УДК 539

Н. Ж. ТАКИБАЕВ, В. Н. ЖУМАБЕКОВА

КВАНТОВЫЕ ЭФФЕКТЫ ПРИ КАНАЛИРОВАНИИ ИОНОВ В МОНОКРИСТАЛЛАХ

Даются оценки длины каналирования и гиперканалирования при прохождении быстрой нерелятивитской частицы через монокристалл и ее квантовой фокусировке.

Интерес к наноструктурам, например к тонким монокристаллам, во многом обусловлен необычными физическими явлениями, возникающими в таких структурах, которые, как правило, связаны с их квантовой природой. Возможность их технологического использования придает высокую прикладную значимость исследованиям таких структур.

Один их ярких примеров такого интереса – явление каналирования ускоренных пучков ионов в монокристаллах. В последние годы они стали предметом широких исследований в реальных и компьютерных экспериментах [1–5]. Изучаются эффекты фокусировки пучков, излучения и возбуждения в кристалле, возбуждения самих частиц пучка, деформации волновых функций и т.д., а также пучки разных частиц (от электронов и позитронов до легких и тяжелых ионов), разных энергий, различные типы кристаллов и т.п. [6–9].

Особое внимание уделется вопросам столкновения встречных пучков частиц внутри монокристалла, т.е. на траектории каналирования, и ядерных реакций каналированных частиц с имплантированными ядрами-мишенями [4–7]. Это новое направление в ядерной физике и физике кристаллов часто называют методом стимулирования реакций термоядерного синтеза в упорядоченных структурах или «термоядом в кристаллах» [2, 4, 10]. Важно отметить, что метод отвечает критериям безопасного способа получения полезной энергии, а его успешная практическая реализация будет означать решение проблемы управляемого термоядерного синтеза.

В данной работе рассматриваются два вопроса, касающихся теоретической базы стимулирования ядерных реакций в монокристаллах: вопрос длины каналирования (и гиперканалирования) и вопрос квантовой фокусировки пучка частиц при каналировании.

Глубина каналирования быстрых ионов в монокристаллах. Эффект каналирования имеет место в кристалле, если угол падения быстрой частицы относительно оси кристалла оказывается меньше критического (угол каналирования $\varphi < \varphi_{crit}$). В этом случае частица проникает в межплоскостное пространство кристалла и, многократно рассеиваясь на атомах в узлах решетки, будет двигаться параллельно оси кристалла почти без потерь. Такие частицы способны про-никать в кристалл на аномально большие глубины.

Известно, что потери энергии тяжелой, но нерелятивистской частицы в газах, жидкостях и аморфных твердых телах происходят в основном за счет рассеяния на электронах атомов среды, причем рассеяние на ядрах атомов будет при этом пренебрежимо малым. Эти потери энергии можно оценить, следуя известной формуле Бете–Блоха (см., например, [11]).

При энергиях частицы ~ МэВ, например для протонов или дейтронов, релятивистскими эффектами можно пренебречь.

В средах, имеющих упорядоченную структуру, например в кристаллах, потери энергии такой же частицы зависят от направления движения или, как говорят, от пространственной ее ориентации. Соответственно потери энергии частицы в режиме каналирования или вне этого режима будут существенно отличаться, и они должны рассчитываться по-разному.

Вне режима каналирования потери энергии могут быть оценены, как и в общем случае, по формуле Бете–Блоха, но с учетом фононных колебаний и особенностей энергетического спектра кристаллической решетки [12].

В режиме каналирования потери энергии будут зависеть как от начальной энергии и угла каналирования частицы, так и от типа кристалла и характера его электронных состояний. Точный расчет потери энергии или длины каналирования, на котором в среднем теряется половина энергии, является в этом случае задачей весьма сложной и трудоемкой [13, 14].

Представляется целесообразным для приближенных оценок получить простую формулу длины каналирования, имеющую достаточно ясный физический смысл. Будем считать, что монокристалл является идеальным, т.е. не содержит примесей, деформаций, микротрещин и т.п. В этом случае кристалл обычно представляют, с одной стороны, как жесткую решетку, в узлах которой стоят положительно заряженные ионы, и, с другой стороны, как потенциальную яму, заполненную «газом свободных электронов».

Следуя общим формулам оценки удельных потерь, запишем

$$\frac{dE_k}{dz} = \frac{4\pi n_e Z^2 e^4}{m_e v^2} \ln \frac{\rho_{\max}}{\rho_{\min}} , \qquad (1)$$

где E_k – кинетическая энергия тяжелой частицы, движущейся по направлению z; m_e и e – масса и заряд электрона; n – плотность электронов; z – заряд частицы; v – ее скорость; $r_{\max}$ и $r_{\min}$ – максимальный и минимальный прицельные параметры.

Максимальное значение прицельного параметра обычно связывают со средним значением ионизационного потенциала как некоторой минимальной энергии, необходимой для выбивания электрона из атома. В кристалле такое минимальное значение нужно связать с E_F – энергией Ферми свободных электронов.

Минимальное значение прицельного параметра обычно связывают с максимальной энергией, переданной свободному электрону: $\Delta E_{\max} = 2 m_e v^2$. В кристалле эта величина может зависеть от пространственной ориентации, т.е. от угла каналирования.

Указанные замечания позволяют переписать (1) в виде

$$\frac{dE_k}{dz} = const / v^2,$$

где

$$const = 4\pi Z^2 (e^4 / M) \ln \frac{E_{\max}}{E_F}; \qquad (2)$$

M – масса каналируемой частицы ($E_k = Mv^2/2$). Отсюда найдем длину каналирования, т.е. длину, на которой частица теряет половину своей кинетической энергии:

$$R = \int_0^R dz = \frac{Mv^4}{const} \int_{0.5}^{1} v^3 dv = \frac{M}{4const} v^4 = \frac{E_k^2}{const \cdot M}. \qquad (3)$$

Отметим, что в (3) решение определяется с точностью до логарифмических членов, зависящих от $E_{\max}/E_F$. Кроме того, решение в (3) не имеет смысла при очень малых значениях E_k, когда доминирующими становятся процессы деканалирования и полная остановка частицы внутри кристалла.

Оценим const – величину, определяющую характер каналирования.

Энергия Ферми свободных электронов в простых кристаллах будет: для одновалентных атомов кристалла $E_Ф \approx 4,7$ эВ, и двухвалентных – $E_Ф \approx 8$ эВ.

Ионы решетки, удерживающие электроны на заполненных орбитах, имеют на порядок меньшие размеры: Ә10^{-9} см, чем характерные размеры соответствующих атомов. Средняя энергия ионизации I этих ионов будет порядка: 56 эВ для одновалентных и 120 эВ для двухвалентных. Таким образом, в кристалле электроны могут быть как свободными, так и связанными. Действие этих двух состояний электронного вещества на быстродвижущуюся частицу будет различным.

Рассмотрим случай гиперканалирования: $\varphi << \varphi_{crit} \approx 1^\circ$.

А) Если частица движется между кристаллическими плоскостями в узкой области вблизи центра: $|Dx| < 0,3$, т.е. с большим прицельным параметром относительно ионов в узлах решетки, то ее энергетические потери будут малы и обязаны в основном сопротивлению электронного газа свободных электронов.

Оценки дают, что при кинетических энергиях протонов ~ 1 MeV:

$$const = const_{HC} \approx 4\pi \frac{Z^2 e^4}{M} (\ln \frac{E_r}{E_F} - \ln \frac{M}{m_e}) , (4)$$

т.е. длина гиперканалирования будет $R_{нс} \approx 2,97 \cdot 10^{-2}$ см. Число частиц, которые попадают в режим гиперканалирования, обычно $\leq 30\%$ от общего числа каналированных частиц.

Для большей части частиц угол каналирования близок к критическому, хотя и меньше этого угла $\varphi \leq \varphi_{crit}$.

Б) Частица при движении периодически отражается плоскостями кристалла (колеблется в пространстве между плоскостями), перекрывая большую область канала движения: $|\Delta x| \geq 0,3 \div 0,5$.

В этом случае тяжелая частица будет испытывать сопротивление не только свободных электронов, но и электронов внутренних оболочек атомов (ионов) кристаллической решетки. Тогда $r_{\min}$ и соответственно $E_{\max}$ будет обязано рассеянию на системе связанных электронах в узлах решетки. Тяжелая частица при этом может передавать энергию коллективу таких электронов. Это означает, что в (4) вместо массы свободного электрона нужно поставить m_e^* – эффективную электронную массу, которая может в несколько раз превышать массу свободного электрона. При этом каналированная частица может вызывать дополнительную ионизацию атомов в узлах решетки. Следовательно, торможение частицы вблизи узлов решетки будет происходить уже в более сильном поле отталкивания, что будет вести к ее отражению от узла решетки.

Поэтому отношение констант в случаях каналирования и гиперканалирования можно записать в виде

$$\frac{\chi_{YC}}{\chi_C} \approx \frac{const_C}{const_{HC}} \approx (\Delta Z)^2 \frac{\ln\frac{E_k}{E_F} - \ln\frac{M}{m_e}}{\ln\frac{E_k}{E_F} - \ln\frac{M}{m_e^*}}, \qquad (5)$$

где DZ – средний заряд многократно ионизированного атома решетки.

Можно положить, что $\Delta Z \approx 4 \div 6$, а $m_e^* \approx 10$, тогда отношение длины гиперканалирования к обычной длине каналирования будет иметь порядок $\chi_{нс} / \chi_c \approx 10^2$. Такие оценки хорошо согласуются с данными экспериментов.

Подчеркнем, что точный расчет потерь энергии при каналировании достаточно сложен и, очевидно, сильно зависит от характеристик самого кристалла.

Квантовые эффекты и фокусировка пучка каналированных частиц. Для выявления квантовых эффектов и явления фокусировки при каналировании частиц в монокристалле сведем задачу прохождения быстрой частицы по каналу к модельной задаче усредненного межплоскостного потенциала.

Запишем сначала потенциал взаимодействия быстрой частицы (например, протона), движущейся по каналу, в виде

$$U = \sum_i U_i(|\vec{r} - R_i|), \qquad (6)$$

где i – номер атома в узлах решетки; $\vec{R}_i$ – положение этого атома; а $\vec{r}$ – радиус-вектор движущегося протона.

Протон движется между плоскостями кристалла, т.е. по каналу, и взаимодействует с атомами (ионами) кристаллической решетки. Атомы решетки составляют пространственно упоря- доченные ряды или цепочки как в поперечном сечении относительно оси кристалла, так и вдоль этой оси.

Будем считать, что в любой фиксированный момент времени достаточно учесть взаимодействие протона только с ближайшими атомами решетки. Иными словами, влиянием далеких атомов на движущийся протон можно пренебречь из-за экранировки кулоновских сил полем свободных электронов и полем самих ближних атомов (ионов) решетки.

Рассмотрим сначала потенциал взаимодействия протона с линейной цепочкой атомов, где расстояние между атомами равно d (d – постоянная решетки). Запишем $\vec{r} = z \cdot \vec{n}_z + \vec{\rho}$, где единичный вектор $\vec{n}_z$ направлен по оси канала движения протона, а $\vec{\rho}$ – полярный вектор в плоскости, перпендикулярной этой оси. Запишем далее, что $z = d \cdot l + \tau \cdot d / T$. Это означает, что z-координата отвечает положению протона в решетке относительно линейной цепочки атомов, где l – номер ближайшего к протону атома цепочки. Тогда t будет текущим временем при движении протона внутри ячейки номера l, причем $-T/2 \leq \tau \leq +T/2$, т.е. $\tau = 0$ – время совпадения z-координат протона и атома с номером l, а T – время прохождения протоном одной ячейки.

С учетом взаимодействия протона только с одним – ближайшим атомом цепочки получим из (6) упрощенное выражение

$$U = \sum_i U_i(|\vec{r} - R_i|) = U_{i=l}(|\vec{\rho} + \tau \cdot d / T|) \approx$$

$$\approx \alpha / |\vec{\rho} + \tau \cdot d / T|, \qquad (7)$$

где для простоты рассмотрения взаимодействие между протоном и ионом цепочки взято в обычной кулоновской форме. Итак, потенциал в (7) представляется в виде периодической функции от времени.

Разложим потенциал (7) в ряд Фурье

$$U(t) = \frac{1}{2}b_0 + \sum_{k=1} b_k \cos(k\omega t) \qquad (9)$$

и определим коэффициенты

$$b_k = \frac{2\alpha}{d} K_0(kw\frac{T}{d}\rho), \qquad (10)$$

где $K_0(x)$ – цилиндрические функции мнимого аргумента.

Выделим из потенциала (9) слагаемое, не зависящее от времени, т.е.

$$V_0 = \frac{1}{2}b_0, \qquad (11)$$

где $b_0 = \frac{4\alpha}{d}\{\ln x + \ln[1+\sqrt{1+(2x)^2}\,]\}$, а $x = \frac{\rho}{d}$.

Определим далее гамильтониан $\tilde{H}_0$ в следующей форме:

$$\tilde{H}_0 = H_0 + V_0, \qquad (12)$$

где H_0 – гамильтониан свободного движения протона, а потенциал V_0 есть не зависящая от времени часть потенциала $U(t)$.

Собственные волновые функции гамильтониана $\tilde{H}_0$ обозначим $\Psi_n^0(t)$, а собственные значения – E_n^0. Волновые функции $\Psi_n^0(t)$ будут использоваться далее как базисный набор для определения влияния периодических воздействий со стороны решетки кристалла на быструю частицу.

Рассмотрим теперь временное уравнение Шредингера

$$i\eta\frac{d}{dt}\Psi(t) = (\tilde{H}_0 + V)\Psi(t).$$

(13)

Отметим, что потенциал $V = U(t) - V_0$ по определению является периодической функцией времени, как это следует из (9) и (11).

Если записать представление для полной волновой функции в форме $\Psi = \sum a_n(t)\Psi_n^0(t)$, то можно использовать стандартную процедуру определения решений (см., например, [11]).

Получим из (13) для амплитуд $a_n(t)$ уравнения

$$i\eta\frac{da_n}{dt} = \sum_m V_{nm}(t)a_m,$$

$$V_{nm}(t) = V_{nm}\exp\{\frac{i}{\eta}(E_n - E_m)t\}$$

(14)

и определим следующие начальные условия: $a_n(0) = 1$, $a_m(0) = 0$.

Следуя разложению (9), представим $V_{nm}(t)$ в форме

$$V_{nm}(t) = \sum_k B_{nm}(k)\{\exp[i(w_{nm}+kw)t] + \exp[i(w_{nm}-kw)t]\}, \qquad (15)$$

где $B_{nm}(k) = <\Psi_n^0 | b_k | \Psi_m^0>$, причем $k = 1,2,...$

Потенциал (15) приводит к резонансным переходам между состояниями n и m, если $w_{nm} - kw = 0$ (см. § 35 в [11]). Тогда общее решение можно представить в виде $\Psi = a_n\Psi_n^0 + a_m\Psi_m^0$, где

$$a_n = \cos(\Omega t),\quad a_m = -i\sin(\Omega t),\quad \Omega = |B_{nm}|/\eta. \qquad (16)$$

Отсюда следует, что коэффициент при $|\Psi_n^0|^2$ будет меняться от 0 до 1 с периодом W, причем $\Psi_n^0 \leftrightarrow \Psi_m^0$.

Рассмотрим теперь движение протона не вдоль одиночной цепочки атомов, а по каналу, образованному несколькими рядами атомов. Это ближе к реальному режиму каналирования, когда быстрая частица движется вдоль оси кристалла между атомами ее решетки.

Все приведенные выкладки общего характера остаются при этом в силе. Это касается представления полного потенциала в форме периодической функции времени, его разложения в ряд Фурье, структуры гамильтониана $\tilde{H}_0$ и волновых функций.

Отличие будет в конкретном виде усредненного межплоскостного потенциала и волновых функций Ψ_n^0, значениях частоты W и амплитуд резонансных переходов.

Межплоскостной потенциал V_0 действует в плоскости перпендикулярной оси кристалла, т.е. перпендикулярно направлению канала движения частицы. Точно определить вид такого потенциала очень сложно, так как это задача многих тел, но можно использовать модельные потенциалы. Имеются разные типы таких потенциалов. Так, потенциал Линхарда получается как результат усреднения вдоль канала движения частицы кулоновского экранированного потенциала [1]:

$$V_L(\rho) = \frac{ZZ_k e^2}{d} \ln\left(\frac{C^2 a^2}{\rho^2} + 1\right), \qquad (17)$$

где $C^2 = 3$; a – параметр экранирования. Другие типы потенциалов отличаются по функции экранирования.

Отметим, что поток частиц, движущихся в таком потенциале, будет логарифмически расти к центру канала. Отличия по плотности могут достигать трех порядков. Кроме того, точное решение дает наличие в распределении тонкой структуры максимумов и минимумов.

Простая модель межплоскостного потенциала может быть получена для монокристалла с кубической структурой введением переменных x, y. На отрезке $-d/2 \le x \le d/2$ потенциал может быть записан в виде

$$V_0(x) = A \cdot x^2, \quad A = m\omega^2/2. \qquad (18)$$

Аналогичный вид имеет потенциал и по переменной y.

Решения уравнения Шредингера с потенциалом (18) выражаются, как известно, через функции Эрмита

$$\Psi_n^0 \quad \cancel{co}nst \cdot \exp(- \quad \xi^2/2) \quad H_n(\xi), \qquad (19)$$

где $\xi = x\sqrt{m\omega/\eta}$; $const = \left(\frac{m\omega}{h\pi}\right)^{1/4} \cdot \frac{1}{\sqrt{2^n n!}}$, а $H_n(\xi)$ есть функция Эрмита номера n.

Оценим среднеквадратичные радиусы. Использовав известные соотношения между функциями Эрмита

$$xH_n(x) = \frac{1}{2}H_{n+1} + nH_{n-1}, \qquad (20)$$

выражения для энергий уровней $E_n^0 = (n+1/2)\cdot\eta\omega$ и второе равенство в (18), найдем соотношения для состояния номера n

$$(\overline{x^2})_n = \frac{E_n}{2A}. \qquad (21)$$

Отметим, что волновые функции с малыми значениями n имеют существенно меньшие значения среднеквадратичных радиусов. Другими словами, волновые функции низших уровней характеризуются большей степенью локализации в центре канала:

$$\frac{(\overline{x^2})_0}{(\overline{x^2})_n} = \frac{1}{2n+1}. \qquad (22)$$

Если для решений (19) ввести ограничение по высоте и ширине межплоскостной потенциальной ямы, то число состояний будет конечным. Можно оценить максимальное число этих состояний $N = n_{\max}$, поскольку N^2 будет пропорционально массе каналируемой частицы и высоте барьера и обратно пропорционально квадрату ширины потенциальной ямы.

Например, при каналировании протона, если высота барьера между каналами » 100 эВ, а ширина потенциальной ямы ≈ 1 Å, то оценки дают, что число состояний N » 17. В этих же условиях при каналировании дейтрона число состояний будет уже » 24.

Выбором типа кристалла, характеризующегося более высоким барьером и меньшей шириной канала, можно добиться увеличения N и уменьшения $(\overline{x^2})_0$.

Определим возможные режимы каналирования быстрого протона в кристалле. Попадая в канал, протон в поперечном межплоскостном потенциале занимает ближайший по энергии уровень. При движении по каналу энергия протона монотонно падает (потери энергии существенно возрастают лишь в конце пути).

Зависящий от времени потенциал (15) будет стимулировать резонансные переходы в системе (см., например, (16)). Такой резонансный переход приведет к насыщению состояния Ψ_m^0, т.е. к росту амплитуды $|a_m|$ и уменьшению амплитуды $|a_n|$.

Небольшая потеря энергии быстрого протона может нарушить резонансную связь $\Psi_n^0 \leftrightarrow \Psi_m^0$, но такая связь может возникнуть с другим низколежащим уровнем $\Psi_m^0 \leftrightarrow \Psi_k^0$, где $n > m > k$. При этом среднеквадратичный поперечный радиус каналированного протона становится меньше, а соответствующий продольный «радиус» может стать больше. Такое «оседание» протона на низколежащие уровни межплоскостного потенциала ведет к «сжатию» волновой функции в поперечном сечении и «растяжению» в продольном направлении движения.

Иными словами, волновая функция каналированного протона приобретает «иглообразную» форму по мере углубления по каналу кристалла. Такая квантовая фокусировка волновой функции каналируемой частицы возможна лишь на некотором участке ее длины пробега в кристалле.

Отметим, что включением внешних сил можно воздействовать на параметры межплоскостного потенциала, например, модулированными поперечными колебаниями решетки или переменным ускоряющим полем в продольном направлении можно добиться еще большего сужения поперечного потенциала или усиления ангармонических сил. Результатом таких воздействий может быть сужение области каналирования и соответственно дополнительная фокусировка каналируемой волновой функции внешним полем [5].

Когда кинетическая энергия частицы становится сравнимой с энергией ионизации атомов решетки кристалла, вероятность процессов деканалирования резко увеличивается. Потери энергии существенно деформируют форму волновой функции, возрастают поперечные возбуждения, вероятность туннелирования в соседние каналы и выход частицы с траектории каналирования [1, 12].

Такая картина согласуется с эффектами фокусировки и деканалирования, которые наблюдаются в реальных и численных экспериментах по каналированию [1, 4, 5, 12].

ЛИТЕРАТУРА

1. *Кумахов М.А.* Излучение каналированных частиц в кристаллах. М., 1986.

2. *Такибаев Н.Ж.* // Доклады НАН РК. 2000. № 5. С. 34.

3. *Takibayev N.Zh.* // Hadronic Journal – USA. 2002. V. 25. P. 528-535.

4. *Demkov Yu.N., Meyer J.D.* // Proc. symp. channeling – bent crystal – radiation processes. Debrecen, Hungary, 2003.

5. *Demkov Yu.N., Meyer J.D.* // Eur. Phys. J. 2004. B42. P. 381.

6. *Красовицкий П.М., Такибаев Н.Ж.* // Изв. РАН. Сер. физ. 2003. Т. 67, № 11.

7. *Красовицкий П.М., Такибаев Н.Ж.* // Изв. РАН. Сер. физ. 2006. Т. 70, №5. С. 873-878.

8. *Барышевский В.Г.* Каналирование, излучение и реакции в кристаллах при высоких энергиях. Минск, 1982.

9. *Таратин А.М.* // Физика элементарных частиц и атомного ядра. 1998. Т. 29. С. 1063-1118.

10. *Такибаев Н.Ж.* // Вестник СемГУ. 2006. №4. С. 126-131.

11. *Ландау Л.Д., Лифшиц И.М.* Квантовая механика. М.: Наука, 1986.

12. *Кашлев Ю.А., Садыков Н.М.* Теоретическая и математическая физика. 1998. Т. 116. С. 146.

Резюме

Тез релятивтік емес бөлшектің монокристалл арқылы өткенде каналдаудың және гиперканалдаудың ұзындығын бағалау және де кванттық фокусталудың нәтижелері қарастырылады.

Summary

In this article given estimates of length channeling and hyper channeling during going faster non-relativist particle through mono crystals, and effects of quantum focuses.

Казахский национальный университет им. аль-Фараби, г. Алматы

Поступила 20.12.06г.