

01; 05; 10

ТЕОРЕТИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ СТРУКТУРЫ ЭЛЕКТРОСТАТИЧЕСКИХ ПОЛЕЙ В ИОННЫХ КРИСТАЛЛАХ В СЛУЧАЕ ПЛАНАРНОГО КАНАЛИРОВАНИЯ ЭЛЕКТРОНА (ПОЗИТРОНА)

А. С. Геворкян, Н. Н. Корхмазян, Г. Г. Меликян

В рамках линеаризованного уравнения самосогласованного поля исследуется структура электростатических полей в ионных кристаллах. Полученное трехмерное решение для потенциала усредняется по фоновому спектру. Для нахождения эффективного потенциала, ответственного за ориентационное движение заряженных частиц вдоль выделенных кристаллических плоскостей, трехмерный потенциал усредняется по элементарной ячейке кристаллической плоскости конкретно для структуры типа CsCl. Проводится численное исследование эффективного потенциала для разных температур, на основе чего построены соответствующие кривые.

Теоретическое исследование излучения электронов (позитронов) высоких энергий при их каналировании в кристаллических структурах различных типов может выявить принципиально новые особенности этого физического явления. До сих пор процесс каналирования и сопровождающее его излучение достаточно обстоятельно исследовались в основном в кристаллах с ковалентной связью. В частности, как показано в многочисленных экспериментах и теоретических исследованиях (см., например, [1]), ориентационные эффекты, а вместе с ними и направленное коротковолновое излучение в этих кристаллах подавляются на относительно малых расстояниях. Причем известно, что для уменьшения диссипативных процессов наиболее выгодны простые кристаллические структуры, которые встречаются обычно у легких образцов. С другой стороны, для усиления эффекта каналирования и связанного с ним излучения целесообразно рассматривать тяжелые кристаллы. Использование традиционных ковалентных кристаллов, как справедливо отмечают авторы работы [2], не может удовлетворять этим противоречивым требованиям. В этом смысле, на наш взгляд, наиболее подходящими кристаллическими радиаторами могут служить ионные кристаллы типа CsCl. Отметим, что эти кристаллы в отличие от кристаллов структуры NaCl имеют в целом заряженные главные кристаллические плоскости. Последнее обстоятельство может стать причиной резкого улучшения характеристик каналирования и сопровождающих его эффектов.

Для подробного исследования этого явления в ионных кристаллах перво-степенной задачей является корректное вычисление потенциала взаимодействия частицы с кристаллом в режиме каналирования.

Напомним, что до сих пор для исследования ориентированного движения заряженных частиц в кристаллах с ионной связью применялись, как правило, эффективные потенциалы, получаемые от усреднения по Линдхарду модельных потенциалов для изолированных атомов [$3-5$]. Нетрудно убедиться, что такая практика является далеко неудовлетворительной по ряду причин: во-первых, не учитывается изменение параметров экранирования ядер в условиях образования ионной связи; во-вторых, не учитывается то обстоятельство, что в ионных кристаллах существуют дальнедействующие силы, порожденные отдельными осями и плоскостями, которые оказывают коллективное сильное

влияние на формирование структуры электростатического поля вблизи каждой отдельной плоскости.

В настоящей работе исследуется первая задача из этой серии — задача о нахождении эффективного потенциала взаимодействия быстрой частицы с кристаллом в режиме планарного каналирования.

Для преодоления вышеупомянутых трудностей в рамках линеаризованного уравнения самосогласованного поля находится трехмерное решение электростатического поля, которое создает бесконечный бинарный кристалл со структурой хлористого цезия. Впоследствии это решение усредняется по фоновому спектру и по площади сечения элементарной ячейки прямой решетки с одной из кристаллографических плоскостей семейства $\{1, 0, 0\}$.

Нахождение периодических решений электростатического поля в бесконечных ионных кристаллах типа CsCl. Учет влияния фонованого спектра на эти решения

Из большого класса бинарных неорганических соединений с общей формулой $AХ$ нас будет интересовать структурный тип CsCl. В кристалле CsCl ионы Cl^- расположены в вершинах кубической ячейки, а в центре ее находится ион противоположного знака Cs^+ . Совершенно аналогично можно выделить ячейку, где каждый ион хлора окружен восемью ионами цезия. Если совместить начало координат с центром тяжести атома цезия, то его координаты будут $(0, 0, 0)$, а координаты хлора — $(1/2, 1/2, 1/2)$. Для вычисления электростатического потенциала кристалла воспользуемся приближением Иенсена—Майера—Гослера—Роде [6], суть которого состоит в том, что в решетке положительные и отрицательные ионы упакованы как шары соответственно с радиусами R_{0+} и R_{0-} и набор шаров с одинаковыми радиусами образует две подобные подрешетки с кубической симметрией. Напомним, что это приближение в применении к щелочным и галоидным ионам дает хорошее совпадение с опытными данными (см. [6]). Кроме того, оно допускает применение линеаризованного уравнения самосогласованного поля для системы зарядов

$$\Delta\varphi(\mathbf{r}) = -4\pi\rho(\mathbf{r}), \quad \rho(\mathbf{r}) = \rho^+(\mathbf{r}) + \rho^-(\mathbf{r}), \quad (1)$$

где $\rho^+(\mathbf{r})$ — плотность заряда в данной точке от всех положительных, а $\rho^-(\mathbf{r})$ — от отрицательных ионов.

Ввиду линейности оператора Δ аналогичное разделение можно сделать и в потенциале. Тогда вместо (1) будем иметь уравнения

$$\Delta\varphi^+(\mathbf{r}) = -4\pi\rho^+(\mathbf{r}), \quad \Delta\varphi^-(\mathbf{r}) = -4\pi\rho^-(\mathbf{r}). \quad (2)$$

Эти уравнения с учетом того, что каждая подструктура представляет собой кубическую решетку, можно представить в виде

$$\Delta\varphi^\pm(\mathbf{r}) = -4\pi \sum_{\mathbf{l}_\pm \in L_\pm^3} \rho_\pm^\pm(\mathbf{r} - \mathbf{l}_\pm), \quad (3)$$

где $\rho_\pm^\pm(\mathbf{r} - \mathbf{l}_\pm)$ — плотность распределения заряда в ионе решетки, расположенного в узле \mathbf{l}_\pm .

Формальное решение этих уравнений можно представить в виде

$$\varphi^\pm(\mathbf{r}) = -4\pi \int G_\pm(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \rho_\pm^\pm(\mathbf{r}') d\mathbf{r}', \quad (4)$$

где гриновская функция $G_\pm(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$ задается уравнением

$$\Delta G_\pm(\mathbf{r} - \mathbf{r}') = \sum_{\mathbf{l}_\pm \in L_\pm^3} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}' - \mathbf{l}_\pm). \quad (5)$$

Решение этого уравнения, которое отвечает симметрии задачи, представляется в виде ¹

¹ В дальнейшем везде, где это приводит к недоразумению, будут опущены знаки « \pm ».

$$G(\mathbf{r} - \mathbf{r}') = -\frac{1}{d^3} \sum_{\mathbf{k}} \frac{1}{k^2} e^{i\mathbf{k}(\mathbf{r}-\mathbf{r}')} \quad (6)$$

где d — расстояние между одинаковыми ближайшими ионами в кристалле, а \mathbf{k} — трехмерный вектор обратной решетки

$$\mathbf{k} = \frac{2\pi}{d} l\hat{x} + \frac{2\pi}{d} n\hat{y} + \frac{2\pi}{d} m\hat{z}, \quad \{m, n, l\} \in (-\infty, \infty).$$

Подставляя (6) в (4) и учитывая принцип суперпозиции для полей и факт смещения подрешеток относительно друг друга на величину $d/2$ по координатам x, y, z , получим выражение для электростатического поля, создаваемого всем кристаллом

$$\begin{aligned} \varphi(\mathbf{r}) = & 4\pi \int d\mathbf{r}' \left(\frac{1}{d^3} \sum_{\mathbf{k}} \frac{1}{k^2} e^{i\mathbf{k}(\mathbf{r}-\mathbf{r}')} \right) \rho_i^+(\mathbf{r}') + \\ & + 4\pi \int d\mathbf{r}' \left(\frac{1}{d^3} \sum_{\mathbf{k}} \frac{(-1)^{m+n+l}}{k^2} e^{i\mathbf{k}(\mathbf{r}-\mathbf{r}')} \right) \rho_i^-(\mathbf{r}'). \end{aligned} \quad (7)$$

В формулах (4) и (7) функцию $\rho^\pm(\mathbf{r}')$ с учетом того, что тепловые колебания центра тяжести иона происходят во много раз медленнее, чем внутренние движения, можно с хорошей точностью представить в виде

$$\rho_i^\pm(\mathbf{r}') = W^\pm(\mathbf{R}) P^\pm(\mathbf{R}_T), \quad \mathbf{r}' = \mathbf{R} + \mathbf{R}_T. \quad (8)$$

Здесь $W^\pm(\mathbf{R})$ обозначает плотность заряда в ионе при температуре среды $T=0$, а $P^\pm(\mathbf{R}_T)$ — плотность вероятности тепловых смещений ионов решетки из положения равновесия.

Динамика колебания решетки с одним атомом в элементарной ячейке достаточно подробно исследована и хорошо описывается теорией Дебая, что нельзя сказать относительно кристаллов с более сложной ячейкой.

Дефо в том, что в сложных кристаллах наряду с акустическими возникают оптические и смешанные оптико-акустические колебания, для которых теория Дебая в обычном ее варианте неверна [7]. Тем не менее для относительно низких температур кристаллической среды, когда оптические ветви подавлены по отношению к акустическим и амплитуда колебания последних мала по отношению к постоянной кристаллической решетки d , можно в качестве функции распределения $P(\mathbf{R}_T)$ использовать гармоническое изотропное представление

$$P(\mathbf{R}_T) = P(R_{Tx}) P(R_{Ty}) P(R_{Tz}), \quad P(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi} U_{0x}} \exp\left(-\frac{x^2}{2U_{0x}^2}\right). \quad (9)$$

В формуле (9) U_{0x}^2 обозначает среднее значение квадрата амплитуды тепловых колебаний [8]. Что касается связи между амплитудами акустических колебаний двух базисных атомов U_{0+} и U_{0-} , то она имеет вид $|U_{0+}| = |U_{0-}|$ [8].

Ясно, что при увеличении температуры среды начинают эффективно возбуждаться и оптические ветви колебания решеток. Поэтому начиная с некоторых температур при усреднении соответствующих формул по фононному спектру их влияние обязательно надо учесть.

Подставляя (9) и (8) в (7) и приводя элементарное интегрирование по координате \mathbf{R}_T , находим потенциал, создаваемый кристаллом в данной точке пространства с учетом влияния фононного спектра

$$\begin{aligned} \varphi(\mathbf{r}) = & 4\pi \int d\mathbf{R} \left(\frac{1}{d^3} \sum_{\mathbf{k} \neq 0} \frac{1}{k^2} e^{-\frac{k^2 U_{0+}^2}{2}} e^{i\mathbf{k}(\mathbf{r}-\mathbf{R})} \right) W^+(\mathbf{R}) + \\ & + 4\pi \int d\mathbf{R} \left(\frac{1}{d^3} \sum_{\mathbf{k} \neq 0} \frac{(-1)^{m+n+l}}{k^2} e^{-\frac{k^2 U_{0-}^2}{2}} e^{i\mathbf{k}(\mathbf{r}-\mathbf{R})} \right) W^-(\mathbf{R}). \end{aligned} \quad (10)$$

Напомним, что в (10) индексы m, n, l принимают целые значения. Если принять, что распределение заряда внутри ионов обладает сферической сим-

метрий $W(\mathbf{R}) \equiv W(R)$, то решение (10) сильно упрощается в областях, не пересекающихся с шарами-ионами, т. е. вне структуры

$$\varphi_{\text{вн. ст.}}(\mathbf{r}) = 4\pi |e^-| \sum_{\mathbf{k} \neq 0} \frac{1}{k^2} e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} \left(e^{-\frac{k^2 v_0^2}{2}} - (-1)^{m+n+l} e^{-\frac{k^2 v_0^2}{2}} \right). \quad (11)$$

В случае, когда частица пересекает ион данной подрешетки, упрощается член, который описывает взаимодействие с другой подрешеткой.

Эффективный потенциал взаимодействия заряженной частицы с кристаллом в режиме планарного каналирования

Пусть быстрая заряженная частица движется под малым углом по отношению к какой-либо, в целом заряженной, кристаллической плоскости $\{x, y\}$ из семейства плоскостей $\{1, 0, 0\}$ и под большим углом по отношению к главным кристаллографическим осям, находящимся в этой плоскости. Тогда потенциал взаимодействия частицы с кристаллом будет усредняться в направлении быстрого движения, т. е. вдоль выбранной плоскости. Ввиду того что потенциал

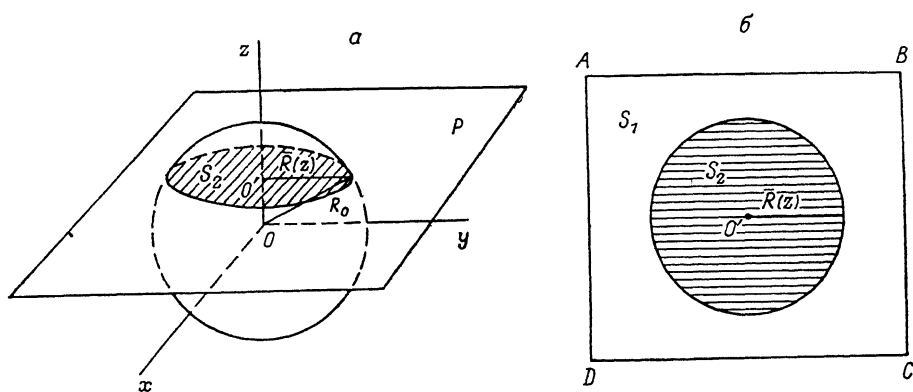


Рис. 1.

a — пересечение иона с плоскостью $\{P\}$ параллельной плоскости $\{xy\}$, *б* — в области S_1 частица движется вне структуры иона. S_2 — область пересечения частицы со структурой иона.

(10) есть периодическая функция на плоскости $\{x, y\}$, его среднее значение находится по формуле

$$\bar{\varphi}(z) = \frac{1}{d^2} \int_0^d dx \int_0^d dy \varphi(x, y, z) = \frac{1}{d^2} \int_0^d \int_0^d dx dy (\varphi^+(\mathbf{r}) + \varphi^-(\mathbf{r})). \quad (12)$$

Ниже ввиду полной аналогии между подрешетками L_+^3 и L_-^3 проводится детальное вычисление только для первого члена в сумме (12). Предположим, что частица движется в плоскости, параллельной плоскости $\{x, y\}$, расположенной от нее на расстоянии $|z - dm| \leq R_{0+}$. Тогда элементарная ячейка разделяется на две существенно различные области S_1 и S_2 (рис. 1, *a, б*). В области S_1 частица подвергается воздействию со стороны поля, создаваемого решеткой, в узлах которой расположены точечные заряды. Что касается области S_2 , то там частица движется внутри одного иона, и поэтому в потенциале взаимодействия частицы с кристаллом в этой области должен фигурировать структурный фактор иона. Исходя из вышесказанного, с учетом (10), (12) можно написать

$$\bar{\varphi}^+(\mathbf{r}) = \frac{1}{d^2} \left\{ \int_{S_2} (\varphi^+(\mathbf{r}) - \varphi_{\text{вн. ст.}}^+(\mathbf{r})) dx dy + \int_{S_1 \cup S_2} \varphi_{\text{вн. ст.}}^+(\mathbf{r}) dx dy \right\}. \quad (13)$$

Поскольку ионы обладают сферической симметрией, то область будет представлять из себя круг с радиусом

$$\bar{R}(z) = \text{Re} \sqrt{R_0^2 - \eta^2(z) d^2}, \quad \eta(z) = \frac{1}{2} + (-1)^n \left(\left\{ \frac{z}{d} \right\} - \frac{1}{2} \right), \quad n = \left[\frac{2z}{d} \right], \quad (14)$$

где скобки $\{\dots\}$ и $[\dots]$ соответственно обозначают дробную и целую части функции.

Переходя теперь в формуле (13) к цилиндрическим координатам и учитывая формулу (14), для $\bar{\varphi}^+(z)$ будем иметь

$$\bar{\varphi}^+(z) = \frac{1}{d^2} \int_0^{2\pi} \int_0^{\bar{R}(z)} (\varphi^+(z, \rho, \varphi) - \varphi_{\text{вн. ст}}^+(z, \rho, \varphi)) \rho d\rho d\varphi + \int_0^d \int_0^d \varphi_{\text{вн. ст}}^+(r) dx dy. \quad (15)$$

Вычисление интегралов в (15) с учетом (10) и (11) приводит к следующему результату

$$\begin{aligned} \bar{\varphi}^+(z) = & \frac{|e^-|}{d^2 \pi} \sum_{m, n, l} \frac{\bar{R}(z)}{\mu^2 \nu} \exp\left(i \frac{2\pi}{d} m z - \mu^2 \lambda_+^2\right) J_1\left(\frac{2\pi}{d} \nu \bar{R}(z)\right) [W^+(m, n, l) - 1] + \\ & + \frac{2|e^-|}{\pi d} \sum_{m=1}^{\infty} \frac{1}{m^2} \exp(-m^2 \lambda_+^2) \cos\left(\frac{2\pi}{d} m z\right), \\ W^+(l, m, n) = & \int W^+(R) \exp(-ikR) dR, \end{aligned} \quad (16)$$

где

$$\mu^2 = m^2 + n^2 + l^2, \quad \nu^2 = l^2 + n^2, \quad \lambda_+ = \sqrt{2} \pi U_{0+}/d. \quad (17)$$

Аналогичное вычисление для $\bar{\varphi}^-(z)$ приводит к следующему выражению:

$$\begin{aligned} \bar{\varphi}^-(z) = & \frac{|e^-|}{\pi d^2} \sum_{m, n, l} \frac{(-1)^m}{\mu^2 \nu} \bar{R}\left(z - \frac{d}{2}\right) \exp\left(i \frac{2\pi}{d} m z - \mu^2 \lambda_-^2\right) \times \\ & \times J_1\left(\frac{2\pi}{d} \nu \bar{R}\left(z - \frac{d}{2}\right)\right) [W^-(m, n, l) + 1] - \\ & - \frac{2|e^-|}{\pi d} \sum_{m=1}^{\infty} \frac{(-1)^m}{m^2} \exp(-m^2 \lambda_-^2) \cos\left(\frac{2\pi}{d} m z\right). \end{aligned} \quad (18)$$

Окончательное выражение для эффективного потенциала взаимодействия заряженной частицы с ионным кристаллом типа CsCl в режиме плоскостного каналирования с учетом (12), (16) и (19) будет иметь вид

$$\begin{aligned} \bar{\varphi}(z) = & \frac{2|e^-|}{\pi d} \sum_{\substack{m=0 \\ n, l=-\infty}}^{\infty} \left\{ \frac{a_m}{\mu^2 \nu} \cos\left(\frac{2\pi}{d} m z\right) \exp(-\lambda^2 \mu^2) \left[\frac{\bar{R}(z)}{d} J_1\left(\frac{2\pi}{d} \nu \bar{R}(z)\right) \times \right. \right. \\ & \times (W^+(l, m, n) - 1) + (-1)^m \frac{\bar{R}\left(z - \frac{d}{2}\right)}{d} J_1\left(\frac{2\pi}{d} \nu \bar{R}\left(z - \frac{d}{2}\right)\right) (W^-(l, n, m) + 1) \left. \right] + \\ & \left. + \frac{1}{(m+1)^2} \cos\left(\frac{2\pi}{d} (m+1) z\right) \exp(-\lambda^2 (m+1)^2) [1 - (-1)^{m+1}] \right\}, \end{aligned} \quad (19)$$

где

$$\lambda = \lambda_- = \lambda_+, \quad a_m = \begin{cases} 1, & m \neq 0, \\ 1/2, & m = 0. \end{cases}$$

Аппроксимация потенциала планарного каналирования

Потенциал канала в виде (19) все еще остается неудобным для конкретных траекторных расчетов, поэтому представляется важным получение простой

аппроксимации для него. С этой целью представим распределение заряда внутри иона в виде

$$W^{\pm}(\mathbf{R}) = V^{\pm}(\mathbf{R}) + Z^{\pm}\delta(\mathbf{R}), \quad (20)$$

где $V^{\pm}(\mathbf{R})$ — распределение электронов внутри ионов кристалла, в Z^{\pm} — число протонов в ядре. Подставляя (20) в (16) и проводя интегрирование, находим

$$W^{\pm}(l, m, n) = Z^{\pm} + \chi^{\pm}(l, m, n), \quad (21)$$

$$\chi^{\pm}(l, m, n) = \frac{4\pi}{k} \int_0^{\infty} R V^{\pm}(R) \sin(kR) dR. \quad (22)$$

Для детального исследования интеграла (22) необходимо уточнить выражение для $V^{\pm}(R)$. Поскольку статистическая ионная модель Томаса—Ферми—Дирака имеет решение и на расстояниях, меньших, чем граничные радиусы свободных ионов, то в качестве электронного распределения в ионе кристалла можно использовать решение Ленца—Йенсена, но с уточнением некоторых параметров в аппроксимации [6]

$$V(R) = \frac{N}{A} \frac{e^{-x}}{x^3} (1 + Cx)^3, \quad A = \frac{8\pi a_0^3}{\xi^3 Z} P(C), \quad x = \left(\frac{R\xi}{a_0}\right)^{1/2} Z^{1/3}, \quad (23)$$

где N — число электронов в ионе данного сорта, Z — порядковый номер, a_0 — радиус Бора, а $P(C)$ — полином вида

$$P(C) = 6 + 72C + 360C^2 + 720C^3. \quad (24)$$

В формулах (23), (24) C и ξ — вариационные параметры, которые определяются из условия минимизации энергии электронной системы.

Для интеграла (22) получим

$$\chi(l, n, m) = -\frac{8\pi N}{kA} \left(\frac{a_0}{\xi Z^{1/3}}\right)^2 \operatorname{Im} \int_0^{\infty} (1 + CX)^3 \exp(ibx^3 - x) dx, \quad b = \frac{2\pi a_0 \mu}{\xi^2 Z^{1/3}}. \quad (25)$$

Воспользовавшись формулой [10]

$$\int_0^{\infty} x^{n-1} \exp(-px^2 - qx) dx = \Gamma(n) (2p)^{-n/2} \exp\left(\frac{q^2}{8p}\right) D_{-n}\left(\frac{q}{\sqrt{2p}}\right) \times \\ \times (\operatorname{Re} n, \operatorname{Re} q > 0, \operatorname{Re} p = 0), \quad (26)$$

функцию $\chi(l, n, m)$ представим в виде

$$\chi(l, n, m) = -\frac{4d}{A} \left(\frac{a_0}{\xi Z^{1/3}}\right)^2 \operatorname{Im} \left\{ \exp\left(-\frac{i}{4x^2}\right) [xD_{-1}(x) + 6Cx^2 D_{-2}(x) + \right. \\ \left. + 18C^2 x^3 D_{-3}(x) + 24C^3 x^4 D_{-4}(x)] \right\}, \quad x = (-2il)^{-1/2}, \quad (27)$$

где $D_n(x)$ обозначает функцию параболического цилиндра.

В выражении (27) можно разделить действительные и мнимые части. Однако, ввиду того, что результат получается громоздким, он здесь не приводится. Отметим, что для численного расчета гораздо удобнее исходное выражение (25) для $\chi(l, n, m)$.

Ниже конкретно для параметров кристалла CsCl (см. [6]) в случае двух разных температур рассчитаны на ЭВМ потенциалы планарного каналирования для электронов (рис. 2) и позитронов (рис. 3). Как видно, электрон может канализоваться или между двумя отрицательно заряженными плоскостями ионов Cl^- , или вблизи одной из них. Причем глубина ямы в первом случае получается значительно большей (примерно в 4—4.5 раза) по сравнению с глубиной ямы, образованной вдоль одной отрицательно заряженной плоскости. Что касается

разницы между потенциалами планарного каналирования в обычных кристаллах с ковалентной связью и с соответствующими потенциалами в ионных кристаллах типа CsCl, то наиболее важным является, во-первых, то, что ширина ямы в кристалле в 1.5—2 раза больше, чем ширина ямы в кристаллах с ковалентной связью, имеющих примерно одинаковый вес с CsCl. Во-вторых, при примерно одинаковых значениях Z максимальные глубины ям в кристалле CsCl на 20—40 % больше, чем в кристаллах с ковалентной связью.

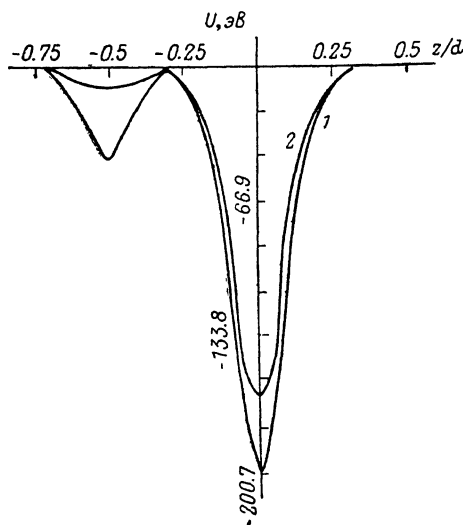


Рис. 2. Эффективные потенциалы в случае планарного каналирования электронов при $U_0/d = 10^{-3}$ (1) и $3 \cdot 10^{-3}$ (2).

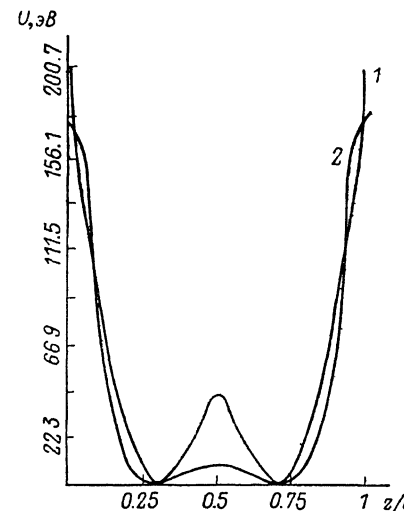


Рис. 3.
1, 2 — то же, что и на рис. 2.

Довольно интересным является поведение потенциалов в случае планарного каналирования позитронов (рис. 3). В частности, из рис. 2, 3 видно, что если поперечная энергия частицы меньше высоты центрального барьера, то в этом случае каналирование возможно между отрицательно и положительно заряженными плоскостями. Если же поперечная энергия позитрона больше высоты центрального барьера, то излучение в этом случае окажется интенсивнее, но в связи с тем, что частица будет пересекать кристаллическую плоскость, работает один из основных механизмов деканалирования, связанный с рассеянием на большие углы при столкновениях с ядрами ионов на малых прицельных расстояниях.

Заключение

Таким образом, в настоящей работе с помощью метода уравнения самосогласованного поля изучена структура электростатического поля в ионных кристаллах с конечной температурой.

Показано, что данный подход является универсальным,² наиболее последовательным по сравнению с подходами Линдхарда, Мольера и других особенно, когда вопрос касается исследования полей в ионных и металлических кристаллах. Эффективный потенциал планарного каналирования, который получается усреднением потенциала кристаллической решетки по элементарной ячейке на плоскости, сводится к усреднению функции Грина по данной ячейке. Ввиду относительно простого вида этой функции двумерное интегрирование по плоскости удается проводить аналитически. В этом случае для эффективного поля плоскостного каналирования получается выражение в виде решеточной суммы от произведения некоторых известных функций с форм-факторами отдельных

² Этот подход легко обобщить для всех кристаллов (включая металлические [11]).

базисных ионов в импульсном представлении. Дальнейшее исследование формы и значения эффективного поля приводит к необходимости вычисления явных видов соответствующих форм-факторов. Для этого в работе в качестве функции распределения электронного заряда в ионах как положительных, так и отрицательных использована модель Иенсена—Ленца с вариационными параметрами почти свободных ионов. Эта модель позволила для форм-факторов получить явные аналитические формулы в виде линейной комбинации от специальных функций параболического цилиндра разных порядков.

В заключение отметим, что возможны разные пути дальнейшего уточнения результатов, связанные с использованием более точных моделей для функции распределения заряда в ионах кристалла, которые получаются различными способами: а) в результате соответствующих квантовых расчетов в рамках метода Хартри—Фока (см., например, [6]), б) одноэлектронного приближения в твердом теле с псевдизмом [12], в) уточнением вариационных параметров в модели Иенсена—Ленца.

Авторы считают своим приятным долгом поблагодарить Н. А. Корхмазяна за постоянную дискуссию и полезные замечания и И. А. Багдасаряна за помощь в численных расчетах.

Литература

- [1] *Кумахов М. А.* Излучение каналированных частиц в кристаллах. М.: Энергоиздат, 1986. 160 с.
- [2] *Высоцкий В. И., Кузьмин Р. Н., Максюта Н. В.* // Тез. докл. XVI Всесоюз. совещ. по физике заряженных частиц с кристаллом. М., 1986. С. 57.
- [3] *Линдхард И.* // УФН. 1969. Т. 95. Вып. 2. С. 249—296.
- [4] *Gemmel D. S.* // Rev. Mod. Phys. 1974. Vol. 46. P. 129.
- [5] *Moliere G.* // Z. Naturforsch. 1947. Bd 2a. S. 133.
- [6] *Гамбош П.* Статистическая теория атома и ее применение. М.: ИЛ, 1951. 398 с.
- [7] *Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М.* Статистическая физика. М.: Наука, 1976. Т. V. 583 с.
- [8] *Гер-Микаэлян М. Л.* Влияние среды на электромагнитные процессы при высоких энергиях. Ереван, 1969. 457 с.
- [9] *Киттель Ч.* Введение в физику твердого тела. М.: Наука, 1978. 791 с.
- [10] *Прудников А. П., Бричков Ю. А., Маричев О. И.* Интегралы и ряды (элементарные функции). М.: Наука, 1981. Т. 1. 798 с.
- [11] *Андреанов В. А., Капитонов В. С., Попов В. Н.* // Зап. науч. семинара ЛОМИ. Л., 1983. Т. 131. С. 3—13.
- [12] *Ястребов Л. И., Канцелсон А. А.* Основы одноэлектронной теории твердого тела. М.: Наука, 1981. 320 с.

Армянский государственный
педагогический институт
им. Х. Абовяна

Поступило в Редакцию
26 октября 1987 г.

В окончательной редакции
4 мая 1988 г.