01;05;10

Потенциал плоскостного каналирования в тяжелых ионных кристаллах

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

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

(Поступило в Редакцию 2 июня 2006 г.)

Исследован потенциал плоскостного каналирования в тяжелых кристаллах типа KCl, имеющих конечные размеры.

PACS: 12.39.Pn

Метод расчета эффективных потенциалов каналирования, предложенный в работах [1,2], предполагает разложение функции Грина в ряд по векторам обратной решетки кристалла и дальнейшее усреднение потенциала вдоль плоскостей (осей) канала. Однако как сама задача, так и полученные выражения для потенциалов с математической точки зрения оказываются весьма сложными. По этому методу в работе [3] было исследовано осевое каналирование быстрых позитронов в канале Cl^- кристалла CsCl. Более простой метод расчета плоскостного каналирования вдоль заряженных плоскостей (111); $(1\bar{1}1)$ ионного кристалла LiH предложен в [4]. Аналогичный метод расчета был развит также в работе [5], где исследован потенциал плоскостного каналирования в тяжелых ионных кристаллах KCl и CsCl. Во всех отмеченных работах задача решена для бесконечных кристаллов. Однако бесконечность размеров кристалла часто наводит на ложный путь. В связи с этим в работах [6–8] нами исследовано поведение потенциалов в легких кристаллах LiH и LiD, имеющих конечные размеры. К сожалению, ошибка, связанная с использованием модели бесконечного кристалла, имеется также в работе [5]. Эта ошибка настолько тонко „замаскирована", что ее практически нельзя обнаружить, не изучив заранее случай конечных кристаллов. В настоящей работе исследуется поведение потенциала плоскостного каналирования в тяжелых ионных кристаллах, имеющих конечные размеры.

Плоский канал, ограниченный плоскостями $z = 0$ и $z = d_z$, изображен на рис. 1, где d_z — ширина канала. Предполагается, что каналированная частица пролетает вдоль оси x. Ввиду симметрии задачи потенциал вычисляется в полуканале $0 \le z \le d_z/2$. При расчете этого потенциала, как и в [6,7], облачная структура иона учитывается лишь для двух базисных ионов (Cl^- и K^+), расположенных на плоскостях $z = 0$ и $z = d_z/2$. Все остальные ионы считаются точечными зарядами, расположенными в остальных узлах кристаллической решетки. Ячейка усреднения потенциала (рис. 1) имеет форму квадрата $d_0 \times d_0$, где $d_0 = 3^{1/4}d/2$, а d — постоянная решетки. Потенциал отрицательной подрешетки в произвольной точке $\mathbf{r}(x, y, z)$ квадрата определяется формулой

$$\varphi^-_{tot} = \frac{eZ^-}{|\mathbf{r}|} + \varphi^-_{el} - e\sum_{L\neq 0}\frac{1}{|\mathbf{r}-\mathbf{L}|}, \tag{1}$$

где Z^- — число протонов в ядре иона, φ^-_{el} — поле электронного облака базисного иона, а $\mathbf{L} = (ld_0, md_0, nd_z)$, $l, m, n = 0, \pm1, \pm2, \ldots$ Потенциал положительной подрешетки получится из (1), если в ней произвести замену $z \Rightarrow (z - 1/2)$, изменить знак перед суммой и характеризующие ион параметры заменить на соответствующие параметры для положительных ионов. Для расчета слагаемого φ^-_{el} воспользуемся моделью Иенсена–Ленца [9] для плотности электронного облака иона

$$\rho = -e\,\frac{N}{A}\,\frac{e^{-x}}{x^3}\,(1 + Cx)^3;$$
$$x \equiv \sqrt{\alpha r}; \quad \alpha \equiv \xi Z^{1/3}/a_0, \tag{2}$$

где N и Z — числа электронов и протонов в ионе, C и ξ — вариационные параметры, $a_0 = 0.528\,\text{Å}$ радиус

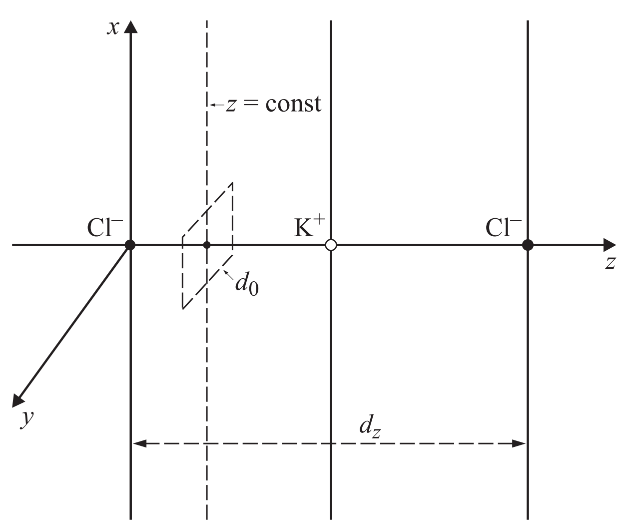

Рис. 1. Выбранный канал и плоскость $z = \text{const}$, на которой определяется усредненный потенциал.

Бора, $e = |e|$, и $r = |\mathbf{r}|$. Число A находится из условия нормировки функции (2)

$$\int\limits_0^\infty \rho 4\pi r^2 dr = -eN,$$

что дает

$$A = \frac{8\pi a_0^3}{\xi^3 z} P_c;$$

$$P_c = 120C^3 + 72C^2 + 18C + 2. \tag{3}$$

Поступив в дальнейшем аналогично работе [5] и воспользовавшись очевидным соотношением

$$\frac{eZ^\pm - eN^+}{|\mathbf{r}|} = \pm\frac{2}{\mathbf{r}},$$

вместо (1) получим

$$\varphi^-_{tot}(\mathbf{r}) = \frac{2eN^-\alpha^-}{P_c^-} F^-(r) - \sum_{l,m,n} \frac{e}{|\mathbf{r} - \mathbf{L}|},$$

$$\varphi^-_{tot}(\mathbf{r}) = \frac{2eN^+\alpha^+}{P_c^+} F^+|\mathbf{r} - \mathbf{\Delta}| + \sum_{l,m,n} \frac{e}{|\mathbf{r} - \mathbf{L} - \mathbf{\Delta}|}, \tag{4}$$

где $\mathbf{\Delta}$ — вектор вдоль оси z, с модулем $|\mathbf{\Delta}| = d_z/2$, а функция F имеет вид

$$F^-(r) = e^{-x}\Big[C^3x^2 + (7C^3 + 3C^2)x$$

$$+ (27c^3 + 15C^2 + 3C) + \frac{P_c}{2}\frac{1}{x} + \frac{P_c}{2}\frac{1}{x^2}\Big], \tag{5}$$

где характеризующие параметры относятся к отрицательной подрешетке.

В работе [5] „доказано", что усредненный по плоскостям (x, y) потенциал точечной кристаллической решетки равен нулю

$$\left\langle -\sum_{l,m,n} \frac{e}{|\mathbf{r} - \mathbf{L}|} + \sum_{l,m,n} \frac{e}{|\mathbf{r} - \mathbf{L} - \mathbf{\Delta}|} \right\rangle = 0. \tag{6}$$

Эта ошибка, как уже было отмечено, появляется в результате использования модели бесконечного кристалла. Если размеры кристаллов вдоль пролета частицы много меньше, чем ее поперечные размеры (практически интересный случай), то, как было показано в [6,7], вместо (6) имеем

$$\langle \ldots \rangle = \frac{2\pi e}{d_0} p(z - 1/4); \;\; p = d_z/d_0; \;\; 0 \le z \le 1/2, \tag{7}$$

где z измерена в единицах d_z.

Усреднение первого слагаемого в (4) удобно провести в полярных координатах

$$\langle F(r) \rangle = \frac{1}{d_0^2} \int\limits_0^{\rho_0} F(r) 2\pi\rho d\rho; \quad \rho_0 = d_0/\sqrt{\pi}. \tag{8}$$

Перейдя здесь к интегрированию по переменной $x = \left[\alpha^2(\rho_0^2 + z^2)\right]^{1/4}$, для первого слагаемого в (4) находим

$$\frac{2eN^-\alpha^-}{P_e^-}\langle F^- \rangle = \frac{2\pi e}{d_0}\left[\varphi(x_1^-) - \varphi(x_2^-)\right],$$

$$x_1^- = \sqrt{\alpha^-|z|}, \quad x_2^- = \left[\alpha^-\sqrt{\rho_0^2 + z^2}\right]^{1/2}, \tag{9}$$

где все отрезки, кроме d_0 в коэффициенте, измерены в единицах d_z, а функция $\varphi(x)$ имеет вид

$$\varphi(x) = \frac{4N}{P_c \alpha d_0} e^{-x}$$

$$\times (A_5x^5 + A_4x^4 + A_3x^3 + A_2x^2 + A_1x + A_0), \tag{10}$$

$$A_5 = C^3; \qquad A_4 = 12C^3 + 3C^2;$$

$$A_3 = 75C^3 + 27C^2 + 3C,$$

$$A_2 = 225C^3 + 81C^2 + 9C + P_c/2;$$

$$A_1 = A_0 = 450C^3 + 162C^2 + 18C + 3P_c/2. \tag{11}$$

Таким образом, с учетом (4), (7) и (9), для усредненного вдоль заряженных плоскостей (111) и (111) потенциала получаем

$$\langle \varphi_{tot}(z) \rangle = \langle \varphi^-_{tot}(z) \rangle + \langle \varphi^+_{tot}(Z) \rangle$$

$$= \frac{2\pi e}{d_0}\Big[\varphi^+(x_1^+) - \varphi^+(x_2^+) + \varphi^-(x_1)$$

$$- \varphi^-(x_2^-) + p(z - 1/4)\Big]; \tag{12}$$

$$x_1^+ = \sqrt{\alpha^+|z - 1/2|}, \quad x_2^+ = \left[\alpha^+\sqrt{\rho_0^2 + z^2}\right]^{1/2},$$

а $x_{1,2}^-$ — даны в (9).

Для иллюстрации полученных результатов по (12) на рис. 2 приводится график функции потенциальной энергии взаимодействия $U(z) = -e\langle \varphi_{tot}(z) \rangle$ каналированного электрона с гранецентрированным кристаллом KCl. При

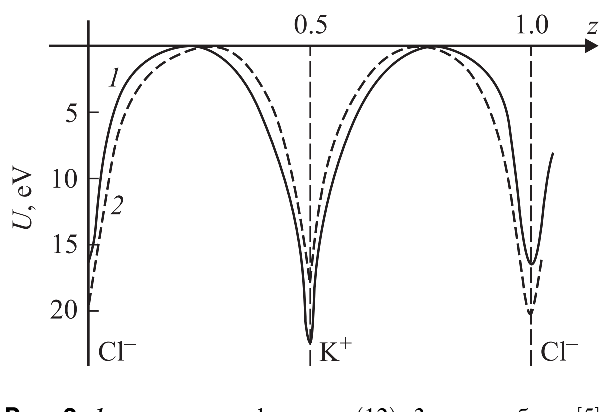

Рис. 2. *1* — на основе формулы (12), *2* — из работы [5].

этом были использованы следующие характеризующие кристалл параметры [9]:

	N	Z	c	ξ
K^+	18	19	0.285	12.04
Cl^-	18	17	0.243	9.76

$d = 6.290\,Å$, $d_z = 3.632\,Å$, $d_0 = 4.139\,Å$, $p = 0.877$, $2\pi e^2/d_0 = 21.86\,\text{eV}$.

Как видно из рис. 2, глубина потенциальной ямы на плоскостях K^+ равна 22.5 eV, а на плоскостях Cl^- — 16.5 eV, в то время как, согласно работе [5], обе они равны 20 eV.

Список литературы

[1] *Геворкян А.С., Корхмазян Н.Н., Меликян Г.Г.* // ЖТФ. 1989. Т. 59. Вып. 3. С. 654.

[2] *Корхмазян Н.Н., Меликян Г.Г.* // Изв. НАН Армении. Физика. 1993. Т. 28. Вып. 2–3. С. 656.

[3] *Gevorkyan A.S., Grigoryan A.G., Mkrthyan A.R. and Tonoyan A.G.* // Techn. Phys., 1998. Vol. 43. N 4. P. 452.

[4] *Высоцкий В.И., Кузьмин Р.Н., Максюта Н.В.* // ЖЭТФ. 1987. Т. 93. Вып. 6(12). С. 2015.

[5] *Корхмазян Н.А., Корхмазян Н.Н.* // НАН Армении. Физика. 1995. Т. 30. Вып. 5. С. 198.

[6] *Корхмазян Н.А., Корхмазян Н.Н., Бабаджанян Н.Э.* // ЖТФ. 2003. Т. 73. Вып. 8. С. 1.

[7] *Корхмазян Н.А., Корхмазян Н.Н., Бабаджанян Н.Э.* // ЖТФ. 2004. Т. 74. Вып. 12. С. 98.

[8] *Бабаджанян Н.Э.* // ЖТФ. 2006. Т. 76. Вып. 3. С. 89.

[9] *Гамбош П.* Статическая теория атома и ее применения. М.: ИЛ, 1951. 398 с.