

01;05;10

К теории каналирования в кристалле LiH

© Н.Э. Бабаджанян

Армянский государственный педагогический университет им. Х. Абовяна,
375010 Ереван, Армения
e-mail: Natan-K@inbox.ru

(Поступило в Редакцию 31 мая 2005 г.)

Получен усредненный по тепловым колебаниям потенциал плоскостного каналирования вдоль заряженных плоскостей $(\bar{1}\bar{1}1)$ и (111) в кристалле LiH. Показано, что теоретически вычисленное значение энергии испущенного фотона, соответствующего переходу между уровнями двух соседних потенциальных ям, хорошо согласуется с экспериментом.

PACS: 03.65.jp, 73.40.Gk

Введение

Изучению особенностей каналирования вдоль заряженных плоскостей $(\bar{1}\bar{1}1)$ и (111) в легких ионных кристаллах LiH и LiD посвящен ряд работ [1–6]. В работах [1,2] развит общий метод расчета потенциалов с учетом вклада всех ионов кристалла. Однако выражения для эффективных потенциалов каналирования получатся в виде медленно сходящихся тройных сумм от весьма громоздких выражений, что приводит к большим неудобствам. Несравненно более простой вид имеет потенциал, полученный в [3]. Нам кажется, что наиболее ценным результатом работы [3] следует считать вывод о том, что длина деканалирования в кристалле LiH оказалось более чем на порядок больше, чем та же величина в других кристаллах.

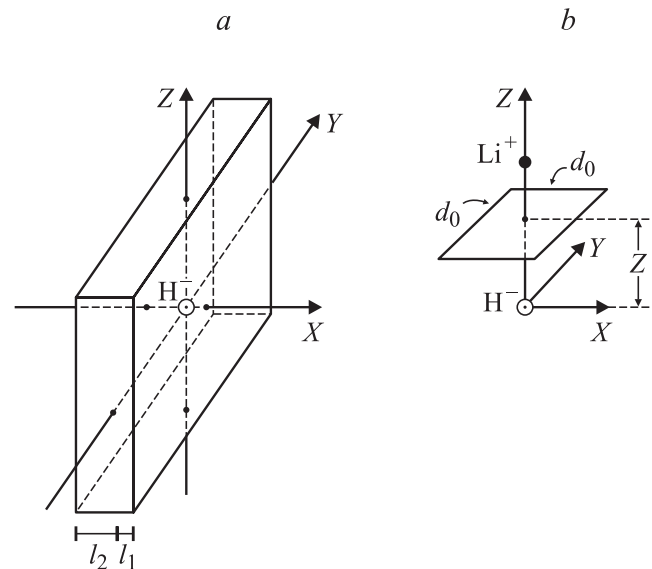
В работах [4,5] обсуждаемая задача была решена заново с учетом конечных размеров кристалла. Исследовано поведение потенциала в глубине и на поверхностном слое кристалла. Полученный в этих работах потенциал (для „замороженного“ кристалла) несколько отличается от потенциала, приведенного в [3]. Эта разница на заряженных плоскостях достигает порядка 30% [5]. Однако наиболее ярко различие обсуждаемых теорий проявляется после тепловых усреднений потенциала. Результаты работы [3] противоречат также результатам полученным, впоследствии, в большой экспериментальной работе [6]. Настоящая работа посвящена обсуждению этого вопроса.

Тепловое усреднение потенциала и обсуждение полученных результатов

В работе [3] утверждается, что „усредненный“ электронный потенциал LiH для плоскости (111) характеризуется аномальным, не имеющим аналога свойством инверсии — трансформацией потенциальной ямы плоскости H^- в „барьер“, и „возникновение барьеров для электронов в плоскостях H^- вместо потенциальных ям

начинается буквально с температуры $T = 0\text{ K}$ “. В то же время работа [6] свидетельствует о наличии потенциальной ямы на плоскостях H^- при температуре $T = 300\text{ K}$. Более того, авторы этой работы сообщают о наличии туннельного перехода электрона с энергетического уровня $n = 0'$ этой ямы на уровень $n = 1$ более глубокой соседней ямы (Li^+). При энергии электрона в 54 MeV этот переход сопровождается испусканием квантов с энергией (по измерениям) в пределах $24.9\text{--}26.1\text{ keV}$ и, по теоретическим оценкам тех же вопросов, с энергией 22.8 KeV , что не согласуется с экспериментом.

Пусть размеры кристалла по оси y бесконечны (см. рисунок), а по оси z намного больше, чем по x , вдоль которой частица движется. Тогда для эффективного потенциала плоскостного каналирования в „заморожен-



a — избранная система координат; b — положение ячейки усреднения кристалла.

Z, d_z	0	0.05	0.10	0.15	0.20	0.25	0.30	0.35	0.40	0.45	0.50
$z, \text{Å}$	0	0.1179	0.2358	0.3538	0.4716	0.5895	0.7074	0.8253	0.9432	1.0611	1.1790
$-U, \text{eV}$	0.2968	0.2361	0.1113	0	0.0405	0.3069	0.8669	1.7573	2.9109	3.8958	4.1218

ном“ кристалле имеем [4]:

$$\langle \varphi_{tot} \rangle = \frac{2\pi e}{d_0} f, \quad f = f^+ + f^- + p(z - 1/4) \quad (1)$$

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

а f^+ получается при замене $\lambda^- \Rightarrow \lambda^+$, $z \Rightarrow z - 1/2$. Здесь $d_0 = 3^{1/4} d/2 = 2.6874 \text{Å}$, $d = 4.084 \text{Å}$ — постоянная решетки, $R_0 = d_0/\sqrt{\pi}$, $p = d_z/d_0 = 0.8774$, $d_z = d/\sqrt{3} = 2.358 \text{Å}$ — ширина канала, $\lambda = 2z^*/a_0$, $z^* = z - 5/16$, z — порядковый номер, $a_0 = 0.528 \text{Å}$ — радиус Бора, и все отрезки в f измерены в единицах d_z . Потенциал (1) получен для полуканала $0 \leq z \leq 1/2$, т.к. потенциал во второй половине канала можно получить с помощью зеркального отображения в плоскости $z = 1/2$.

Тепловое усреднение потенциала осуществляется по формуле

$$\varphi(z)_{th} = \frac{1}{\sqrt{2\pi u}} \int_{-\infty}^{\infty} \varphi(z - x) e^{-x^2/2u^2} dx, \quad (2)$$

где u — радиус Дебая. Вторые слагаемые в квадратных скобках в выражениях для f^\pm аналитически не поддаются усреднениям. Поэтому мы проводим численное усреднение потенциала. Слагаемое $p(z - 1/4) \equiv I$ в (1) дает совместный вклад в общий потенциал от „точечных“ подрешеток обоих знаков. Поэтому предварительно эти вклады необходимо отделить друг от друга и представить в виде $I = I^- + I^+$. Воспользовавшись методом расчета, предложенным в [4], находим

$$I^- = p|z| - pz^2, \quad I^+ = -p|z - 1/2| + p|z - 1/2|^2. \quad (3)$$

Если $0 \leq z \leq 1/2$, то $I = p(z - 1/4)$. Как и следовало ожидать, при предложенных нами линейных размерах кристалла, $I^-(z)$ симметрична по отношению к плоскости $Z = 0$, а $I^+(z)$ — по отношению к $Z = 1/2$.

В литературе для радиусов Дебая часто приводятся значения, весьма отличающиеся друг от друга. Поскольку измерения этих величин в [6] проводились сравнительно недавно, и мы надеемся объяснить указанный выше туннельный переход, будем пользоваться теми же параметрами: $u^-(\text{H}) = 0.259 \text{Å}$, $U^+(\text{Li}) = 0.171 \text{Å}$, $\gamma = 105.5$ (Лоренц-фактор). Отметим также, что приведенное значение для u^- с большой точностью совпадает

с $u^- = 0.261 \text{Å}$, получаемым по формуле Дебая [7]:

$$u^2 = \frac{3\hbar N_0}{kAT_D} \left[\left(\frac{T}{T_D} \right)^2 \int_0^{T/T_D} \frac{x dx}{e^x - 1} + \frac{1}{4} \right], \quad (4)$$

где $T_D = 860 \text{K}$ — дебаевская температура кристалла LiH, N_0 — число Авогадро, k — постоянная Больцмана, A — атомный вес элемента.

Результаты усреднения потенциала представлены в таблице ($T = 300 \text{K}$). Как видно, потенциальная яма на плоскости H^- не превращается в барьер. Глубина ям на плоскостях H^- и Li^+ соответственно равна $U'_0 = 0.3$ и $U_0 = 4.12 \text{eV}$. Аппроксимируя кривые потенциальных ям функций $u(z) = -u_0/ch^2(z/b)$, находим $u'_0 = 0.3 \text{eV}$, $b' = 0.21 \text{Å}$ и $u_0 = 3.9 \text{eV}$, $b = 0.33 \text{Å}$. Для такого потенциала уравнение Шредингера решается точно [7]. Энергетический спектр поперечного движения в канале определяется следующим образом:

$$E_n = -\frac{\hbar^2}{2m\gamma b^2} (s - n)^2, \quad n = 0, 1, \dots [s],$$

$$s = (2m\gamma U_0 b^2 / \hbar^2 + 1/4)^{1/2} - 1/2, \quad (5)$$

где m — масса электрона, $[s]$ — целая часть числа s . Для ям на H^- и Li^+ получаем $s' = 0.307$, $s = 2.7$ и $E'_0 = -0.066 \text{eV}$, $E_1 = -1.24 \text{eV}$. Энергия излученного кванта, обусловленная переходом $0' \Rightarrow 1$, определяется формулой $\hbar\omega = (E'_0 - E_1)2\gamma^2 = 25.14 \text{KeV}$, что хорошо согласуется с экспериментом.

Список литературы

- [1] Геворкян А.С., Корхмазян Н.Н., Меликян Г.Г. // ЖТФ. 1989. Т. 59. Вып. 3. С. 54.
- [2] Корхмазян Н.Н., Меликян Г.Г. // Изв. НАН Армении. Физика. 1993. Т. 28. Вып. 2–3. С. 56.
- [3] Высоцкий В.И., Кузьмин Р.Н., Максюта Н.В. // ЖЭТФ. 1987. Т. 93. Вып. 6(12). С. 2015.
- [4] Корхмазян Н.А., Корхмазян Н.Н., Бабаджанян Н.Э. // ЖТФ. 2003. Т. 73. Вып. 8. С. 1.
- [5] Корхмазян Н.А., Корхмазян Н.Н., Бабаджанян Н.Э. // ЖТФ. 2004. Т. 74. Вып. 12. С. 98.
- [6] Berman V.L. et al. // Nucl. Inst. and Meth. In Phys. Res. B. 1996. Vol. 119. P. 71.
- [7] Базылев В.А., Жеваго Н.К. Излучение быстрых частиц в веществе и во внешних полях. М.: Наука, 1987.