

01;05;10

# Потенциал плоскостного каналирования в поверхностном слое кристалла LiH

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

Армянский педагогический университет им. Х. Абовяна,  
375010 Ереван, Армения

(Поступило в Редакцию 1 сентября 2003 г.)

Показано, что потенциал в поверхностном слое кристалла несколько отличается от потенциала в глубине кристалла. Это отличие крайне мало, порядка 3%. Показано также, что толщина слоя, в котором имеет место это изменение, пренебрежимо мала по сравнению с длиной деканалирования.

## 1. Постановка задачи

В работе [1] исследуется эффективный потенциал плоскостного каналирования вдоль заряженных плоскостей (111) и (1 $\bar{1}\bar{1}$ ) в легких ионных кристаллах LiH и LiD. В данной работе, в частности, показано, что длина деканалирования в этих кристаллах оказывается более чем на порядок больше, чем та же величина в других кристаллах, что делает эти кристаллы наиболее перспективными с практической точки зрения. Этим обстоятельством, как нам представляется, обусловлено появление большой экспериментальной работы группы авторов [2]. В работе исследуется излучение электронов и позитронов при каналировании вдоль разных кристаллографических плоскостей в кристаллах LiH и LiD. В частности, впервые было обнаружено излучение, обусловленное туннельным переходом между энергетическими уровнями двух соседних потенциальных ям.

В работе [1] задача об определении эффективного потенциала каналирования решена, как отмечено авторами, для бесконечного кристалла. Однако, как показано авторами настоящей работы, в [3] понятие „бесконечный кристалл“ для рассматриваемой задачи, скорее всего, неоднозначно. Дело в том, что получаемый результат существенно зависит от очередности устремления к бесконечности поперечных и продольных по отношению к каналу размеров кристалла. Это один из редких случаев, встречающихся в физике, когда эта очередность имеет решающее значение. В работе [3] данная задача решена для конечного кристалла LiH. В работе, в частности, дана оценка толщины поверхностного слоя кристалла, где полученные формулы для эффективного потенциала не могут быть применены без дополнительного исследования.

В настоящей работе с целью завершения теории обсуждаемой задачи исследуется поведение потенциала в поверхностном слое кристалла LiH.

## 2. Базовые формулы

В работе [3] для эффективного потенциала получена формула

$$\langle \phi_{\text{tot}} \rangle = \frac{2\pi e}{d_0} (f^- + f^+) + I_{\text{set}},$$

$$f^- = \frac{1}{\lambda^- d_0} \left[ (\lambda^- |z| + 3) e^{-\lambda^- |z|} - (\lambda^- \sqrt{R_0^2 + z^2} + 3) e^{-\lambda^- \sqrt{R_0^2 + z^2}} \right],$$

$$\lambda = \frac{2z^*}{a_0}, \quad z^* = z - 5/16, \quad z^-(\text{H}) = 1, \quad z^+(\text{Li}) = 3,$$

$$I_{\text{set}} = I^-(a) + I^+(b)$$

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

$$a^2 = p^2(n-z)^2, \quad b^2 = p^2\left(n + \frac{1}{2} - z\right)^2, \quad p = \frac{d_z}{d_0} = 0.8774, \quad (1)$$

где  $a_0 = 0.528 \text{ \AA}$  — радиус Бора,  $d_0 = 3^{1/4} d / 2 = 2.687 \text{ \AA}$  — сторона эквивалентной квадратной ячейки усреднения,  $d = 4.084 \text{ \AA}$  — постоянная решетки,  $\pi R_0^2 = d_0 \times d_0$ ,  $d_z = d / \sqrt{3} = 2.358 \text{ \AA}$  — расстояние между одноименными заряженными плоскостями,  $e$  — заряд электрона,  $I_{\text{set}}$  — усредненный потенциал точечной кристаллической решетки.

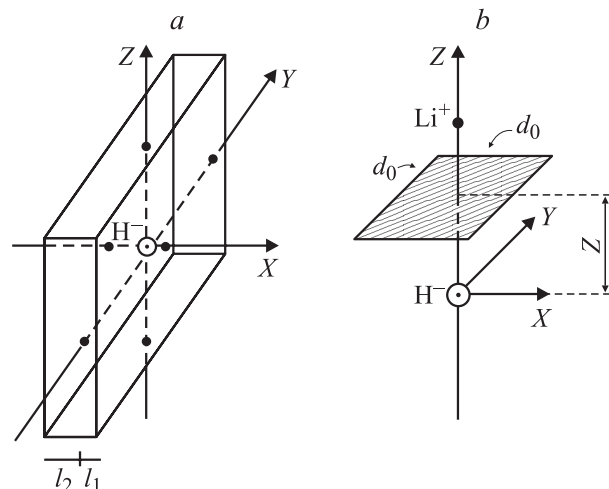


Рис. 1. Избранная система координат (a) и положение ячейки усреднения кристалла (b).

$l_1$	$Z$										
	0.00	0.05	0.10	0.15	0.20	0.25	0.30	0.35	0.40	0.45	0.5
	0.00	0.12	0.23	0.35	0.47	0.59	0.70	0.82	0.94	1.06	1.18
0	2.53	1.28	0.46	0.05	0.00	0.25	0.80	1.64	2.90	4.85	8.09
10 (27 Å)	2.47	1.22	0.42	0.03	0.00	0.28	0.86	1.73	3.00	4.97	8.22
20 (54 Å)	2.46	1.21	0.41	0.03	0.00	0.28	0.86	1.73	3.00	4.98	8.22
100 (270 Å)	2.45	1.21	0.41	0.02	0.00	0.28	0.86	1.73	3.01	4.98	8.23

Координатная система отсчета, связанная с кристаллической пластиной, показана на рис. 1, а. Предполагается, что вдоль оси  $y$  кристалл бесконечен, а плоскость  $(x, y)$  является плоскостью каналирования. Частица движется вдоль оси  $x$ . На рис. 1, б показана ячейка усреднения потенциала. Координаты узлов отрицательной подрешетки определяются как  $\bar{L} = (ld_0, md_0, nd_z)$ , где  $l, m, n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$ . Положительная подрешетка смещена относительно отрицательной на вектор  $(0, 0, d_z/2)$ . Функция  $f^+$  в (1) получается из  $f^-$  заменой  $\lambda^- \Rightarrow \lambda^+$  и  $z \Rightarrow -(1/2 - z)$ . В выражении  $f^+$  и  $f^-$  все отрезки измерены в единицах  $d_z$ .

Пусть центр ячейки усреднения (точка на оси  $z$ ) находится на расстоянии  $l_1$  (в единицах  $d_0$ ) от центра правой крайней ячейки (рис. 1, а) и на расстоянии  $l_2$  от левой. Так как в практически осуществимых случаях число  $(l_1 + l_2)$  всегда большое ( $\geq 10^6$ ), то мы допустим, что  $l_2 \gg 1$  и  $l_2 \geq l_1$ . Положительное целое число  $l_1$  может принимать значения  $0 \leq l_1 \leq l_2$ . Что же касается числа заряженных плоскостей (нумерованных числом  $n$ ), расположенных вдоль оси  $z$ , то естественно допустить, что  $-N \leq n \leq N$  и  $N \gg l_2$ .

### 3. Исследование потенциала в поверхностном слое кристалла

Для расчета эффективного потенциала в поверхностном слое кристалла просуммируем в выражении (1) по  $l$  в пределах  $-l_2 \leq l \leq l_1$ :

$$I_{\text{сет}} = I(l_1) + I(l_2)$$

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

Интегрируя это выражение и вводя обозначение  $(l_{1,2} + 1/2)/p = A_{1,2}$ , находим

$$I(l_1) = \frac{e}{d_0} p \sum_{n=-N}^{N \gg l_1} \left\{ A_1 \ln [A_1^2 + (n - z)^2] - A_1 \ln [A_1^2 + (n + 1/2 - z)^2] + 2(n - z) \arctg A_1 / (n - z) - 2(n + 1/2 - z) \arctg A_1 / (n + 1/2 - z) \right\}, \quad (3)$$

а  $I(l_2)$  получается из (3) заменой  $A_1 \Rightarrow A_2$ .

Так как в рассматриваемом случае  $A_2 \gg 1$ , то, согласно работе [3], имеем

$$I(l_2) = \frac{\pi e}{d_0} p(z - 1/4). \quad (4)$$

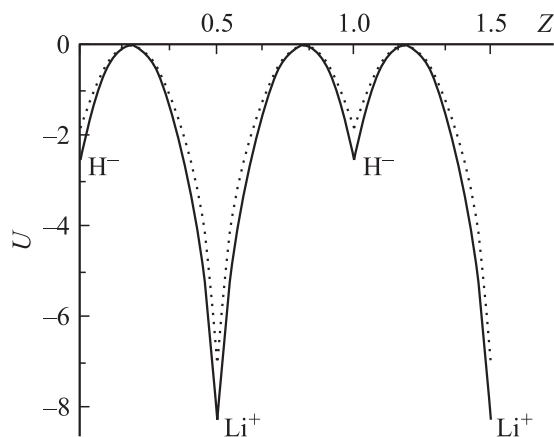
Обратимся теперь к выражению (3). В рассматриваемом нами случае  $l_1$  может и не удовлетворять условию  $l_1 \gg 1$ . Поэтому приходится проводить численный расчет выражения (3). Тогда для потенциальной энергии электрона получим

$$U = -\frac{2\pi e^2}{d_0} \left\{ f^- + f^+ + \frac{p}{2} (z - 1/4) + p \sum_{n=-N}^{N \gg l_1} \left[ \frac{A_1}{2\pi} \ln \frac{A_1^2 + (n - z)^2}{A_1^2 + (n + 1/2 - z)^2} + \frac{n - z}{\pi} \arctg \frac{A_1}{n - z} - \frac{n + 1/2 - z}{\pi} \arctg \frac{A_1}{n + 1/2 - z} \right] \right\}. \quad (5)$$

В случае  $l_1 \gg 1$  сумма в (5) дает  $(z - 1/4)/2$  и мы приходим к формуле (35) работы [3]

$$U = -\frac{2\pi e^2}{d_0} [f^- + f^+ + p(z - 1/4)]. \quad (6)$$

Эта функция описывает поведение потенциала в глубине кристалла. Она представлена сплошной кривой на рис. 2. Эта кривая получается как при помощи формулы (5) при  $l_1 = 100$  ( $N = 10^4$ ), так и при помощи формулы (6). По формуле (5) вычислены также потенциалы  $U(z)$  в поверхностном слое кристалла для трех разных значений параметра:  $l_1 = 0, 10, 20$  в единицах  $d_0$ . Графики этих функций почти совпадают с приведенной на рис. 2 сплошной кривой. Динамику поведения потенциала в зависимости от глубины кристалла можно проследить по приведенной таблице. В первой строке таблицы даны значения  $z$  в единицах  $d_z$ , а во второй — значение  $z$  в ангстремах. Значения потенциальной энергии даны с обратным знаком. Как видно из таблицы, если потенциал у самой поверхности ( $l_1 = 0$ ) отличается от потенциала в глубине кристалла на 1.7–3.2%, то уже на расстоянии 50 Å это отличие составляет лишь 0.4%. Таким образом, на расстояниях порядка 50 Å от поверхности кристалла (вдоль линии движения частицы) потенциал можно вычислять по



**Рис. 2.** Сравнение потенциала, полученного в настоящей работе (сплошная кривая) с потенциалом, полученным в работе [1] (пунктир) для плоскостей  $(1\bar{1}1)$ .  $U$  измерена в eV,  $z$  — в единицах  $d_z$ .

формуле (6) с погрешностью до 0.4%. На глубине порядка 100 Å эта погрешность уменьшается до 0.05%.

Пунктир на рис. 2 — график той же функции, но по результатам работы [1]. Наиболее существенно сплошная и пунктирная кривые различаются на плоскостях LiH и LiD (на 18 и 35% соответственно). Эта разница обусловлена тем, что в [1] слагаемые, содержащие  $R_0$  в выражениях для  $f^-$  и  $f^+$ , отсутствуют.

Полученные в данной работе результаты показывают, что потенциал в поверхностном слое кристалла незначительно отличается от потенциала на глубине кристалла, так что формула (6) с большой точностью может быть применена для всего кристалла.

## Список литературы

- [1] *Высоцкий В.И., Кузьмин Р.Н., Моксюта Н.В.* // ЖЭТФ. 1987. Т. 93. Вып. 6(12). С. 2015.
- [2] *Berman B.L. et al.* // Nucl. Instr. and Meth. In Phys. Res. 1996. Vol. B1119. P. 71.
- [3] *Корхмазян Н.А., Корхмазян Н.Н., Бабаджанян Н.Э.* // ЖТФ. 2003. Т. 73. Вып. 8. С. 16.