

01;05;10

Эффективный потенциал плоскостного каналирования в кристалле LiH

© Н.А. Корхмазян, Н.Н. Корхмазян, Н.Э. Бабаджанян

Армянский государственный педагогический университет им. Х. Абовяна,
375010 Ереван, Армения
e-mail: norayrk@web.am

(Поступило в Редакцию 15 июля 2002 г.)

Рассмотрена задача об определении эффективных потенциалов каналирования вдоль заряженных плоскостей (111) и $(\bar{1}\bar{1}\bar{1})$ в конечном кристалле LiH. Получены критерии применимости формул в случае бесконечного кристалла. Дана оценка величины поверхностного слоя кристалла, где эти формулы не применимы.

Введение

Как известно, релятивистская заряженная частица при каналировании вдоль кристаллографических плоскостей (осей) кристалла совершает поперечные колебания, что сопровождается излучением [1–3]. В определенных условиях генерируется лазероподобное гамма-излучение, которое по своим характеристикам находится вне конкуренции по сравнению с другими видами излучения в указанном диапазоне частот [4]. Такие пучки жестких квантов имеют множество прикладных применений, что делает актуальным исследование более широкого класса кристаллических радиаторов. Особый интерес представляет нахождение эффективных потенциалов каналирования в легких ионных кристаллах типа LiH вдоль заряженных плоскостей с коэффициентами Миллера (111) и $(\bar{1}\bar{1}\bar{1})$, поскольку длина деканалирования в этом случае более чем на порядок больше, чем соответствующая величина при каналировании вдоль других плоскостей [5]. Большой вклад в исследование потенциалов каналирования в ионных кристаллах был сделан группой авторов в работах [6–9], где развит общий метод расчета потенциалов, учитывающий вклад в потенциал от всех ионов кристалла. Однако полученные в результате выражения оказываются достаточно сложными, что несколько ограничивает возможность их аналитического исследования. В недавно вышедшей экспериментальной работе [10], где исследуется излучение электронов и позитронов при каналировании вдоль главных кристаллографических плоскостей в кристаллах LiH и LiD, отмечается, что используемый авторами потенциал свободного иона не приводит к согласию с экспериментом и нуждается в пересмотре. Таким образом, необходимость нахождения корректного выражения для потенциала каналирования в легких кристаллах конечных размеров становится очевидной. В работе [5] эта задача решена для бесконечного кристалла.

В настоящей работе та же задача решена для кристаллов, имеющих конечные размеры.

Эффективный потенциал кристалла в случае бесконечных плоскостей

Для расчета эффективного потенциала воспользуемся методом эквивалентных ячеек, впервые изложенным в [9]. Суть метода заключается в том, что ионы (центры ионов в „замороженном“ кристалле), находящиеся на плоскостях, параллельных плоскостям каналирования, перераспределяются таким образом, чтобы упростить геометрию задачи. При этом элементарная ячейка усреднения приводится к желаемой форме, оставляя площадь ячейки неизменной.

Кристаллы LiH и LiD относятся к классу гранецентрированных кристаллов и имеют структуру, приведенную на рис. 1, *a*. Выберем оси координат так, как показано на рис. 1, *b*. Расстояние между ближайшими одноименными ионами вдоль осей x' и y' (постоянная решетки кристалла) равно $d = 4.084 \text{ \AA}$. Плоскость (HNN) получается вращением плоскости (x', y') сначала вокруг оси z' на угол $\varphi = \pi/4$, а затем вокруг новой оси x на угол α , где $\text{tg } \alpha = \sqrt{2}$. Для расстояния между одноименными

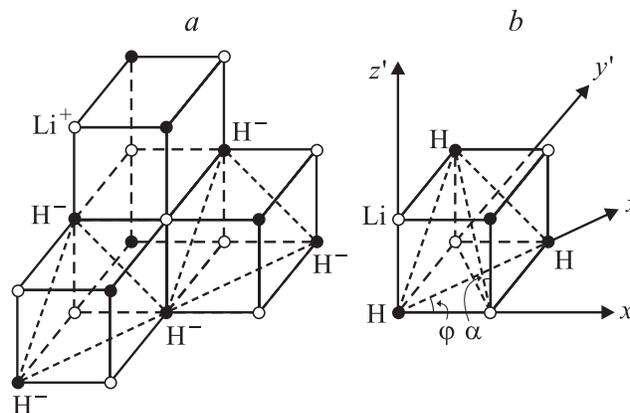


Рис. 1. *a* — структура кристалла LiH. (HNN) — заряженная плоскость, *b* — выбор осей координат.

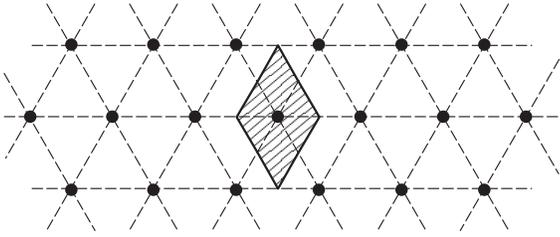


Рис. 2. Распределение ионов одного знака на плоскости $(1\bar{1}1)$. Выбор ячейки усреднения.

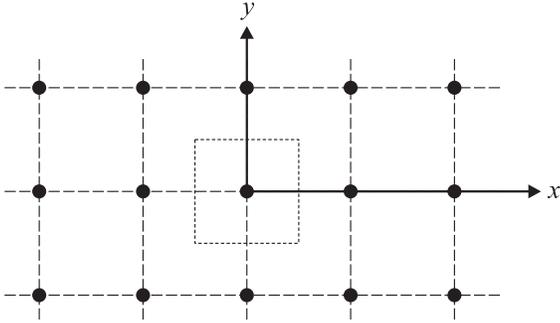


Рис. 3. Выбор эквивалентных ячеек.

и разноименными плоскостями соответственно имеем

$$d_z = d/\sqrt{3} = 2.358 \text{ \AA}, \quad d_z/2 = 1.179 \text{ \AA}. \quad (1)$$

Распределение ионов на заряженной плоскости $(1\bar{1}1)$ имеет вид, приведенный на рис. 2. В качестве ячейки усреднения выберем заштрихованный ромб с площадью $\sqrt{3}d^2/4$. Для эквивалентной квадратной ячейки $(d_0 \times d_0)$ находим

$$d_0 = 3^{1/4}d/2 = 2.6874 \text{ \AA}. \quad (2)$$

Таким образом, распределение ионов на плоскости (x, y) окончательно приводится к виду, представленному на рис. 3. Ось z направлена перпендикулярно плоскости рисунка. Квадратная ячейка усреднения лежит на плоскости $z = \text{const}$ (рис. 4). Центр ячейки находится

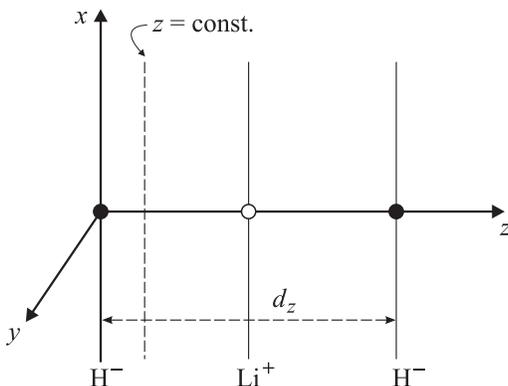


Рис. 4. Выбранный канал и плоскость $z = \text{const}$, на которой определяется усредненный потенциал.

на оси z . В точке $(0, 0, 0)$ находится ион водорода (H^-), а в точке $(0, 0, d_z/2)$ — ион лития (Li^+). Назовем эти два иона базисными ионами. Как известно [9], эффективные радиусы этих ионов равны соответственно

$$R(\text{H}^-) = 1.50 \text{ \AA}, \quad R(\text{Li}^+) = 0.68 \text{ \AA}. \quad (3)$$

Эффективный потенциал плоскостного каналирования достаточно вычислить в полуканале

$$0 \leq z \leq d_z/2, \quad (4)$$

поскольку плоскость $z = d_z/2$ является плоскостью симметрии канала. Смысл радиусов (3) состоит в том, что на этих расстояниях от ядер ионов плотность электронного облака можно считать равной нулю. Из (3) и (4) следует, что, кроме базисного положительного иона, все остальные положительные ионы можно считать точечными. Аналогичное утверждение можно сделать и для отрицательных ионов, несмотря на то что для них $R(\text{H}^-) > d_z/2$. В самом деле, как известно [11], плотность электронного облака в двухэлектронном ионе (атоме) в зависимости от расстояния до ядра r определяется формулой

$$\rho(r) = -\frac{e\lambda^3}{4\pi} e^{-\lambda r}, \quad \lambda = \frac{2z^*}{a_0}, \quad z^* = z - 5/16, \quad (5)$$

где $a_0 = 0.528 \text{ \AA}$ — радиус Бора, z — число протонов в ядре, $-e$ — заряд электрона.

Согласно (3), для иона H^- можно считать $\rho(1.5 \text{ \AA}) = 0$. Оценим значение ρ на расстоянии $r = d_z/2 = 1.179 \text{ \AA}$.

Согласно (5), имеем

$$\begin{aligned} & [\rho(1.179 \text{ \AA}) - \rho(1.5 \text{ \AA})] / \rho(1.5 \text{ \AA}) \\ &= \exp(2z^*(1.5 - 1.179)/0.53) - 1 \cong 1.3, \quad z^- = 1. \end{aligned}$$

Отсюда находим $\rho(1.179 \text{ \AA}) \cong 2.3\rho(1.5 \text{ \AA})$, что с большей точностью можно считать равным нулю.

В „сконструированном“ нами кристалле отрицательные ионы находятся в узлах $\mathbf{L} = (ld_0, md_0, nd_z)$, где $l, m, n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$. Положительная подрешетка смещена относительно отрицательной на вектор $\mathbf{a} = (0, 0, d_z/2)$. Потенциал, создаваемый отрицательной подрешеткой в точке $\mathbf{r} = (x, y, z)$, определяется формулой

$$\varphi_{\text{tot}}^- = \frac{ez^-}{|\mathbf{r}|} + \varphi_{el}^- - e \sum_{\mathbf{L} \neq 0} \frac{1}{|\mathbf{r} - \mathbf{L}|}, \quad (6)$$

где первое слагаемое — поле ядра базисного иона, второе слагаемое — поле электронного облака этого иона, а третье слагаемое — поле всех остальных отрицательных точечных ионов.

Для расчета функции φ_{el}^- воспользуемся теоремой Гаусса, а также распределением (5). Тогда для проекции

напряженности электрического поля на вектор \mathbf{r} имеем

$$E_r = \frac{q(r)}{r^2},$$

$$q(r) = -\frac{2e}{\pi} \left(\frac{z^-}{a_0} \right)^3 4\pi \int_0^r \exp(-2z^- \xi/a_0) \xi^2 d\xi,$$

$$r = |\mathbf{r}|. \quad (7)$$

Воспользовавшись формулой

$$\varphi_\infty - \varphi(r) = -\int_r^\infty E_r dr, \quad \varphi_\infty = 0,$$

находим

$$\varphi_{el}^-(r) = e\lambda^- e^{-\lambda^- r} + \frac{2e}{r} e^{-\lambda^- r} - \frac{2e}{r}. \quad (8)$$

Подставляя это выражение в (6), получим

$$\varphi_{\text{tot}}^- = e\bar{\lambda} e^{-\bar{\lambda} r} + \frac{2e}{r} e^{-\bar{\lambda} r} - e \sum_{l,m,n} \frac{1}{|\mathbf{r} - \mathbf{L}|}, \quad (9)$$

где сумма включает также и вклад от узла $\mathbf{L} = 0$.

Проведем усреднение полученного потенциала по элементарной ячейке кристалла

$$\langle \varphi_{\text{tot}}^- \rangle = \frac{1}{d_0^2} \int_{-d_0/2}^{d_0/2} dx \int_{-d_0/2}^{d_0/2} \varphi_{\text{tot}}^- dy. \quad (10)$$

При вычислении средних от первых двух слагаемых в (9) целесообразно перейти к цилиндрическим координатам и проводить интегрирование по кругу с радиусом $R_0 = d_0/\sqrt{\pi}$

$$\langle \varphi_{1,2}^- \rangle = \frac{2\pi}{d_0^2} \int_0^{R_0} \varphi_{1,2}^- \rho d\rho, \quad r = \sqrt{\rho^2 + z^2}. \quad (11)$$

Тогда вместо (10) имеем

$$\langle \varphi_{\text{tot}}^- \rangle = \frac{2\pi e}{d_0} (f_1^- + f_2^-) - e \left\langle \sum_{l,m,n} \dots \right\rangle,$$

$$f_1^- = \frac{1}{\lambda^- d_0} \left[(\lambda^- |z| + 1) e^{-\lambda^- |z|} - (\lambda^- \sqrt{R_0^2 + z^2} + 1) e^{-\lambda^- \sqrt{R_0^2 + z^2}} \right];$$

$$f_2^- = \frac{2}{\lambda^- d_0} \left[e^{-\lambda^- |z|} - e^{-\lambda^- \sqrt{R_0^2 + z^2}} \right], \quad (12)$$

где в f_1^- и f_2^- все отрезки выражены в единицах d_z .

Поэтому теперь область изменения z определяется выражением $0 \leq z \leq 1/2$. Потенциал положительной подрешетки получится из (12) заменой $\bar{\lambda} \Rightarrow \lambda^+$

и $z \Rightarrow -(1/2 - z)$. Вычислим среднее от суммы в выражении (12). Необходимо отметить, что эта сумма от бесконечного числа отрицательно заряженных плоскостей кристалла обращается в бесконечность и конечный результат получается лишь при совместном учете вкладов от отрицательно и положительно заряженных плоскостей. Обозначим последнее слагаемое в выражении (12) через I^- . Тогда имеем

$$I^- = -\frac{e}{d_0^2} \sum_{l,m,n} \int_{-d_0/2}^{d_0/2} dx$$

$$\times \int_{-d_0/2}^{d_0/2} \frac{dy}{\sqrt{(x - ld_0)^2 + (y - md_0)^2 + (z - nd_0)^2}}$$

$$= -\frac{e}{d_0} \sum_{l,m,n} \int_{-1/2}^{1/2} dx \int_{-1/2}^{1/2} \frac{dy}{\sqrt{(x-l)^2 + (y-m)^2 + p^2(z-n)^2}}, \quad (13)$$

где x и y выражены в единицах d_0 , z — в единицах d_z , а $p = d_z/d_0 = 0.8774$.

Вводя обозначение $p^2(n-z)^2 = a^2$ и просуммировав выражение (13) по m , получим

$$\sum_{l,m,n} \dots = 2 \sum_{l,n} \int_{-1/2}^{1/2} dx \left[\int_0^{1/2} \frac{dy}{\sqrt{(x-l)^2 + y^2 + a^2}} \right.$$

$$\left. + \int_{1/2}^{3/2} \frac{dy}{\sqrt{(x-l)^2 + y^2 + a^2}} + \dots \right]$$

$$= 2 \sum_{l,n} \int_{-1/2}^{1/2} dx \int_0^\infty \frac{dy}{\sqrt{(x-l)^2 + y^2 + a^2}}$$

$$= 2 \sum_{l,n} \int_{-1/2}^{1/2} dx \ln \left| \frac{y}{\sqrt{(l-x)^2 + a^2}} \right.$$

$$\left. + \sqrt{1 + \frac{y^2}{(l-x)^2 + a^2}} \right|_0^\infty. \quad (14)$$

Объединяя это выражение с соответствующей суммой от положительной подрешетки и вводя обозначение $p^2(n+1/2-z)^2 = b^2$, находим

$$I = I^- + I^+$$

$$= \frac{e}{d_0} \sum_n \left[\sum_l \int_{-1/2}^{1/2} \ln \frac{(l-x)^2 + a^2}{(l-x)^2 + b^2} dx \right]. \quad (15)$$

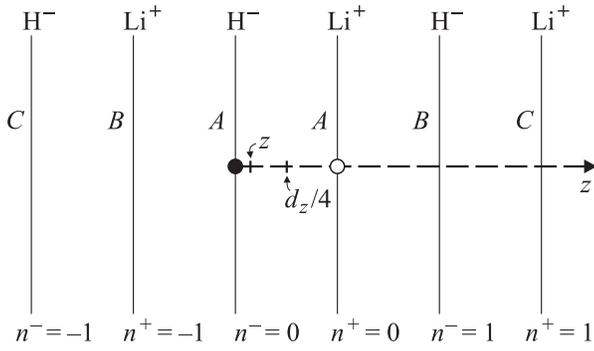


Рис. 5. Заряженные плоскости бесконечного кристалла.

Просуммировав аналогичным образом по l , получим

$$I = \frac{2\pi e}{d_0} p \left[\sum_{n^-} |n^- - z| - \sum_{n^+} |n^+ + 1/2 - z| \right], \quad (16)$$

где n^- и n^+ относятся соответственно к отрицательной и положительной подрешеткам кристалла (рис. 5).

Сложив вклады от соответствующих пар (AA), (BB), ... плоскостей, получим

$$I = \frac{2\pi e}{d_0} p [(2z - 1/2) - (2z - 1/2) + (2z - 1/2) - \dots]. \quad (17)$$

Нетрудно заметить, что полученный потенциал не имеет определенного значения. Как будет показано ниже, это связано с тем, что размеры кристалла вдоль пролета частицы во много раз превосходят поперечные размеры кристалла.

Эффективный потенциал конечного кристалла

Соответствующий выражению (17) ряд будет сходящимся, если принять, что кристалл имеет конечные размеры L вдоль пролета каналированной частицы в плоскости (x, y) . Совместим ось x с направлением движения частицы. Пусть, кроме того, элементарная ячейка находится на расстоянии l_1 (в единицах d_0) от одной грани кристалла и на расстоянии l_2 от второй грани, где для определенности будем считать $l_1 \leq l_2$. Обычно толщина кристалла бывает порядка $L \approx 10^7 \text{ \AA}$, а длина деканалирования колеблется в пределах $10^4 - 10^5 \text{ \AA}$. Поэтому всегда можно исключить из рассмотрения некий тонкий поверхностный слой кристалла толщиной порядка 100 \AA . Другими словами, можно ограничиться условием $l_1 \gg 1$. Это допущение вполне правомерно, поскольку толщина этого слоя более чем на два порядка меньше длины деканалирования. В формуле (15) проведем суммирование

по l в пределах $-l_2 \leq l \leq l_1$. Тогда получим

$$I = I(l_1) + I(l_2) = \frac{e}{d_0} \sum_n \left[\int_0^{l_1+1/2} \ln \frac{x^2 + a^2}{x^2 + b^2} dx + \int_0^{l_2+1/2} \ln \frac{x^2 + a^2}{x^2 + b^2} dx \right]. \quad (18)$$

Отсюда имеем

$$I(l_{1,2}) = \frac{e}{d_0} \sum_{n^-=-N}^N \left[(l_{1,2} + 1/2) \ln [(l_{1,2} + 1/2)^2 + a^2] + 2a \operatorname{arctg} \frac{l_{1,2} + 1/2}{a} \right] - \frac{e}{d_0} \sum_{n^+=-N}^N \left[(l_{1,2} + 1/2) \times \ln [(l_{1,2} + 1/2)^2 + b^2] + 2b \operatorname{arctg} \frac{l_{1,2} + 1/2}{b} \right]. \quad (19)$$

Вводя обозначение $(l_{1,2} + 1/2)/p \equiv A_{1,2}$, находим

$$I(l_1) = \frac{e}{d_0} P \sum_{n^-=-N}^N \left[A_1 \ln [A_1^2 + (n^- - z)^2] + 2(n^- - z) \operatorname{arctg} \frac{A_1}{n^- - z} \right] - \frac{e}{d_0} P \times \sum_{n^+=-N}^N \left[A_1 \ln [A_1^2 + (n^+ - z + 1/2)^2] + 2(n^+ - z + 1/2) \operatorname{arctg} \frac{A_1}{n^+ - z + 1/2} \right]. \quad (20)$$

Ввиду того что $A_1 \gg 1$, логарифмические функции являются медленно меняющимися функциями аргументов n^\pm . Поэтому для этих функций суммы можно заменить интегралами

$$\sum_{n^-=-N}^N A_1 \ln [A_1^2 + (n^- - z)^2] \Rightarrow \Rightarrow A_1 \int_{-N}^N \ln [A_1^2 + (n^- - z)^2] dn^-. \quad (21)$$

Нетрудно убедиться, что в предельных случаях $N \gg A_1$ и $N \ll A_1$ для интегралов от логарифмических функций соответственно имеем

$$\frac{5}{2} \frac{A_1}{N} \ll 1, \quad 3 \frac{N}{A_1} \ll 1. \quad (22)$$

Тогда вместо (20) имеем

$$I(l_1) = \frac{2e}{d_0} P \left[\sum_{n^-=-N}^N (n^- - z) \operatorname{arctg} \frac{A_1}{n^- - z} - \sum_{n^+=-N}^N (n^+ - z + 1/2) \operatorname{arctg} \frac{A_1}{n^+ - z + 1/2} \right]. \quad (23)$$

Это выражение в случае $A_1 \gg N$ приводится к виду

$$I(l_1) = \frac{\pi e}{d_0} P \left(\sum_{n^-=-N}^N |n^- - z| - \sum_{n^+=-N}^N |n^+ - z + 1/2| \right) \quad (24)$$

и с учетом того, что $I(l_2) = I(l_1)$, мы приходим окончательно к формуле (17). Таким образом, если размеры кристалла вдоль оси z много меньше, чем вдоль пролета частицы ($N \ll A_1$), то потенциал конечного кристалла ведет себя внутри кристалла таким же образом, как потенциал бесконечного кристалла.

В обратном случае ($N \gg A_1$) функции под суммами в выражении (23) не являются медленно меняющимися функциями своих аргументов, поэтому для расчета потенциала необходимо найти сначала напряженность поля

$$E_z = -\frac{1}{d_z} \frac{dI}{dz}. \quad (25)$$

Продифференцируем выражение (23) по z

$$\begin{aligned} \frac{dI(l_1)}{dz} = & -\frac{2e}{d_0} P \left[\sum_{n=-N}^N \operatorname{arctg} \frac{A_1}{n-z} - \sum_{n=-N}^N \operatorname{arctg} \frac{A_1}{n-z+1/2} \right] \\ & + \frac{2e}{d_0} P \left[\sum_{n=-N}^N (n-z) \frac{d}{dz} \left(\operatorname{arctg} \frac{A_1}{n-z} \right) - \sum_{n=-N}^N (n-z+1/2) \operatorname{arctg} \frac{A_1}{n-z+1/2} \right]. \quad (26) \end{aligned}$$

Второе слагаемое в этом выражении дает малую величину

$$P \frac{2e}{d_0} \frac{A_1}{N}. \quad (27)$$

Поэтому вместо (26) можем написать

$$\begin{aligned} \frac{dI(l_1)}{dz} = & -\frac{2e}{d_0} P \left[\sum_{n=-N}^N \operatorname{arctg} \frac{A_1}{n-z} - \sum_{n=-N}^N \operatorname{arctg} \frac{A_1}{n-z+1/2} \right]. \quad (28) \end{aligned}$$

Если в этом выражении выделить слагаемые с $n = 0$, то под суммами останутся медленно меняющиеся функ-

ции, поэтому вместо (28) получим

$$\begin{aligned} \frac{dL(l_1)}{dz} = & \frac{2\pi e}{d_0} P + \frac{2e}{d_0} P \left[\int_1^N \operatorname{arctg} \frac{A_1}{n+z} dn - \int_1^N \operatorname{arctg} \frac{A_1}{n-z} dn + \int_1^N \operatorname{arctg} \frac{A_1}{n+(1/2-z)} dn - \int_1^N \operatorname{arctg} \frac{A_1}{n-(1/2-z)} dn \right]. \quad (29) \end{aligned}$$

Используя формулы

$$\operatorname{arctg} x = \operatorname{arctg} \frac{1}{x}; \quad x > 0,$$

$$\int \operatorname{arctg} \frac{x}{A} = x \operatorname{arctg} \frac{x}{A} + \frac{A}{2} \ln(A^2 + x^2), \quad (30)$$

получим

$$\frac{dL(l_1)}{dz} = \frac{2\pi e}{d_0} P - \frac{\pi e}{d_0} P = \frac{\pi e}{d_0} P. \quad (31)$$

Окончательно, учитывая вклад также от слагаемого $dI(l_2)/dz$, для напряженности поля получим

$$E_z = -\frac{1}{d_z} \frac{2\pi e}{d_0} P. \quad (32)$$

Отсюда с учетом того, что $I(1/4) = 0$, находим потенциал точечной решетки, который приводится также в работе [5],

$$I(z) = \frac{2\pi e}{d_0} P(z - 1/4). \quad (33)$$

Согласно (12), для потенциала плоскостного каналирования окончательно имеем

$$\begin{aligned} \langle \varphi_{\text{tot}} \rangle = & \langle \varphi_{\text{tot}}^+ \rangle + \langle \varphi_{\text{tot}}^- \rangle \\ = & \frac{2\pi e}{d_0} [f_1^+ + f_2^+ + f_1^- + f_2^- + P(z - 1/4)] \quad (34) \end{aligned}$$

или, пользуясь обозначениями (12),

$$\begin{aligned} \langle \varphi_{\text{tot}} \rangle = & \frac{2\pi e}{d_0} f, \quad f = f^+ + f^- + P(z - 1/4), \\ f^- = & \frac{1}{\lambda d_0} \left[(3 + \lambda^- z) e^{-\lambda^- z} - (3 + \lambda^- \sqrt{R_0^2 + z^2}) e^{-\lambda^- \sqrt{R_0^2 + z^2}} \right], \quad (35) \end{aligned}$$

а f^+ получается заменой $\lambda^- \Rightarrow \lambda^+$, $z \Rightarrow 1/2 - z$.

В заключение хотелось бы отметить, что изучение потенциала в поверхностном слое кристалла требует отдельного рассмотрения.

Список литературы

- [1] *Кумахов М.А.* Излучение каналированных частиц в кристаллах. М.: Энергоатомиздат, 1986.
- [2] *Барышевский В.Г.* Каналирование, излучение и реакции при высоких энергиях. Минск: Изд-во БГУ, 1982.
- [3] *Базылев В.А., Жеваго Н.К.* Излучение быстрых частиц в веществе и во внешних полях. М.: Наука, 1987.
- [4] *Геворкян Л.А., Корхмазян Н.А.* // ДАН СССР. 1983. Т. 273. № 4. С. 849.
- [5] *Высоцкий В.И., Кузьмин Р.Н., Моксюта Н.В.* // ЖЭТФ. 1987. Т. 93. Вып. 6 (12). С. 2015.
- [6] *Геворкян А.С., Корхмазян Н.Н., Меликян Г.Г.* // ЖТФ. 1989. Т. 59. Вып. 3. С. 54. Препринт Ереванского физ. ин-та № ЕФИ-1051 (14)-88. 1988.
- [7] *Геворкян А.С., Корхмазян Н.Н., Меликян Г.Г.* Тез. докл. 15-го Всесоюз. совещания по физике взаимодействия заряженных частиц с кристаллами. М., 1988. С. 32.
- [8] *Корхмазян Н.Н., Меликян Г.Г.* // Изв. НАН Армении. Физика. 1993. Т. 28. Вып. 2–3. С. 56.
- [9] *Корхмазян Н.А.* // Изв. НАН Армении. Физика. 1955. Т. 32. Вып. 5. С. 198.
- [10] *Berman B.L. et al.* // Nucl. Inst. and Meth. in Phys. Res. B. 1996. Vol. 119. P. 71.
- [11] *Бете Г., Солттер Э.* Квантовая механика с одним и двумя электронами. М.: Физматгиз, 1960.