод поиска собственных значений энергии квантовой системы [8] основан на вычислении корреляционной функции между волновыми функциями системы в начальный и текущий моменты времени, $\Psi(x, y, 0)$ и $\Psi(x, y, t)$ (последняя должна быть предварительно найдена численно):

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

Фурье-образ этой корреляционной функции,

$$P_E = \int_{-\infty}^{\infty} P(t) \exp(iEt/\hbar) dt, \quad (8)$$

содержит информацию о собственных значениях энергии. Действительно, любое решение временного уравнения Шрёдингера (1) может быть представлено в виде суперпозиции

$$\Psi(x, y, t) = \sum_{n,j} A_{n,j} u_{n,j}(x, y) \exp(-iE_n t/\hbar) \quad (9)$$

собственных функций гамильтониана $u_{n,j}(x, y)$,

$$\hat{H}u_{n,j}(x, y) = E_n u_{n,j}(x, y),$$

где индекс j нумерует (различает) вырожденные состояния, соответствующие энергии E_n . Вычисление корреляционной функции (7) для волновой функции в виде (9) дает

$$\begin{aligned} P(t) &= \sum_{n,n',j,j'} \exp(-iE_{n'} t/\hbar) A_{n,j}^* A_{n',j'} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} u_{n,j}^*(x, y) u_{n',j'}(x, y) dx dy = \\ &= \sum_{n,n',j,j'} \exp(-iE_{n'} t/\hbar) A_{n,j}^* A_{n',j'} \delta_{nn'} \delta_{jj'} = \\ &= \sum_{n,j} |A_{n,j}|^2 \exp(-iE_n t/\hbar). \end{aligned} \quad (10)$$

Вычисление ее фурье-образа (10) приводит к выражению

$$P_E = 2\pi\hbar \sum_{n,j} |A_{n,j}|^2 \delta(E - E_n). \quad (11)$$

Мы видим, что фурье-образ корреляционной функции будет представлять собой серию δ -образных пиков, положения которых соответствуют собственным значениям гамильтониана (собственным значениям энергии системы).

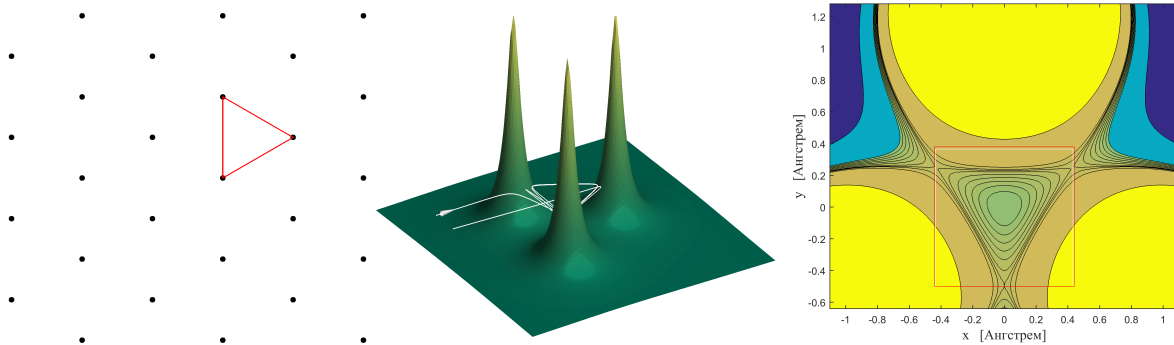


Рис. 1. Слева: проекция решетки кристалла типа алмаза на плоскость (111) . В центре: Потенциал (5) и пример инфинитной траектории, возникающей, когда энергия поперечного движения E_{\perp} немного превышает величину (6).

Справа: линии уровня потенциала (5); вблизи начала координат видна потенциальная ямка

Fig. 1. Left: Projection of the dimond-like lattice on the (111) plane. Center: The potential (5) and the sample infinite trajectory that arizes while the transverse motion energy E_{\perp} slightly exceeds the value (6). Right: equipotentials of (5); the small potential pit is seen near the origin of coordinates

Этот же метод позволяет найти собственные функции, соответствующие найденным на первом этапе собственным значениям энергии. Подставляя волновую функцию $\Psi(x, y, t)$ в виде суперпозиции (9), нетрудно убедиться, что интегрирование

$$u_n(x, y) = \frac{1}{T} \int_0^T \Psi(x, y, t) \exp\left(\frac{i}{\hbar} E_n t\right) dt \quad (12)$$

в течение достаточно длительного промежутка времени T приведет к тому, что из всей суперпозиции (9) существенный вклад в результат будет вносить единственная собственная функция $u_n(x, y)$, соответствующая собственному значению энергии E_n (или некоторая суперпозиция собственных функций, соответствующая вырожденному уровню энергии).

Обсудим теперь детали алгоритма, реализующего этот метод. Зависящее от времени уравнение Шрёдингера (1) позволяет записать конечно-разностную формулу, описывающую временную эволюцию волновой функции $\Psi(x, y, t)$:

$$\Psi(x, y, t + \Delta t) \approx \exp\left[-i \frac{\Delta t}{\hbar} \hat{H}\right] \Psi(x, y, t). \quad (13)$$

Сложность, однако, состоит в том, что гамильтониан (2) представляет собой сумму двух некоммутирующих между собой слагаемых, первое из которых диагонально в импульсном представлении, а второе — в координатном. В этом случае удобно использовать так называемый метод расщепления (см., например, [8, 9, 10]), который состоит в последовательном действии на волновую функцию тройки экспонент

$$\exp \left[-i \Delta t (\hat{T}_{kin} + \hat{U}) / \hbar \right] = \exp \left[-i \frac{\Delta t}{2} \hat{U} / \hbar \right] \exp \left[-i \Delta t \hat{T}_{kin} / \hbar \right] \exp \left[-i \frac{\Delta t}{2} \hat{U} / \hbar \right] (1 + O((\Delta t)^3)). \quad (14)$$

Результат действия «кинетического» эволюционного оператора на волновую функцию легко может быть найден, если последнюю представить в виде разложения по собственным функциям оператора кинетической энергии, то есть в виде интеграла Фурье в общем случае, или в виде дискретного ряда Фурье — в случае периодической функции или в случае функции, заданной на ограниченной области пространства. В предыдущих работах [11, 12, 13, 14, 15, 16, 17, 18, 19] в качестве таковой выбиралась квадратная область и, в свою очередь, значения функции задавались в пределах этой области на квадратной сетке. Наряду с таким выбором, в настоящей работе мы представим результаты моделирования при ином выборе пространственной области и дискретной пространственной сетки, учитывающем симметрию потенциала (5).

3. Параметры численного моделирования на квадратной сетке. Волновая функция, заданная на квадратной области $-L/2 \leq x, y < L/2$ будет выражаться рядом Фурье

$$\Psi(x, y, t) = \sum_{k_x=-\infty}^{\infty} \sum_{k_y=-\infty}^{\infty} \Psi_k(t) \exp \left[i \frac{2\pi}{L} (k_x x + k_y y) \right], \quad (15)$$

$$\Psi_k(t) = \frac{1}{L^2} \int_{-L/2}^{L/2} \int_{-L/2}^{L/2} \Psi(x, y, t) \exp \left[-i \frac{2\pi}{L} (k_x x + k_y y) \right] dx dy. \quad (16)$$

Для численных расчетов волновая функция определяется на дискретной сетке с шагом Δx , то есть $x = n_x \Delta x$, $y = n_y \Delta x$, где $n_x = 0, \dots, N-1$, $n_y = 0, \dots, N-1$. Соответствующие формулы, аналогичные (15), (16), будут иметь вид

$$\Psi(x, y, t) = \sum_{k_x=-k_{max}}^{k_{max}-1} \sum_{k_y=-k_{max}}^{k_{max}-1} \Psi_k(t) \exp \left[i \frac{2\pi}{L} (k_x x + k_y y) \right] = \sum_{k_x=-k_{max}}^{k_{max}-1} \sum_{k_y=-k_{max}}^{k_{max}-1} \Psi_k(t) \exp \left[i \frac{2\pi}{N} (k_x n_x + k_y n_y) \right], \quad (17)$$

$$\Psi_k(t) = \frac{1}{N^2} \sum_{n_x=-N/2}^{N/2-1} \sum_{n_y=-N/2}^{N/2-1} \Psi(n_x \Delta x, n_y \Delta x, t) \exp \left[-i \frac{2\pi}{N} (k_x n_x + k_y n_y) \right], \quad (18)$$

где $N = L/\Delta x$ — число шагов пространственной сетки,

$$k_{max} = N/2. \quad (19)$$

Тогда результат действия кинетического оператора на волновую функцию (17) будет иметь вид

$$\begin{aligned} \exp \left[-i \frac{\Delta t}{\hbar} \hat{T}_{kin} \right] \Psi(x, y, t) &= \exp \left[i \frac{\Delta t}{\hbar} \frac{\hbar^2 c^2}{2E_z} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right) \right] \Psi(x, y, t) = \\ &= \sum_{k_x=-k_{max}}^{k_{max}-1} \sum_{k_y=-k_{max}}^{k_{max}-1} \Psi_k(t) \exp \left[-i \frac{\Delta t}{\hbar} \frac{\hbar^2 c^2}{2E_z} \left(\frac{2\pi}{L} \right)^2 (k_x^2 + k_y^2) \right] \exp \left[i \frac{2\pi}{L} (k_x x + k_y y) \right]. \end{aligned} \quad (20)$$

Для нахождения уровней энергии поперечного движения и собственных функций позитрона в потенциальной яме (5) была выбрана квадратная область со стороной $L = 0.987 \text{ \AA}$ (отмечена тонкой штрих-пунктирной линией на рис. 2, а) и пространственная сетка $N \times N = 128 \times 128$ узлов с шагом $\Delta x = L/N = 0.0077 \text{ \AA}$. Шаг по времени был выбран равным $\Delta t/\hbar = 10^{-4} \text{ эВ}^{-1}$, число шагов по времени $N_T = 1.37 \cdot 10^8$; выбор этих двух параметров совпадает с таковым в работах [11, 12, 13, 17], где выполнялось моделирование движения электронов, каналированных в направлении $\langle 110 \rangle$ кристалла кремния, и в работах [14, 15, 16, 18, 19], посвященных каналированию электронов и позитронов в направлении $\langle 100 \rangle$.

При выборе параметров моделирования принимаются во внимание следующие соображения. Величина

$$\frac{\hbar^2 c^2}{2E_z} \left(\frac{2\pi}{L} \right)^2 (k_x^2 + k_y^2) \equiv E^{kin}(k_x, k_y) \quad (21)$$

в показателе первой экспоненты в (20) имеет смысл собственного значения кинетической энергии поперечного движения, соответствующего собственной функции с данными k_x, k_y в разложении вида

(17). Имея в виду использование вычисленной волновой функции $\Psi(x, y, t)$ для нахождения уровней энергии частицы в потенциальной яме, необходимо обеспечить покрытие собственными значениями кинетической энергии всего интервала от дна потенциальной ямы до ее краев (то есть до значения глубины потенциальной ямы $|U_{max}|$). Поэтому условие, определяющее величину k_{max} максимального значения $|k_x|$ и $|k_y|$, будет иметь вид

$$E^{kin}(k_{max}, 0) = E^{kin}(0, k_{max}) = \frac{\hbar^2 c^2}{2E_z} \left(\frac{2\pi}{L} \right)^2 k_{max}^2 \geq |U_{max}|. \quad (22)$$

В силу (19) это условие определяет число точек N на пространственной сетке или, что эквивалентно, шаг по координате Δx .

С другой стороны, для устойчивости метода расщепления необходимо (см., например, [10]), чтобы абсолютное значение аргумента «кинетической» экспоненты в любой ситуации было меньше единицы, откуда

$$\Delta t \cdot 2E^{kin}(k_{max}, 0) < \hbar \quad (23)$$

(поскольку максимальное значение кинетической энергии достигается при $|k_x| = |k_y| = k_{max}$). Условие (23) определяет шаг по времени нашего итерационного алгоритма.

Отметим, что статья [8, Eq. (11)] устанавливает другое условие на величину Δt ,

$$\Delta t < \frac{\hbar}{|U_{max}|}, \quad (24)$$

основанное на простом критерии Найквиста – Котельникова – Шеннона по времени. На первый взгляд, оно не отличается от нашего условия (23) в силу (22). Однако, условие (23) включает в себя два важных параметра, число шагов на пространственной сетке N (посредством (18)) и энергию продольного движения, в то время как условие (24) о них «не знает». Поэтому использование критерия (24) вместо (23) может привести к потере устойчивости алгоритма при некоторых обстоятельствах.

И, наконец, желательно использовать условие

$$\Delta t \cdot 2E^{kin}(k_{max}, 0) \ll \hbar \quad (25)$$

для шага по времени вместо (23), чтобы уменьшить ошибку, вносимую расщеплением операторов (14). В этом случае условие (24) (то есть Eq. (11) из статьи [8]) будет удовлетворено автоматически. Таким образом, наиболее сильное ограничение на величину Δt возникает для электронов наименьшей энергии E_z .

С другой стороны, с ростом E_z роль основного лимитирующего фактора начинает играть условие (22), так как величина $E^{kin}(k_{max}, 0)$ (22) при недостаточном количестве узлов координатной сетки перестает дотягивать до краев потенциальной ямы.

4. Параметры численного моделирования на гексагональной сетке. Недостатком выбора квадратной области задания функций в нашей задаче и, соответственно, квадратной дискретной координатной сетки является то обстоятельство, что потенциальная энергия (5) обладает другим типом симметрии, а именно, симметрией равностороннего треугольника, описываемой группой C_{3v} . Такое несоответствие, как мы увидим в следующем разделе, приводит к появлению артефактов численного моделирования.

Описанный недостаток устраняется использованием области в виде правильного шестиугольника и, соответственно, гексагональной решетки (рис. 2). В дальнейшем будет удобно, чтобы в треугольнике потенциальной ямы, определяемом условием $U_s^{(+)}(x, y) = U_0$ (см. (5) и (6)), укладывалось нечетное число строк гексагональной сетки N_{lines} , причем один из узлов сетки попадал бы в центр треугольника – в точку с координатами $(0, 0)$ (на рис. 2, a узлы сетки на соответствующих строках отмечены красным). Область задания функции, построенная на двух векторах трансляции

$$\mathbf{a}_1 = N_{lines} \left(\frac{\Delta x}{2}, \Delta y, 0 \right), \quad \mathbf{a}_2 = N_{lines} \left(-\frac{\Delta x}{2}, \Delta y, 0 \right), \quad \Delta y = \Delta x \frac{\sqrt{3}}{2} \quad (26)$$

как на сторонах, будет представлять собой ячейку Браве (красный ромб на рис. 2, a), узлы сетки внутри которой отмечены красными кружочками. Для дальнейшего учета симметрии задачи следует, однако, перейти к ячейке в форме Вигнера – Зейтца [20, 21] (синий шестиугольник на рис. 2, a), причем все недостающие узлы сетки могут быть получены параллельным переносом узлов, оказавшихся снаружи шестиугольника (пустые красные кружочки), векторами $-\mathbf{a}_1, -\mathbf{a}_2$.

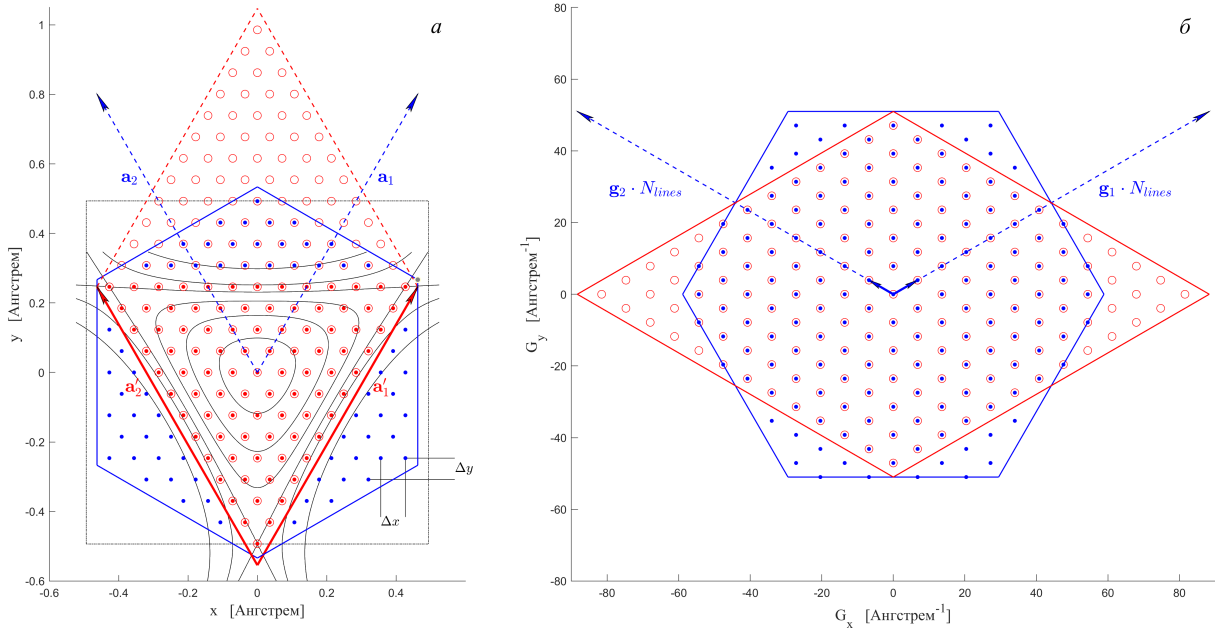


Рис. 2. Схематическое изображение дискретной гексагональной сетки для процедуры численного моделирования в конфигурационном пространстве (а) и в обратном пространстве (б)
 Fig. 2. Scheme of the discrete hexagonal grid for the numerical simulation in the configuration space (a) and the reciprocal space (b)

Как известно, функцию, заданную на конечном интервале, как и периодическую функцию, можно представить в виде бесконечного ряда Фурье,

$$\Psi(\mathbf{r}) = \sum_{k_1=-\infty}^{\infty} \sum_{k_2=-\infty}^{\infty} \Psi_{k_1, k_2} \exp \left\{ 2\pi i \left(\frac{k_1 \xi_1}{a_1} + \frac{k_2 \xi_2}{a_2} \right) \right\}, \quad (27)$$

где a_1, a_2 – минимальные периоды функции (в нашем случае – длины векторов (26)), k_1, k_2 – целые числа, ξ_1, ξ_2 – координаты вдоль основных векторов трансляции. Однако, от косоугольных, вообще говоря (и в нашем конкретном случае) координат ξ_1, ξ_2 удобно перейти к декартовым (в частности, чтобы легко было применять к такой функции оператор кинетической энергии, см. (2) и (20)). С этой целью вводится так называемая обратная решетка (см., например, [20, 21]) с основными векторами трансляции

$$\mathbf{b}_1 = \frac{[\mathbf{a}_2, \mathbf{a}_3]}{\mathbf{a}_1 \cdot [\mathbf{a}_2, \mathbf{a}_3]} = \frac{1}{N_{lines} \Delta x \Delta y} \left(\Delta y, \frac{\Delta x}{2}, 0 \right), \quad \mathbf{b}_2 = \frac{[\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_3]}{\mathbf{a}_1 \cdot [\mathbf{a}_2, \mathbf{a}_3]} = \frac{1}{N_{lines} \Delta x \Delta y} \left(-\Delta y, \frac{\Delta x}{2}, 0 \right), \quad (28)$$

где вектор $\mathbf{a}_3 = (0, 0, 1)$ дополняет (26) до трехмерного базиса. С их помощью разложение (27) может быть записано в виде

$$\begin{aligned} \Psi(\mathbf{r}) &= \sum_{m_1=-\infty}^{\infty} \sum_{m_2=-\infty}^{\infty} \Psi_{m_1, m_2} \exp \{ 2\pi i (m_1 \mathbf{b}_1 + m_2 \mathbf{b}_2) \cdot \mathbf{r} \} = \\ &= \sum_{m_1=-\infty}^{\infty} \sum_{m_2=-\infty}^{\infty} \Psi_{m_1, m_2} \exp \{ i (m_1 \mathbf{g}_1 + m_2 \mathbf{g}_2) \cdot \mathbf{r} \} = \sum_j \Psi_j \exp (i \mathbf{G}_j \cdot \mathbf{r}). \end{aligned} \quad (29)$$

Дискретность сетки в конфигурационном пространстве приводит, в соответствии с теоремой Найквиста – Котельникова – Шеннона, к ограниченности спектра функции в обратном пространстве, то есть к замене бесконечной суммы в (27), (29) конечной, аналогично переходу от (15) к (17):

$$\Psi(\mathbf{r}) = \sum_{m_1=-(N_{lines}-1)}^{N_{lines}-1} \sum_{m_2=-(N_{lines}-1)}^{N_{lines}-1} \Psi_{m_1, m_2} \exp \{ i (m_1 \mathbf{g}_1 + m_2 \mathbf{g}_2) \cdot \mathbf{r} \}. \quad (30)$$

При этом максимальные значения векторов обратной решетки будут равны $N_{lines} \mathbf{g}_{1,2}$, что задает ячейку Браве в обратном пространстве (красный ромб на рис. 2б). На основе последней с помощью параллельных переносов (которые не нарушают справедливости разложения (29)) строится ячейка Фигнера – Зейтца в обратном пространстве, известная в физике твердого тела как первая зона Бриллюэна (синий шестиугольник на рис. 2б), в наибольшей степени соответствующая симметрии рассматриваемой задачи.

В нашем моделировании мы использовали величину $\Delta x \approx 0.007487 \text{ \AA}$, близкую к шагу квадратной сетки (см. предыдущий раздел). Остальные параметры моделирования совпадают в обоих подходах.

5. Классификация стационарных состояний и выбор затравочных функций. Задаваемая в начальный момент времени волновая функция общего вида $\Psi(x, y, 0)$, например, в виде несимметричной гауссианы

$$\psi(x, y) = \frac{1}{\pi\sigma_x\sigma_y} \exp\left(-\frac{(x-x_0)^2}{2\sigma_x^2} - \frac{(y-y_0)^2}{2\sigma_y^2}\right), \quad (31)$$

содержит в себе, вообще говоря, все собственные функции гамильтониана (2), и описанный выше спектральный метод возвращает полный набор уровней энергии поперечного движения в потенциальной яме (5). Однако, удобнее задавать начальные волновые функции специального вида, представляющие собой суперпозиции собственных функций, обладающих симметрией только одного определенного типа.

Из теории групп известно (см., например, [22]), что группа симметрии нашей треугольной потенциальной ямы — группа C_{3v} — имеет два одномерных неприводимых представления A_1 и A_2 и одно двумерное неприводимое представление E . Элементами группы являются тождественное преобразование I , повороты R^2 (на углы $2\pi/3$ и $4\pi/3$, соответственно), отражение в «вертикальной» плоскости P , а также комбинации PR и PR^2 . Функция, остающаяся неизменной при всех преобразованиях симметрии треугольника, образует базис неприводимого представления A_1 . Затравочную функцию, удовлетворяющую этому требованию, легко построить, подвергнув (31) всем преобразованиям группы и собрав из них суперпозицию с одинаковыми коэффициентами:

$$\psi^{(A_1)} = \psi + R\psi + R^2\psi + P\psi + PR\psi + PR^2\psi \quad (32)$$

(рис. 3, слева). Функция, меняющая знак при преобразованиях, содержащих отражение, преобразуется по неприводимому представлению A_2 :

$$\psi^{(A_2)} = \psi + R\psi + R^2\psi - P\psi - PR\psi - PR^2\psi. \quad (33)$$

Базис двумерного неприводимого представления E образуют линейные комбинации с комплексными коэффициентами:

$$\psi_1^{(E)} = \psi + e^{2\pi i/3}R\psi + e^{4\pi i/3}R^2\psi + P\psi + e^{-2\pi i/3}PR\psi + e^{-4\pi i/3}PR^2\psi, \quad (34)$$

$$\psi_2^{(E)} = \psi + e^{-2\pi i/3}R\psi + e^{-4\pi i/3}R^2\psi + P\psi + e^{2\pi i/3}PR\psi + e^{4\pi i/3}PR^2\psi, \quad (35)$$

так что $\psi_2^{(E)} = \psi_1^{(E)*}$. Эти функции переходят друг в друга при отражениях, а при поворотах приобретают фазовый множитель. Для наших целей, однако, будет удобно выбрать в качестве затравочных функций вещественную и мнимую части (34):

$$\psi_R^{(E)} = \text{Re } \psi_1^{(E)}, \quad \psi_I^{(E)} = \text{Im } \psi_1^{(E)} \quad (36)$$

(рис. 3, справа), поскольку известно, что полный набор собственных функций вещественного гамильтониана всегда можно выбрать вещественным.

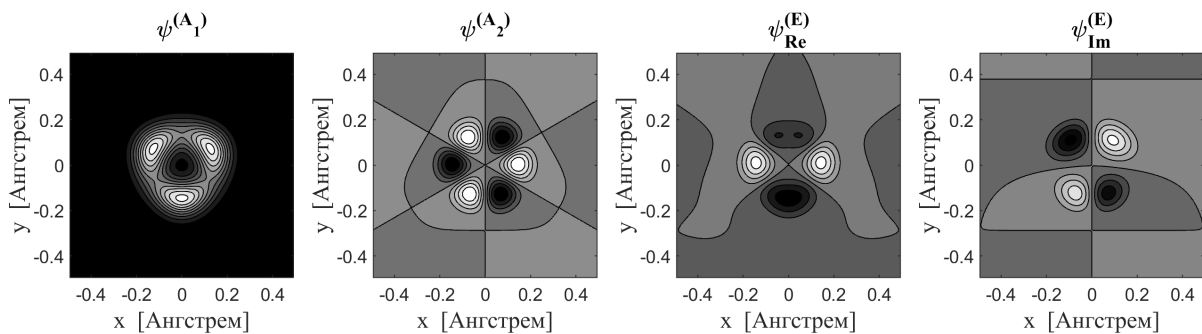


Рис. 3. Затравочные волновые функции (32), (33) и (36)
Fig. 3. Initial waveforms with specific symmetry (32), (33) and (36)

Подстановка одной из функций (32), (33), (36) в (7) приводит к нахождению уровней энергии связанных состояний в нашей потенциальной яме, отвечающих собственным функциям гамильтониана с соответствующим типом симметрии.

6. Обсуждение результатов. В таблице 1 перечислены уровни энергии поперечного движения позитрона с энергией продольного движения $E_z = 1.5$ ГэВ, найденные с помощью моделирования на квадратной сетке (слева) и на гексагональной сетке (справа). Данный выбор энергии продольного движения обусловлен тем обстоятельством, что в этом случае в потенциальной яме (5) имеются всего два связанных состояния: невырожденное основное, обладающее симметрией типа A_1 , и двукратно вырожденное первое возбужденное, обладающее симметрией типа E .

Таблица 1
Table 1

Уровни энергии поперечного движения позитрона (в эВ) с $E_z = 1.5$ ГэВ в яме (5), найденные численно на квадратной и гексагональной сетках
Energy levels of transverse motion of a positron (in eV) with $E_z = 1.5$ GeV in a well (5), found numerically on square and hexagonal grids

Квадратная сетка			Гексагональная сетка		
A_1	E_R	E_I	A_1	E_R	E_I
0.15028			0.15040		
0.29277	0.29277	0.29281		0.29422	0.29422

Мы видим, что, помимо небольших отличий в найденных численно уровнях энергии стационарных состояний, моделирование на квадратной сетке приводит к появлению двух типов артефактов: появление ложных уровней энергии, несвойственных данному типу симметрии волновой функции, и возникновение расщепления по энергии состояний, которые в силу симметрии гамильтониана должны быть вырожденными.

Причина появления артефактов первого типа заключается в том, что функция с определенной симметрией, такая как (32) или $\psi_R^{(E)}$ из (36), будучи заданной на дискретной сетке, не обладающей соответствующей симметрией, будет проявлять себя как суперпозиция функций с этими двумя типами симметрии.

Кроме того, в случае квадратной сетки наблюдается артефакт второго типа — «нефизическое» расщепление уровней, соответствующих $\psi_R^{(E)}$ и $\psi_I^{(E)}$ для состояний, которые, в силу симметрии задачи, должны быть строго вырожденными. Причина такого расщепления заключается в том, что потенциал (5), заданный на квадратной области, фактически, не будет обладать симметрией $3v$, обуславливающей данное вырождение.

Результаты моделирования на гексагональной сетке свободны от обоих этих недостатков.

Развитый метод будет использован в дальнейшем при исследовании квантового хаоса в данной системе. Проблематика квантового хаоса (см., например, [23, 24]) означает поиск отличий в поведении квантовых систем, чей классический аналог обладает хаотической динамикой, от поведения систем, чей классический аналог обладает регулярной динамикой. Проявления квантового хаоса в аксиальном каналировании электронов в кристалле кремния в направлении $\langle 110 \rangle$ исследовались ранее в работах [11, 12, 13, 17], при каналировании электронов в направлении $\langle 100 \rangle$ — в работах [14, 15, 16], при каналировании позитронов в направлении $\langle 100 \rangle$ — в работах [15, 18, 19].

Список литературы

1. Robinson M.T., Oen O.S. Computer Studies of the Slowing Down of Energetic Atoms in Crystals. *Phys. Rev.* 1963;132(6):2385–2398. DOI: 0.1103/PhysRev.132.2385
2. Ахиезер А.И., Шульга Н.Ф. Электродинамика высоких энергий в веществе. М., Наука; 1993. 344 с.
3. 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. *УФН.* 1995;165(10):1165–1192. DOI: 10.3367/UFNr.0165.199510c.1165
4. Gemmel D.S. Channeling and related effects in the motion of charged particles through crystals. *Rev. Mod. Phys.* 1974;46(1):129–227. DOI: 10.1103/RevModPhys.46.129
5. Uggerhøj U.I. The interaction of relativistic particles with strong crystalline fields, *Rev. Mod. Phys.* 2005;77(4):1131–1171. DOI: 10.1103/RevModPhys.77.1131
6. Линдхард Й. Влияние кристаллической решетки на движение быстрых заряженных частиц. *УФН.* 1969;99(2):249–296. DOI: 10.3367/UFNr.0099.196910c.0249
7. Исупов А.Ю., Сыщенко В.В., Парахин А.С. Об устойчивости движения позитронов вблизи направления $\langle 111 \rangle$ кристалла кремния. *Прикладная математика & Физика.* 2023;55(1):49–56. DOI 10.52575/2687-0959-2023-55-1-49-56
8. Feit M.D., Fleck J.A., Jr., Steiger A. Solution of the Schrödinger equation by a spectral method. *Journal of Computational Physics* 1982;47:412–433. DOI:10.1016/0021-9991(82)90091-2

9. Scholz D., Weyrauch M. A note on the Zassenhaus product formula. *J. Math. Phys.* 2006;47:033505. DOI: 10.1063/1.2178586
10. Серов В.В. Численные методы решения нестационарных квантовомеханических задач. Саратов, Новый ветер; 2011. 56 с.
11. Шульга Н.Ф., Сыщенко В.В., Тарновский А.И., Исупов А.Ю. Проявления квантового хаоса в аксиальном каналировании электронов. *Поверхность. Рентген., синхротрон. и нейтрон. исслед.* 2015;7:72–76. DOI: 10.7868/S0207352815070197
12. Shul'ga N.F., Syshchenko V.V., Tarnovsky A.I., Isupov A.Yu. Structure of the channeling electrons wave functions under dynamical chaos conditions. *Nuclear Instrum. Methods B.* 2016;370:1–9. DOI: doi.org/10.1016/j.nimb.2015.12.040
13. Shul'ga N.F., Syshchenko V.V., Tarnovsky A.I., Isupov A.Yu. Wave functions of channeling electrons in regular and chaotic cases. *Journal of Physics: Conference Series*, 2016;732:012028. DOI: 10.1088/1742-6596/732/1/012028
14. Shul'ga N.F., Syshchenko V.V., Tarnovsky A.I., Solovyev I.I., Isupov A.Yu. Positrons vs electrons channeling in silicon crystal: energy levels, wave functions and quantum chaos manifestations. *Journal of Instrumentation.* 2018;13:C01017. DOI: 10.1088/1748-0221/13/01/C01017
15. Shul'ga N.F., Syshchenko V.V., Tarnovsky A.I., Dronik V.I., Isupov A.Yu. Regular and chaotic motion domains in the channeling electron's phase space and mean level density for its transverse motion energy. *Journal of Instrumentation.* 2019;14:C12022. DOI: 10.1088/1748-0221/14/12/C12022
16. Сыщенко В.В., Тарновский А.И., Исупов А.Ю., Соловьев И.И. Структура областей регулярного движения в фазовом пространстве каналированных электронов. *Рентгеновские синхротронные и нейтронные исследования.* 2020;3:103–108. DOI: 10.31857/S1028096020030188
17. Сыщенко В.В., Тарновский А.И. Статистические свойства уровней энергии поперечного движения при каналировании электронов в кристалле кремния. *Рентгеновские синхротронные и нейтронные исследования.* 2021;7:84–88. DOI: 10.31857/S1028096021070207
18. Syshchenko V.V., Tarnovsky A.I., Dronik V.I. Channeling in crystals and quantum chaos. Partial differential equations and related topics (PDERT'22): collection of materials of the International Conference. Belgorod, Publishing house "BelSU" NRU "BelSU"; 2022:188–190.
19. Сыщенко В.В., Тарновский А.И., Дроник В.И., Исупов А.Ю. Расщепление уровней энергии поперечного движения позитронов при каналировании в направлении $[100]$ кристалла кремния. *Рентгеновские синхротронные и нейтронные исследования.* 2022;3:79–88. DOI: 10.31857/S1028096022030207
20. Киттель Ч. Введение в физику твердого тела. М., Наука; 1978. 791 с.
21. Сыщенко В.В., Сыщенко В.Г. Теория твердого тела для начинающих. М.–Ижевск, Регулярная и хаотическая динамика; 2022. 260 с.
22. Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М. Теоретическая физика. Т. 3. Квантовая механика (нерелятивистская теория). М., Наука; 1989. 768 с.
23. Gutzwiller M.C. *Chaos in Classical and Quantum Mechanics*, New York, Springer-Verlag; 1990. 432 p.
24. Райхл Л.Е. Переход к хаосу в консервативных классических и квантовых системах. М.–Ижевск: Регулярная и хаотическая динамика; 2008. 756 с.

References

1. Robinson M.T., Oen O.S. Computer Studies of the Slowing Down of Energetic Atoms in Crystals. *Phys. Rev.* 1963;132(6):2385–2398. DOI: 0.1103/PhysRev.132.2385
2. Akhiezer A.I., Shul'ga N.F. *High-Energy Electrodynamics in Matter*. Gordon and Breach; 1996. 400 p.
3. Akhiezer A.I., Shul'ga N.F., Truten' V.I., Grinenko A.A., Syshchenko V.V. Dynamics of high-energy charged particles in straight and bent crystals. *Physics-Uspokhi.* 1995;38:1119–1145. DOI: 10.1070/PU1995v038n10ABEH000114
4. Gemmel D.S. Channeling and related effects in the motion of charged particles through crystals. *Rev. Mod. Phys.* 1974;46(1):129–227. DOI: 10.1103/RevModPhys.46.129
5. Uggerhøj U.I. The interaction of relativistic particles with strong crystalline fields, *Rev. Mod. Phys.* 2005;77(4):1131–1171. DOI: 10.1103/RevModPhys.77.1131
6. Lindhard J. Influence of Crystal Lattice on Motion of Energetic Charged Particles. *Kongel. Dan. Vidensk. Selsk., Mat.-Fys. Medd.* 1965;34(14):1–64.
7. Isupov Alexander, Syshchenko Vladislav, Parakhin Alexander. On the stability of the positron's motion near $\langle 111 \rangle$ direction of the Silicon crystal. *Applied Mathematics & Physics.* 2023;55(1): 49–56. (in Russian) DOI 10.52575/2687-0959-2023-55-1-49-56
8. Feit M.D., Fleck J.A., Jr., Steiger A. Solution of the Schrödinger equation by a spectral method. *Journal of Computational Physics* 1982;47:412–433. DOI:10.1016/0021-9991(82)90091-2
9. Scholz D., Weyrauch M. A note on the Zassenhaus product formula. *J. Math. Phys.* 2006;47:033505. DOI: 10.1063/1.2178586
10. Serov V.V. Numerical Methods for Nonstationary Quantum Mechanical Problems Solving. Saratov, Novy Veter; 2011. 56 p. (in Russian).

11. Shul'ga NF., Syshchenko VV., Tarnovsky AI., Isupov AYu. Quantum Chaos Effects in the Axial Channeling of Electrons. *Journal of Surface Investigation: X-ray, Synchrotron and Neutron Techniques*. 2015;9(4):721–725. DOI: 10.7868/S0207352815070197
12. Shul'ga NF., Syshchenko VV., Tarnovsky AI., Isupov AYu. Structure of the channeling electrons wave functions under dynamical chaos conditions. *Nuclear Instrum. Methods B*. 2016;370:1–9. DOI: doi.org/10.1016/j.nimb.2015.12.040
13. Shul'ga NF., Syshchenko VV., Tarnovsky AI., Isupov AYu. Wave functions of channeling electrons in regular and chaotic cases. *Journal of Physics: Conference Series*. 2016;732:012028. DOI: 10.1088/1742-6596/732/1/012028
14. Shul'ga NF., Syshchenko VV., Tarnovsky AI., Solovyev II., Isupov AYu. Positrons vs electrons channeling in silicon crystal: energy levels, wave functions and quantum chaos manifestations. *Journal of Instrumentation*. 2018;13:C01017. DOI: 10.1088/1748-0221/13/01/C01017
15. Shul'ga NF., Syshchenko VV., Tarnovsky AI., Dronik VI., Isupov AYu. Regular and chaotic motion domains in the channeling electron's phase space and mean level density for its transverse motion energy. *Journal of Instrumentation*. 2019;14:C12022. DOI: 10.1088/1748-0221/14/12/C12022
16. Syshchenko VV., Tarnovsky AI., Isupov AYu., Solovyev II. Structure of Regions of Regular Motion in the Phase Space of Channeled Electrons. *Journal of Surface Investigation: X-ray, Synchrotron and Neutron Techniques*. 2020;14 (2):306–311. DOI: 10.1134/S1027451020020354
17. Syshchenko VV., Tarnovsky AI. Statistical Properties of the Transverse-Motion Energy Levels for Channeling Electrons in a Silicon Crystal under Dynamical Chaos Conditions. *Journal of Surface Investigation: X-ray, Synchrotron and Neutron Techniques*. 2021;15(7):84–88. DOI: 10.1134/S1027451021040200
18. Syshchenko VV., Tarnovsky AI., Dronik VI. Channeling in crystals and quantum chaos. Partial differential equations and related topics (PDERT'22): collection of materials of the International Conference. Belgorod, Publishing house "BelSU" NRU "BelSU"; 2022:188–190.
19. Shul'ga NF., Syshchenko VV., Tarnovsky AI., Dronik VI., Isupov AYu. Splitting of the Transverse-Motion Energy Levels of Positrons during Channeling in the [100] Direction of a Silicon Crystal. *Journal of Surface Investigation: X-ray, Synchrotron and Neutron Techniques*. 2021;15(Suppl. 1):79–88. DOI: 10.1134/S1027451022020203
20. Kittel C. Introduction to Solid State Physics. John Wiley & Sons; 2005. 680 p.
21. Syshchenko VV., Syshchenko VG. Solid state theory for beginners. M.–Izhevsk, Regularnaya i haoticheskaya dinamika Publ.; 2022. 260 p. (in Russian)
22. Landau LD., Lifshitz EM. Quantum Mechanics. Non-relativistic Theory, Vol. 3 of Course of Theoretical Physics. Oxford, Pergamon Press; 1977. 677 p.
23. Gutzwiller MC. Chaos in Classical and Quantum Mechanics. New York, Springer-Verlag; 1990. 432 p.
24. Reichl LE. The Transition to Chaos: Conservative Classical Systems and Quantum Manifestations, 2nd ed. New York, Springer; 2004. 675 p.

Конфликт интересов: о потенциальном конфликте интересов не сообщалось.

Conflict of interest: no potential conflict of interest related to this article was reported.

Поступила в редакцию 21.12.2023

Received December 21, 2023

Поступила после рецензирования 01.02.2024

Revised February 1, 2024

Принята к публикации 05.02.2024

Accepted February 5, 2024

СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ

Сыщенко Владислав Вячеславович – доктор физико-математических наук, доцент, профессор кафедры теоретической и экспериментальной физики, Белгородский государственный национальный исследовательский университет, г. Белгород, Россия

Парахин Александр Сергеевич – аспирант, Белгородский государственный национальный исследовательский университет, г. Белгород, Россия

INFORMATION ABOUT THE AUTHORS

Vladislav V. Syshchenko – Doctor of Physical and Mathematical Sciences, Associate Professor, Professor of the Department of Theoretical and Experimental Physics, Belgorod National Research University, Belgorod, Russia

Alexander S. Parakhin – Postgraduate Student, Belgorod National Research University, Belgorod, Russia