

Волновые функции стационарных состояний поперечного движения позитронов с энергиями 5 и 20 ГэВ при каналировании в направлении $\langle 111 \rangle$ кристалла кремния

Исупов А. Ю.¹, Сыщенко В. В.², Тарновский А. И.², Парахин А. С.²

¹ Лаборатория физики высоких энергий имени В. И. Векслера и А. М. Балдина
Международная межправительственная организация Объединенный институт ядерных исследований,
Россия, 141980, г. Дубна, ул. Академика Балдина, 4

² 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. Фinitное движение частицы в поперечной плоскости называется аксиальным каналированием и может квантоваться. В статье представлены полные каталоги найденных численно уровней энергии поперечного движения позитронов с энергиями 5 и 20 ГэВ, каналирующих в направлении $\langle 111 \rangle$ кристалла кремния, и соответствующих этим уровням волновых функций стационарных состояний. Дана классификация найденных состояний по неприводимым представлениям группы C_{3v} .

Ключевые слова: каналирование, быстрые частицы, высокие энергии, позитроны, кремний, стационарные состояния, уровни энергии

Для цитирования: Исупов А. Ю., Сыщенко В. В., Тарновский А. И., Парахин А. С. 2024. Волновые функции стационарных состояний поперечного движения позитронов с энергиями 5 и 20 ГэВ при каналировании в направлении $\langle 111 \rangle$ кристалла кремния. *Прикладная математика & Физика*, 56(4): 320–327. DOI 10.52575/2687-0959-2024-56-4-320-327

Short Communication

Wave Functions of the Transverse Motion Stationary States of the 5 and 20 GeV Positrons Channeling in $\langle 111 \rangle$ Direction of the Silicon Crystal

Alexander Yu. Isupov¹, Vladislav V. Syshchenko², Arthur I. Tarnovsky², Alexander S. Parakhin²

¹ Veksler and Baldin Laboratory of High Energy Physics
International Intergovernmental Organization Joint Institute for Nuclear Research,
4 Baldin St., Dubna 141980, Russia

² 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 the axial channeling and can be quantized. This paper presents the full catalogue of the transverse motion energy levels and the corresponding wave functions computed numerically for the positrons with energies of 5 and 20 GeV channeling in the $\langle 111 \rangle$ direction of the silicon crystal. The classification of these stationary states according to irreducible representations of the C_{3v} group is given.

Keywords: Channeling, Fast Particles, High Energy, Positrons, Silicon, Stationary States, Energy Levels

For citation: Isupov A. Yu., Syshchenko V. V., Tarnovsky A. I., Parakhin A. S. 2024. Wave Functions of the Transverse Motion Stationary States of the 5 and 20 GeV Positrons Channeling in $\langle 111 \rangle$ Direction of the Silicon Crystal. *Applied Mathematics & Physics*, 56(4): 320–327. (in Russian) DOI 10.52575/2687-0959-2024-56-4-320-327

1. Введение. Быстрая заряженная частица, движущаяся в кристалле вблизи одной из плотно упакованных атомами кристаллографических осей, может захватываться в образованную этими осями потенциальную яму, совершая фinitное движение в плоскости, перпендикулярной соответствующей оси, и аномально глубоко проникая в кристалл. Такое явление называется аксиальным каналированием. Оно было предсказано на основе численного моделирования в [?]; последующие теоретические и экспериментальные исследования отражены в многочисленных монографиях и обзорах (см., например,

[?, ?, ?]). Движение частицы в режиме аксиального каналирования с хорошей точностью может быть описано как движение в непрерывном потенциале атомной цепочки, то есть в потенциале, усредненном вдоль оси цепочки [?]. В таком потенциале сохраняется продольная компонента импульса частицы p_z , и задача о движении частицы сводится к двумерной задаче о движении в поперечной плоскости (x, y) .

При движении положительно заряженных частиц (для определенности — позитронов) вблизи направления $\langle 111 \rangle$ кристалла кремния финитное движение в поперечной плоскости происходит в неглубокой потенциальной яме (рис. 1), образованной отталкивающими непрерывными потенциалами трех ближайших соседних атомных цепочек $\langle 111 \rangle$ [?, ?]:

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

где потенциальная энергия частицы в поле уединенной атомной цепочки принята равной [?]

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

(где $U_0 = 58.8$ эВ, $\alpha = 0.37$, $\beta = 2.0$, $R = 0.194 \text{ \AA}$), $a = a_z/\sqrt{6} \approx 2.217 \text{ \AA}$ (где a_z — основной период кристалла кремния, то есть период цепочки $\langle 100 \rangle$), а константа выбрана таким образом, чтобы потенциал в центре треугольника был равен нулю. Глубина центральной ямки (точнее, высота седловой точки потенциала (??)) составляет приблизительно

$$U_{\text{saddle}} = 0.3278 \text{ эВ}. \quad (3)$$

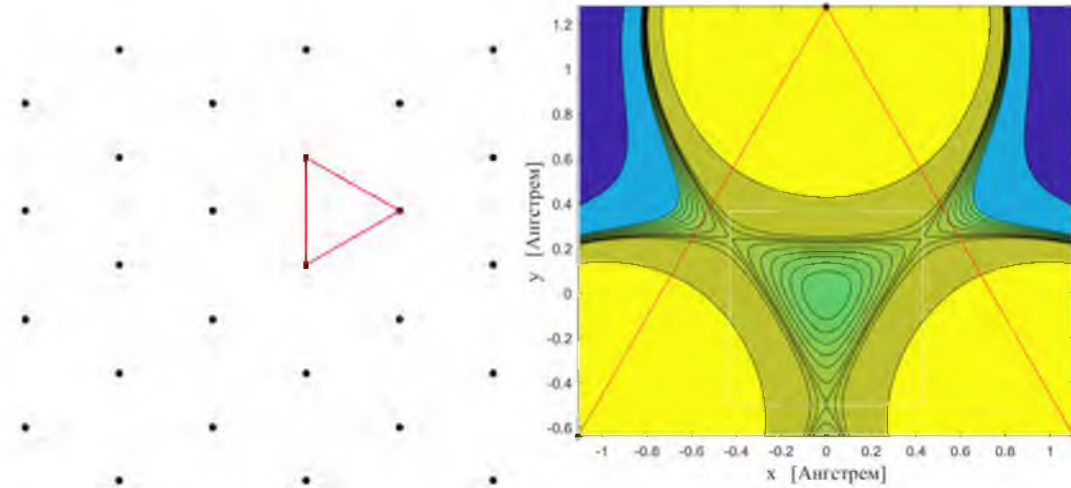


Рис. 1. Слева: проекция решетки кристалла типа алмаза на плоскость (111) . Справа: линии уровня потенциала (??); вблизи начала координат видна потенциальная ямка

Fig. 1. Left: Projection of the diamond-like lattice on the (111) plane. Right: equipotentials of (??); the small potential pit is seen near the origin of coordinates

Состояния поперечного движения релятивистского позитрона в потенциале (??) будут описываться двумерным уравнением Шрёдингера, в котором роль массы частицы играет параметр E_z/c^2 [?], где

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

Численный метод, позволяющий найти уровни энергии E_{\perp} и волновые функции стационарных состояний в яме (??), подробно описан в [?, ?].

2. Классификация стационарных состояний и выбор затравочных функций. Потенциал (??) обладает симметрией равностороннего треугольника. Из теории групп известно (см., например, [?]), что такая симметрия описывается группой C_{3v} , элементами которой являются тождественное преобразование I , повороты R и R^2 (на углы $2\pi/3$ и $4\pi/3$, соответственно), отражение в «вертикальной» плоскости P , а также комбинации PR и PR^2 . Эта группа имеет два одномерных неприводимых представления A_1 и A_2 и одно двумерное неприводимое представление E , по которым будут классифицироваться все стационарные состояния частицы в яме (??).

Для численного нахождения уровней энергии и волновых функций стационарных состояний, относящихся к выбранному представлению, нашему алгоритму требуется задать затравочную функцию, относящуюся к тому же представлению. Графики таких функций представлены на рис. 2.

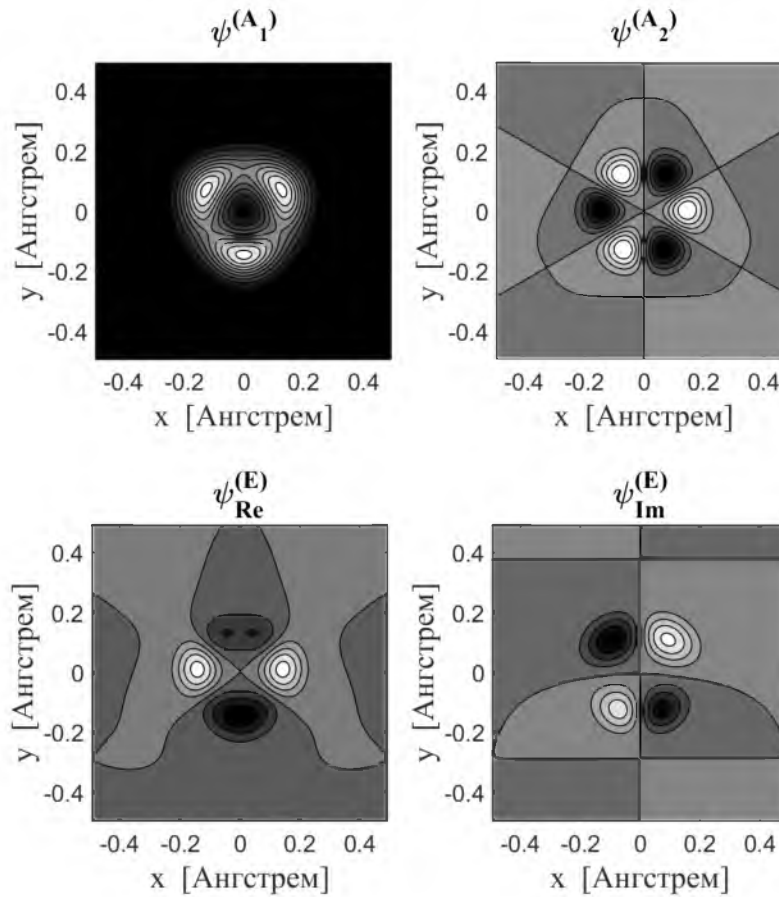


Рис. 2. Затрафовочные волновые функции, образующие базисы неприводимых представлений группы C_{3v}
 Fig. 2. Initial waveforms with specific symmetry that are the bases of the irreducible representations of C_{3v} group

Функция $\psi^{(A_1)}$, остающаяся неизменной при всех преобразованиях симметрии треугольника, образует базис неприводимого представления A_1 . Функция $\psi^{(A_2)}$, меняющая знак при преобразованиях, содержащих отражение, преобразуется по неприводимому представлению A_2 . Пара функций $\psi_{Re}^{(E)}$ и $\psi_{Im}^{(E)}$ представляют собой вещественную и мнимую части функций, составляющих базис двумерного неприводимого представления E :

$$\psi_1^{(E)} = \psi_{Re}^{(E)} + i\psi_{Im}^{(E)}, \quad \psi_2^{(E)} = \psi_{Re}^{(E)} - i\psi_{Im}^{(E)}. \quad (5)$$

Эти функции переходят друг в друга при отражениях, а при поворотах приобретают фазовый множитель. Соответствующие им уровни энергии будут двукратно вырождены.

3. Стационарные состояния поперечного движения каналированного позитрона с энергией 5 ГэВ. Из квазиклассических соображений следует (см., например, [?, ?, ?]), что число уровней энергии в потенциальной яме возрастает с ростом энергии продольного движения (??), в двумерном случае — линейно. Результаты выполненного нами численного моделирования показывают, что для позитронов с $E_z = 5$ ГэВ в яме (??) не будет ни одного связанного состояния, относящегося по своим свойствам симметрии к представлению A_2 группы C_{3v} (характер симметрии состояний этого типа таков, что даже наинизшее из них обладает тремя линиями узлов, что соответствует достаточно высокой кинетической энергии). Найденные значения энергии поперечного движения стационарных состояний, относящихся к представлениям A_1 и E , перечислены в таблице 1.

Таблица 1
 Table 1

Уровни энергии поперечного движения (в эВ) позитрона с $E_z = 5$ ГэВ в яме (??)
 Transverse motion energy levels (eV) for the $E_z = 5$ GeV positron in the well (??)

| | | | |
|-------|---------|---------|---------|
| A_1 | 0.08241 | 0.23490 | 0.32324 |
| E | 0.16267 | 0.24409 | 0.30827 |

На рис. 3 представлены графики волновых функций, соответствующих уровням энергии из таблицы 1, относящиеся к типу симметрии A_1 (верхний ряд), E_{Re} (средний ряд) и E_{Im} (нижний ряд). Белой линией на каждом графике отмечена граница разрешенной для движения с точки зрения классической механики области, определяемая уравнением $U(x, y) = E_{\perp}$.

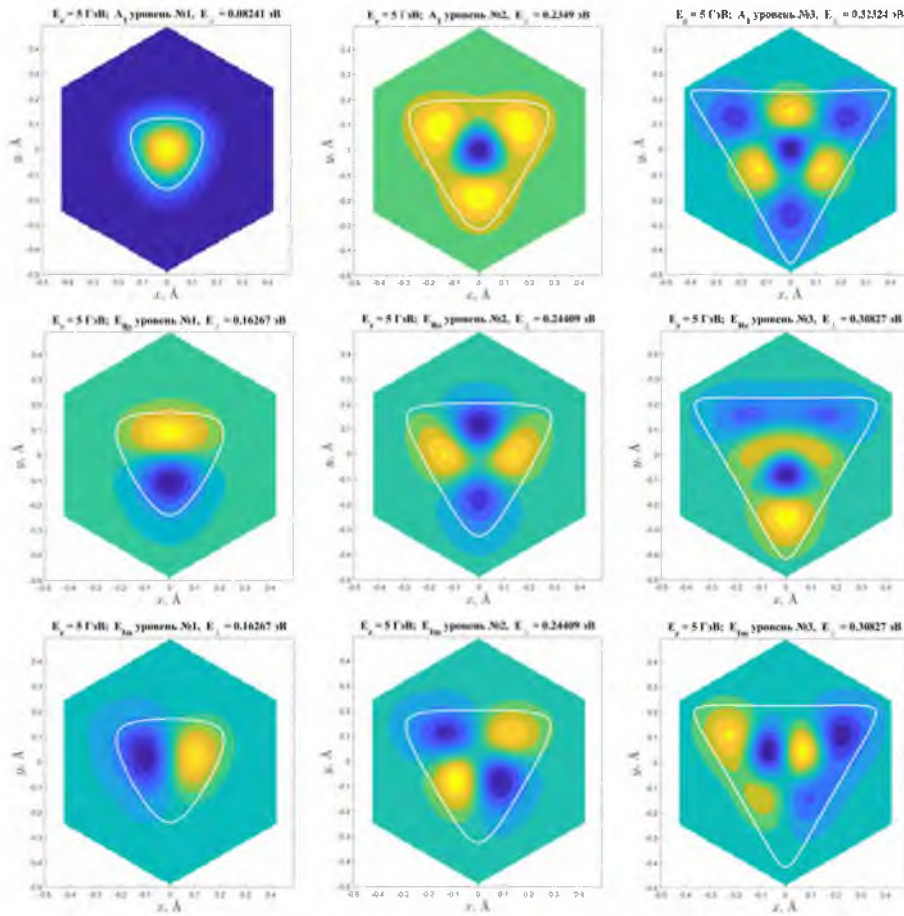


Рис. 3. Волновые функции стационарных состояний дискретного спектра позитронов с $E_z = 5$ ГэВ в потенциале (??)
 Fig. 3. Wave functions of the discrete spectrum stationary states of the $E_z = 5$ GeV positrons in the potential (??)

4. Стационарные состояния поперечного движения каналированного позитрона с энергией 20 ГэВ. Численно найденные для этого случая уровни энергии поперечного движения приведены в таблице 2.

Таблица 2
 Table 2

Уровни энергии поперечного движения (в эВax) позитрона с $E_z = 20$ ГэВ в яме (??)
 Transverse motion energy levels (eV) for the $E_z = 20$ GeV positron in the well (??)

| A_1 | A_2 | E |
|---------|---------|---------|
| 0.04123 | | 0.08195 |
| 0.12070 | | 0.12305 |
| 0.16421 | 0.16477 | 0.15983 |
| 0.19702 | | 0.19915 |
| | | 0.20625 |
| 0.23742 | 0.23994 | 0.23437 |
| | | 0.24817 |
| 0.26969 | | 0.27127 |
| 0.29014 | 0.29012 | 0.27878 |
| 0.30581 | | 0.30440 |
| | 0.31295 | 0.31807 |

Графики соответствующих им волновых функций представлены на рис. 4 (тип симметрии A_1), рис. 5 (тип симметрии A_2), рис. 6 (тип симметрии E_{Re}) и рис. 7 (тип симметрии E_{Im}). Нетрудно заметить, что

структура волновых функций наинизших энергетических состояний совпадает с таковой для случая $E_z = 5$ ГэВ (ср. рис. 3).

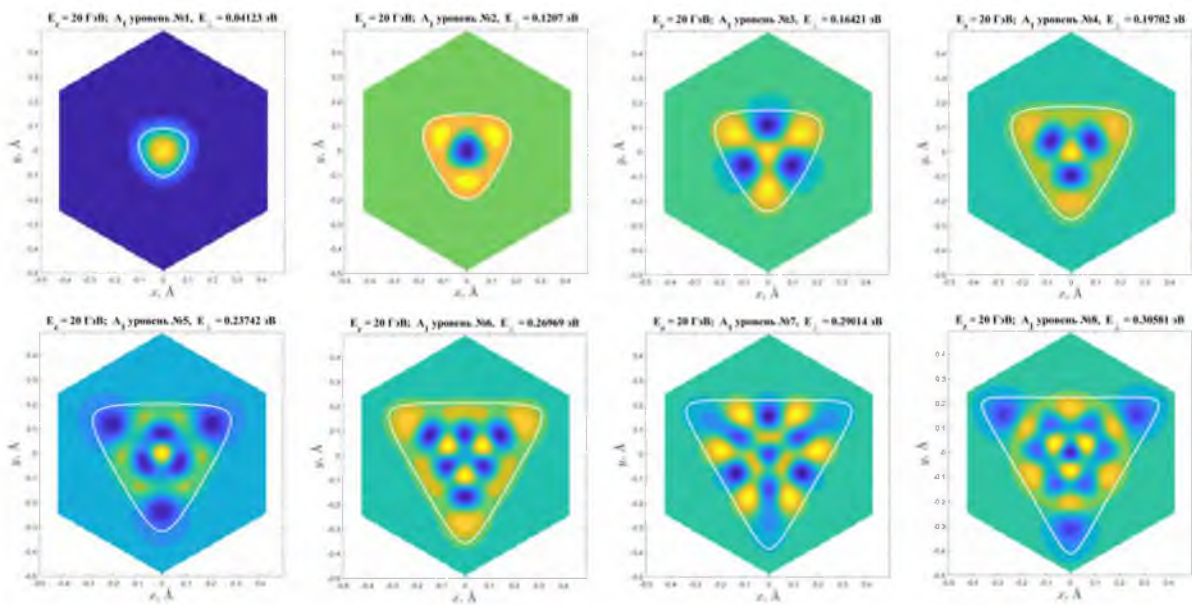


Рис. 4. Волновые функции стационарных состояний дискретного спектра позитронов с $E_z = 20$ ГэВ в потенциале (??), относящиеся к типу симметрии A_1

Fig. 4. Wave functions of the discrete spectrum stationary states of the $E_z = 20$ GeV positrons in the potential (??) that belong to A_1 type of symmetry

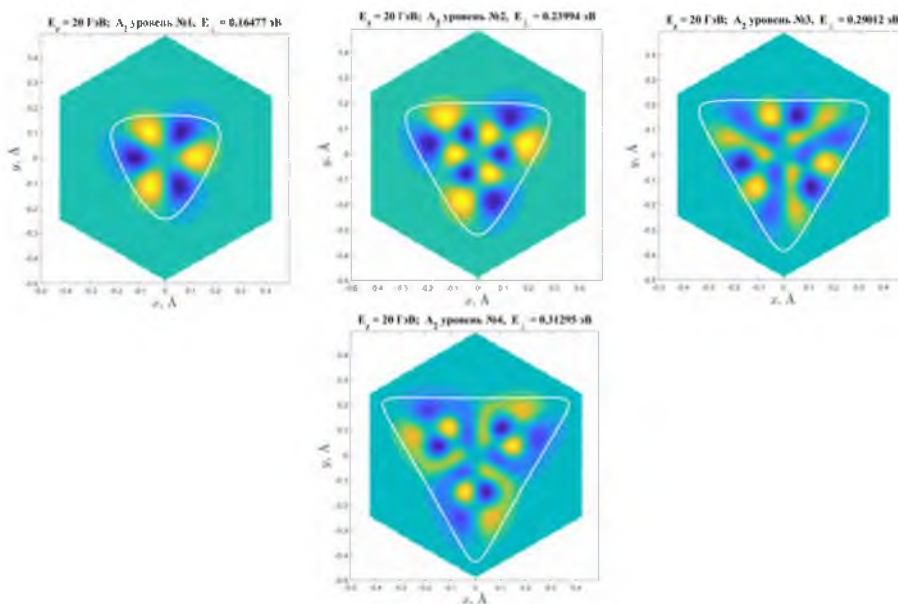


Рис. 5. Волновые функции стационарных состояний дискретного спектра позитронов с $E_z = 20$ ГэВ в потенциале (??), относящиеся к типу симметрии A_2

Fig. 5. Wave functions of the discrete spectrum stationary states of the $E_z = 20$ GeV positrons in the potential (??) that belong to A_2 type of symmetry

5. Заключение. В работе представлены уровни энергии поперечного движения и соответствующие им волновые функции позитронов с энергиями 5 и 20 ГэВ, движущихся в режиме аксиального каналирования вблизи направления $\langle 111 \rangle$ кристалла кремния. Интерес к данной задаче связан с возможностью исследования проявлений квантового хаоса в структуре волновых функций [?, ?]. Подробное обсуждение особенностей волновых функций каналированных позитронов в условиях данной задачи см. в статье [?], где, в частности, приведен полный набор стационарных состояний каналированных позитронов с энергией 6 ГэВ. Отметим также методическую ценность задачи нахождения собственных значений и собственных функций двумерного гамильтониана. Исследование такого «двумерного атома» существенно дополняет стандартный набор задач курса квантовой механики [?].

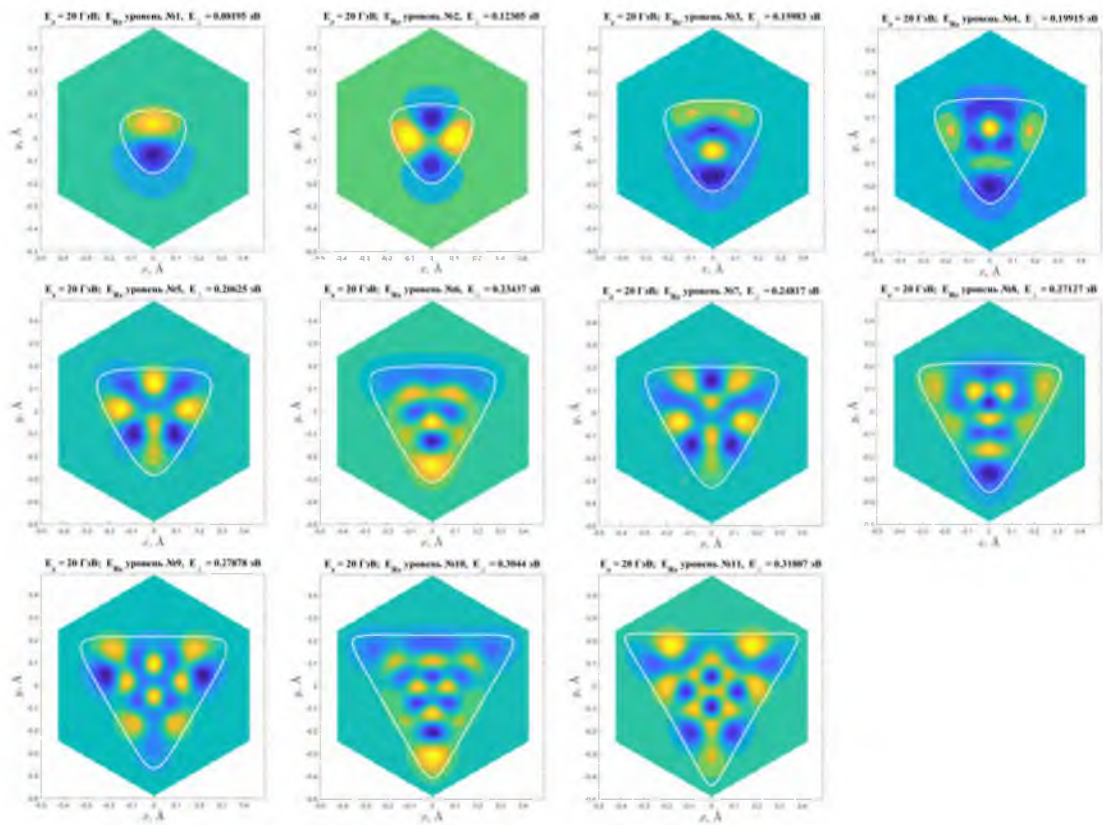


Рис. 6. Волновые функции стационарных состояний дискретного спектра позитронов с $E_z = 20$ ГэВ в потенциале (??), относящиеся к типу симметрии E_{Re}

Fig. 6. Wave functions of the discrete spectrum stationary states of the $E_z = 20$ GeV positrons in the potential (??) that belong to E_{Re} type of symmetry

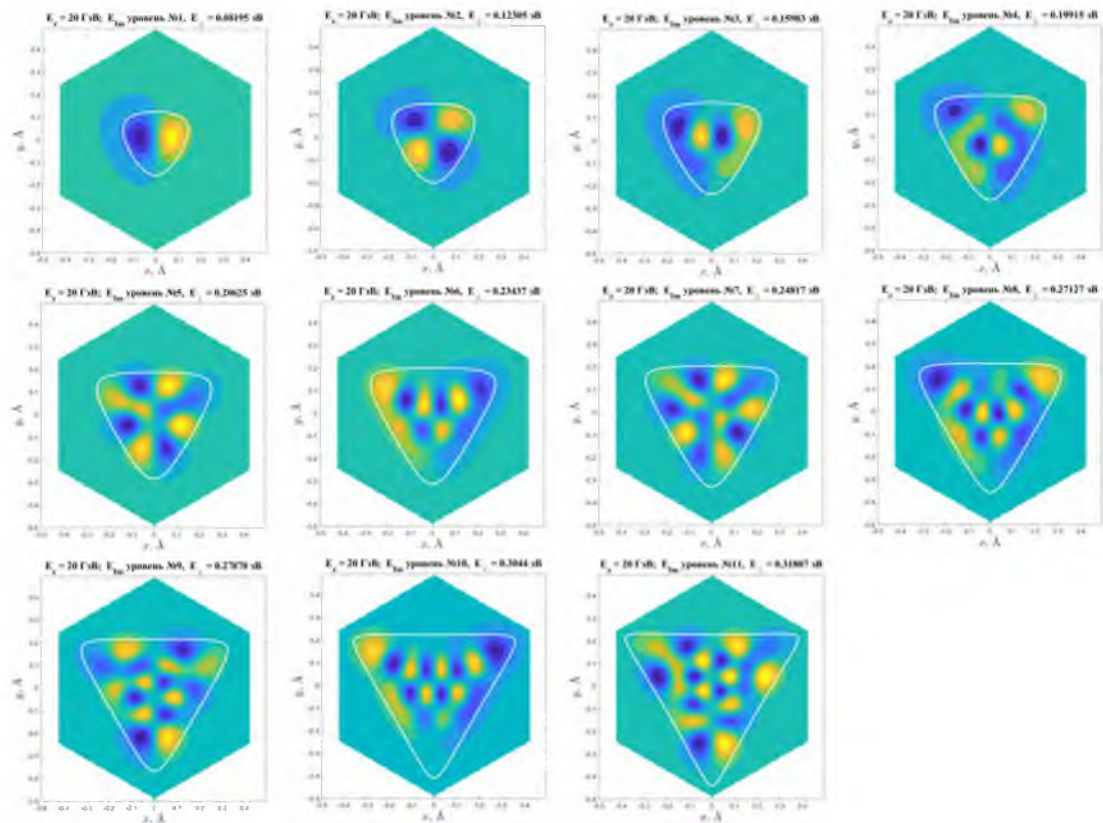


Рис. 7. Волновые функции стационарных состояний дискретного спектра позитронов с $E_z = 20$ ГэВ в потенциале (??), относящиеся к типу симметрии E_{Im}

Fig. 7. Wave functions of the discrete spectrum stationary states of the $E_z = 20$ GeV positrons in the potential (??) that belong to E_{Im} type of symmetry

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 (111) кристалла кремния. *Прикладная математика & Физика.* 2023;55(1):49–56. DOI 10.52575/2687-0959-2023-55-1-49-56
8. Сыщенко В.В., Парахин А.С. Квантовое описание каналирования позитронов вблизи направления (111) кристалла кремния. *Прикладная математика & Физика.* 2024;56(1):50–59 DOI 10.52575/2687-0959-2024-56-50-59
9. Syshchenko V.V., Tarnovsky A.I., Parakhin A.S., Isupov A.Yu. Simulating Quantum States of Positively Charged Particles Channeling along the [111] Direction in a Silicon Crystal. *Journal of Surface Investigation: X-ray, Synchrotron and Neutron Techniques.* 2024;18(2):274–280. DOI 10.1134/S1027451024020186
10. Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М. Теоретическая физика. Т. 3. Квантовая механика (нерелятивистская теория). М., Наука; 1989. 768 с.
11. Syshchenko V.V., Tarnovsky A.I., Isupov A.Yu. Mixed (regular and chaotic) dynamics under the channeling of the high energy positrons in [100] direction of the silicon crystal and Podolskiy-Narimanov distribution. *Journal of Instrumentation* 2024;19:C05005. DOI 10.1088/1748-0221/19/05/C05005
12. Gutzwiller M.C. Chaos in Classical and Quantum Mechanics, New York, Springer-Verlag; 1990. 432 p.
13. Bolotin Y., Tur A., Yanovsky V. Chaos: Concepts, Control and Constructive Use. Springer International Publishing Switzerland; 2017. 281 p. DOI 10.1007/978-3-319-42496-5
14. Сыщенко В.В., Тарновский А.И., Парахин А.С., Исупов А.Ю. Волновые функции позитронов при каналировании в направлении [111] кристалла кремния. *Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования.* 2025 (в печати).
15. Калашников Н.П., Ольчак А.С. Явление каналирования как 1D- и 2D-модели атома в сопутствующей системе координат. *Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования.* 2022;8:108–112. DOI 10.31857/S1028096022050132

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-Uspeski.* 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 (111) 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. Syshchenko Vladislav, Parakhin Alexander. Quantum Description of the Positrons Channeling Near (111) Direction of the Silicon Crystal. *Applied Mathematics & Physics.* 2024; 56(1): 50–59. (in Russian) DOI 10.52575/2687-0959-2024-56-50-59

9. Syshchenko VV., Tarnovsky AI., Parakhin AS., Isupov AYu. Simulating Quantum States of Positively Charged Particles Channeling along the [111] Direction in a Silicon Crystal. *Journal of Surface Investigation: X-ray, Synchrotron and Neutron Techniques*. 2024, 18(2): 274–280. DOI 10.1134/S1027451024020186
10. Landau L.D., Lifshitz EM. Quantum Mechanics. Non-relativistic Theory, Vol. 3 of Course of Theoretical Physics. Oxford, Pergamon Press; 1977. 677 p.
11. Syshchenko VV., Tarnovsky AI., Isupov AYu. Mixed (regular and chaotic) dynamics under the channeling of the high energy positrons in [100] direction of the silicon crystal and Podolskiy-Narimanov distribution. *Journal of Instrumentation* 2024, 19: C05005. DOI 10.1088/1748-0221/19/05/C05005
12. Gutzwiller MC. Chaos in Classical and Quantum Mechanics, New York, Springer-Verlag; 1990. 432 p.
13. Bolotin Y., Tur A., Yanovsky V. Chaos: Concepts, Control and Constructive Use. Springer International Publishing Switzerland; 2017. 281 p. DOI 10.1007/978-3-319-42496-5
14. Syshchenko VV., Tarnovsky AI., Parakhin AS., Isupov AYu. Wave Functions of Positrons under Channeling in [111] Direction of the Silicon Crystal. *Journal of Surface Investigation: X-ray, Synchrotron and Neutron Techniques*. 2025 (in press).
15. Kalashnikov NP., Olchak AS. On the Channeling Phenomenon as 1D and 2D Atomic Models in the Comoving Reference Frame. *Journal of Surface Investigation: X-ray, Synchrotron and Neutron Techniques*. 2022;14(4):659–662. DOI 10.1134/S1027451022030132

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 23.09.2024

Received September 23, 2024

Поступила после рецензирования 05.11.2024

Revised November 5, 2024

Принята к публикации 07.11.2024

Accepted November 7, 2024

СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ

Исупов Александр Юрьевич – доктор физико-математических наук, ведущий научный сотрудник, Лаборатория физики высоких энергий имени В. И. Векслера и А. М. Балдина Международная межправительственная организация Объединенный институт ядерных исследований, г. Дубна, Россия

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

Тарновский Артур Игоревич – кандидат физико-математических наук, доцент, заведующий кафедрой 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

Alexander Yu. Isupov – Doctor of Physical and Mathematical Sciences, Leading Research Associate, Veksler and Baldin Laboratory of High Energy Physics International Intergovernmental Organization Joint Institute for Nuclear Research, Dubna, Russia

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

Arthur I. Tarnovsky – Candidate of Physical and Mathematical Sciences, Associate Professor, Head of the Department of Theoretical and Experimental Physics, Belgorod National Research University, Belgorod, Russia

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

[К содержанию](#)