Расщепление уровней энергии поперечного движения позитронов при каналировании в направлении [100] кристалла кремния

В.В. Сыщенко[1], *А.И. Тарновский*[1], *В.И. Дроник*[1]
А.Ю. Исупов[2]
[1] *НИУ «БелГУ», г. Белгород;* [2] *ЛФВЭ ОИЯИ, г. Дубна*

Движение заряженных частиц в кристалле может быть как регулярным, так и хаотическим. На квантовом уровне хаотичность проявляется в статистических свойствах массива уровней энергии. Особый интерес представляют системы, в которых области регулярного движения разделены в фазовом пространстве областью динамического хаоса. На статистику уровней таких систем существенно влияет возможность туннелирования между динамически изолированными друг от друга областями фазового пространства. В настоящем докладе выполнена оценка матричных элементов таких туннельных переходов.

Как проявляет себя хаос в квантовых системах?

Оказывается, что энергетические уровни квантовой системы, чей классический аналог демонстрирует хаотическое поведение, проявляют тенденцию к взаимному отталкиванию. Такое поведение приводит к вигнеровскому распределению расстояний *s* между соседними уровнями:

$$p(s) = \frac{\pi\rho^2 s}{2}\exp\left(-\frac{\pi\rho^2 s^2}{4}\right),$$

где ρ – средняя плотность уровней на исследуемом интервале.

В случае же регулярного движения такая корреляция между уровнями энергии системы отсутствует, что приводит к экспоненциальному (пуассоновскому) распределению межуровневых расстояний:

$$p(s) = \rho\exp(-\rho s)$$

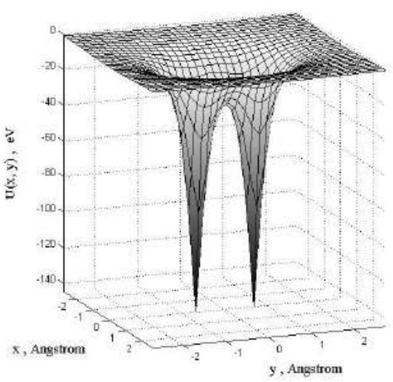
Для электронов, каналированных вблизи оси [110] кремния, эти свойства исследовались в

Шульга Н.Ф., Сыщенко В.В., Тарновский А.И., Исупов А.Ю. // Поверхность (2015) № 7, 72.

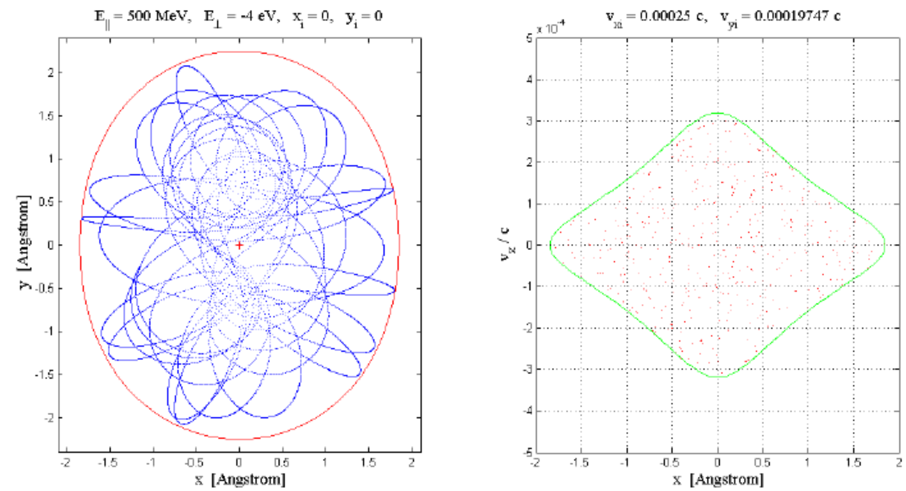
Сыщенко В.В., Тарновский А.И. // Поверхность. 2021. № 7. С. 84

Когда все просто: каналирование в направлении [110]

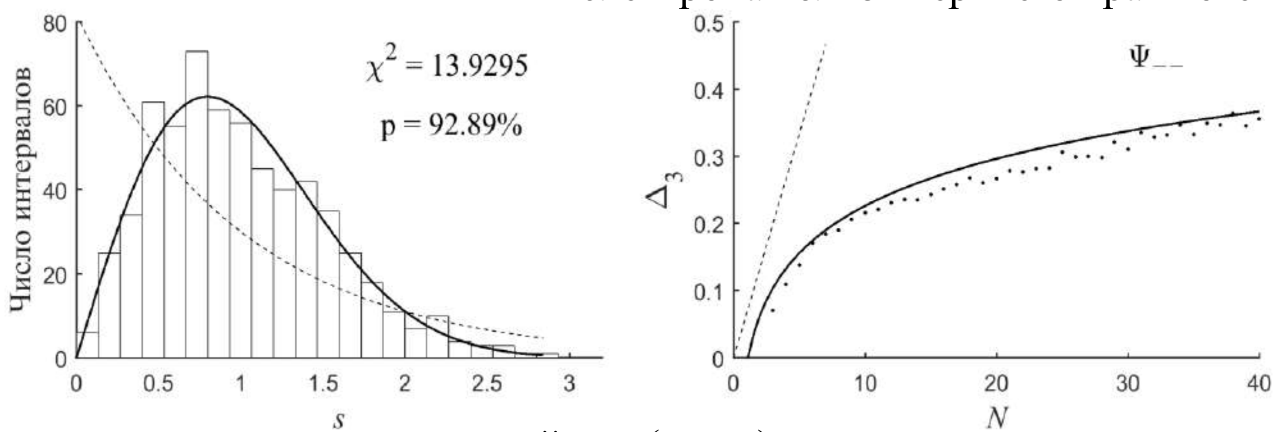
Выше седловой точки потенциала двух соседних цепочек [110] кристалла типа алмаза движение каналированного электрона будет носить, для подавляющей доли начальных условий, хаотический характер:



Потенциальная энергия электрона в поле непрерывных потенциалов двух соседних цепочек [110] кристалла кремния.



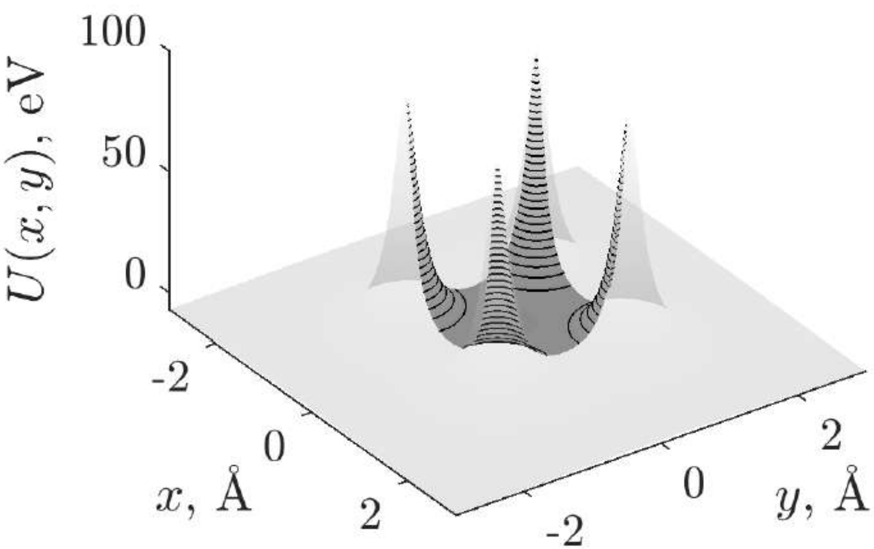
Пример траектории и график Пуанкаре движения электрона вблизи верхнего края потенциальной ямы.

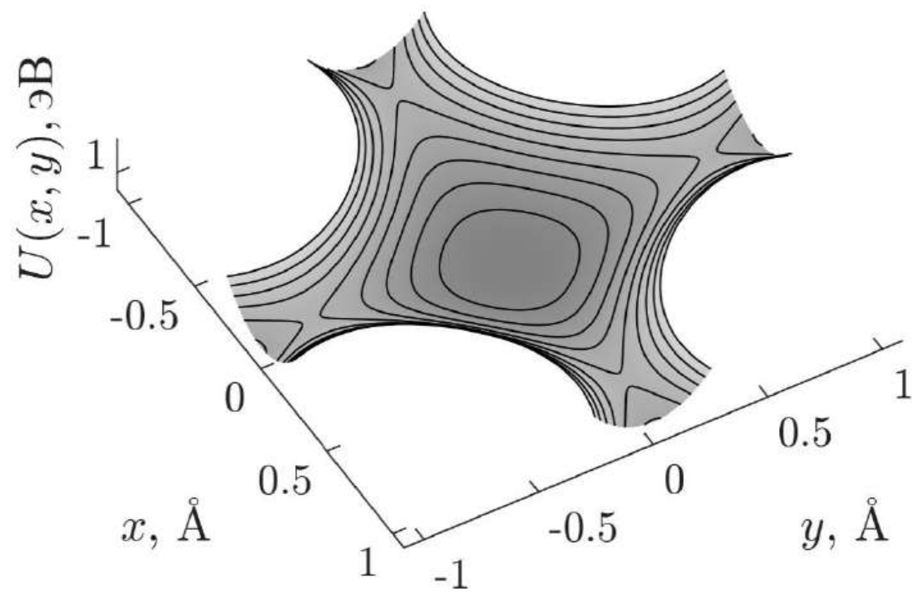


Распределение межуровневых расстояний s (слева) и спектральная жесткость (справа) для каналированных электронов с энергией 500 МэВ. Пунктирные линии соответствуют предсказаниям теории для регулярных, сплошные линии – для хаотических в классическом пределе систем.

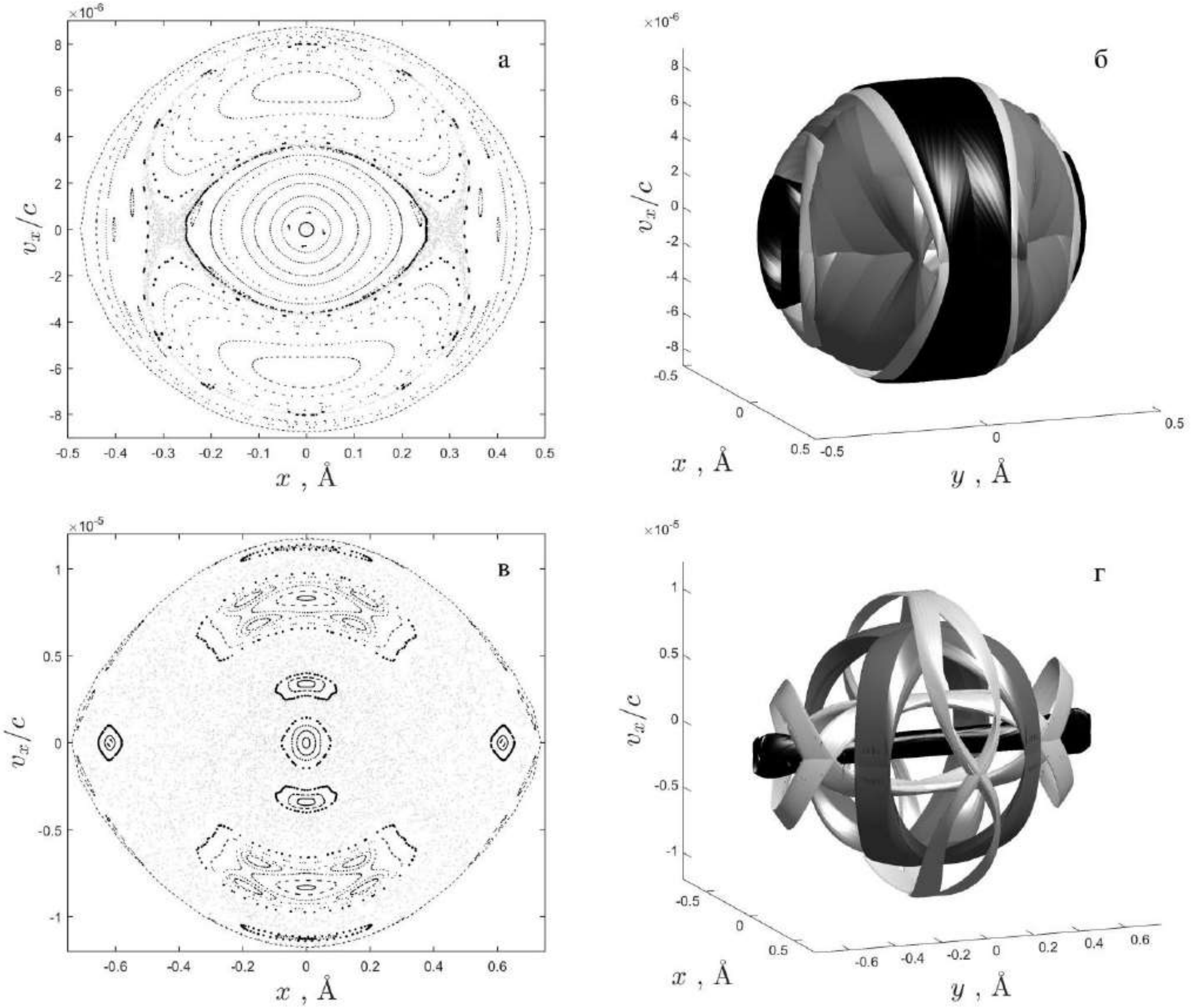
Более интересный случай – сосуществование областей регулярной и хаотической динамики в фазовом пространстве

Именно это будет иметь место для позитронов, движущихся вблизи направления [100]. Между четырьмя соседними атомными цепочками возникает небольшая потенциальная ямка с симметрией квадрата:





В глубине ямы движение будет регулярно почти для всех начальных условий, вверху ямы доля хаотической динамики быстро возрастает:



Сечения Пуанкаре (*слева*) и проекции четырехмерных областей регулярной динамики в фазовом пространстве на подпространство (x, y, v_x) (*справа*) для значений энергии поперечного движения 0.7687 эВ (*вверху*) и 1.3865 эВ (*внизу*).

Какова будет статистика межуровневых расстояний в такой смешанной ситуации?

Предполагая, что регулярные области и хаотическая область порождают невзаимодействвующие между собой последовательности уровней, [*Berry M.V., Robnik M. // J. Phys. A (1984)* ***17****, 2413*], а также [*Богомольный Е.Б. // Письма в ЖЭТФ (1985)* ***41****, №2, 55*] показали, что в этом случае

$$p(s) = \frac{1}{\rho}\exp(-\rho_1 s)\left\{\rho_1^2 \operatorname{erfc}\left(\frac{\sqrt{\pi}}{2}\rho_2 s\right) + \left(2\rho_1\rho_2 + \frac{\pi}{2}\rho_2^3 s\right)\exp\left(-\frac{\pi}{4}\rho_2^2 s^2\right)\right\}$$

где ρ_1 и ρ_2 – соответствующие средние плотности уровней ($\rho_1 + \rho_2 = \rho$).

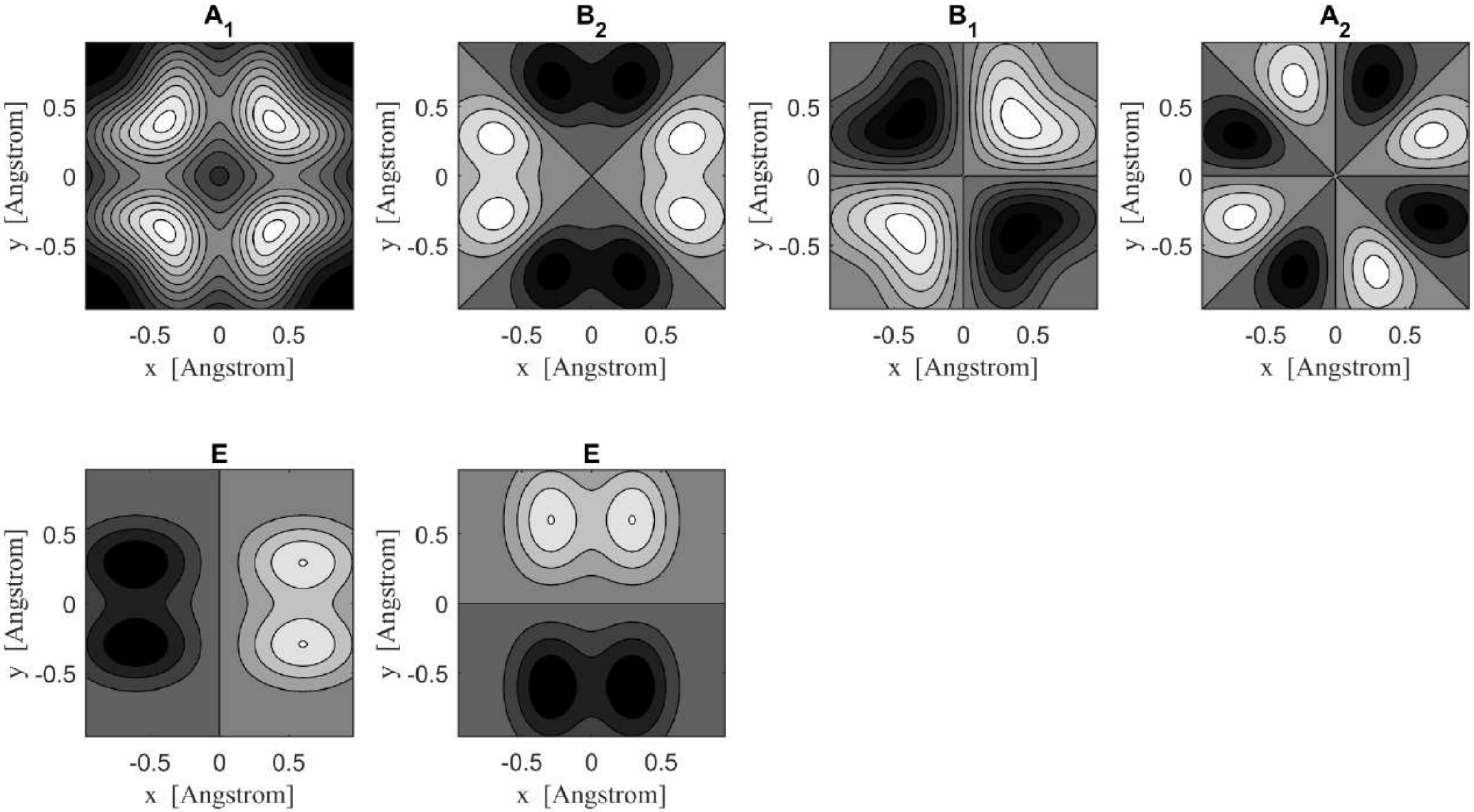
Однако, в действительности уровни могут взаимодействовать друг с другом за счет туннельных переходов между динамически изолированными в классическом пределе состояниями. Влияние таких переходов учитывается в работе [*Podolskiy V.A., Narimanov E.E. // Phys. Lett. A (2007)* ***362****, 412*]. Для использования распределения Подольского-Нариманова необходимо знать амплитуды таких туннельных переходов; их нахождению и посвящен настоящий доклад.

Механизм взаимодействия уровней энергии хорошо описан в *Фейнмановских лекциях по физике* (том 8, главы 6-8) на примере двухуровневой системы. Рассмотрим пару вырожденных состояний |1> и |2> с ясным квазиклассическим смыслом. Если амплитуда перехода между этими двумя состояниями <2|**H**|1> = *A* отлична от нуля, это приведет к снятию вырождения, так что стационарными состояниями с определенной энергией (*E*+*A* и *E*-*A*) будут линейные комбинации состояний |1> и |2> :

$$\left| I \right\rangle = \frac{\left|1\right\rangle - \left|2\right\rangle}{\sqrt{2}} \qquad \left| II \right\rangle = \frac{\left|1\right\rangle + \left|2\right\rangle}{\sqrt{2}}$$

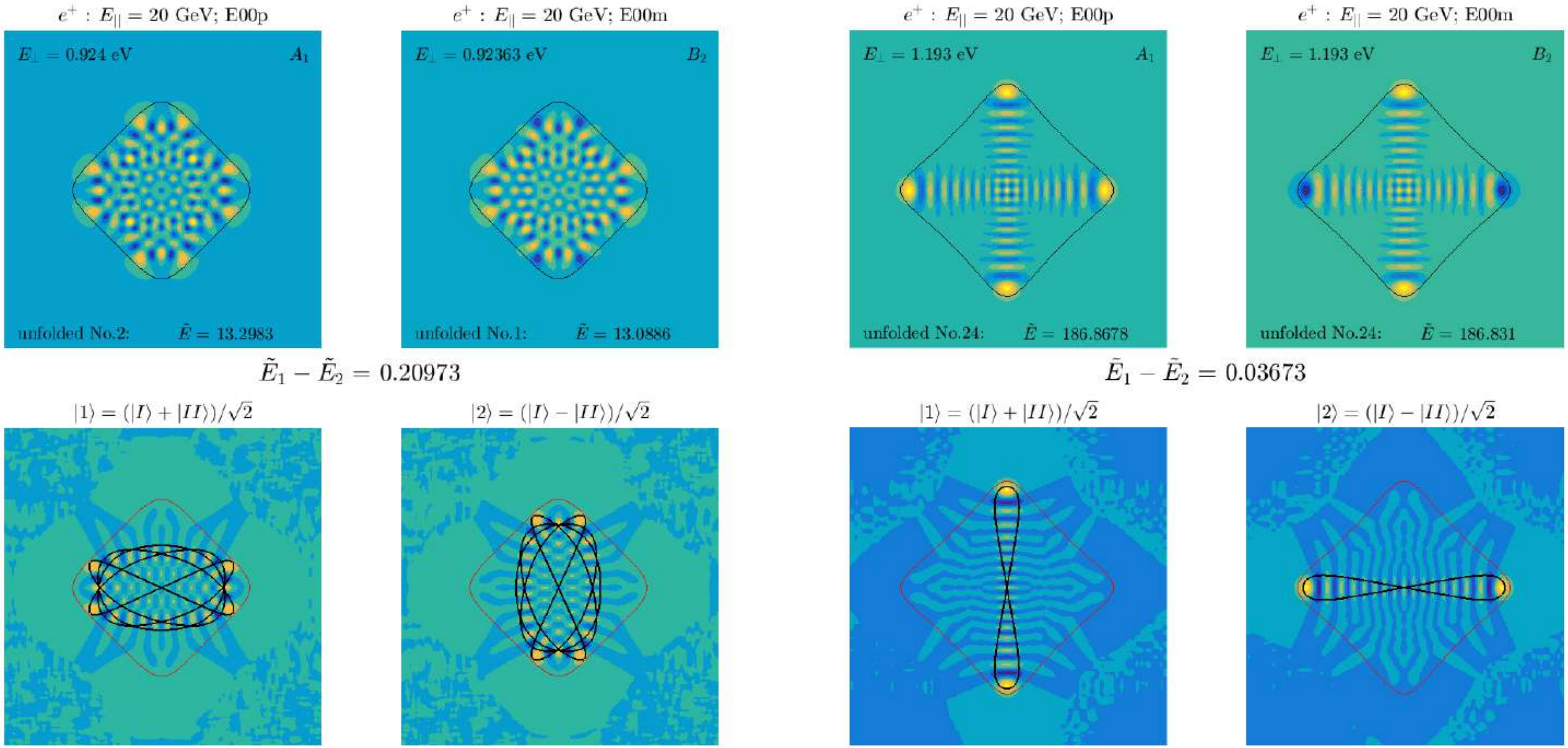
Здесь перед нами стоит обратная задача: исходя из найденного численно набора стационарных состояний, определить матричные элементы переходов между состояниями с наглядным квазиклассическим смыслом (каковыми являются состояния, отвечающие в классическом пределе движению в динамически изолированных друг от друга областях фазового пространства).

Нами найдены численно все уровни энергии поперечного движения позитронов с энергией 20 ГэВ и соответствующие им волновые функции. Отметим, что по типу симметрии волновой функции все состояния в потенциале с симметрией квадрата можно классифицировать по неприводимым представлениям группы D_4 (или изоморфной ей C_{4v}).



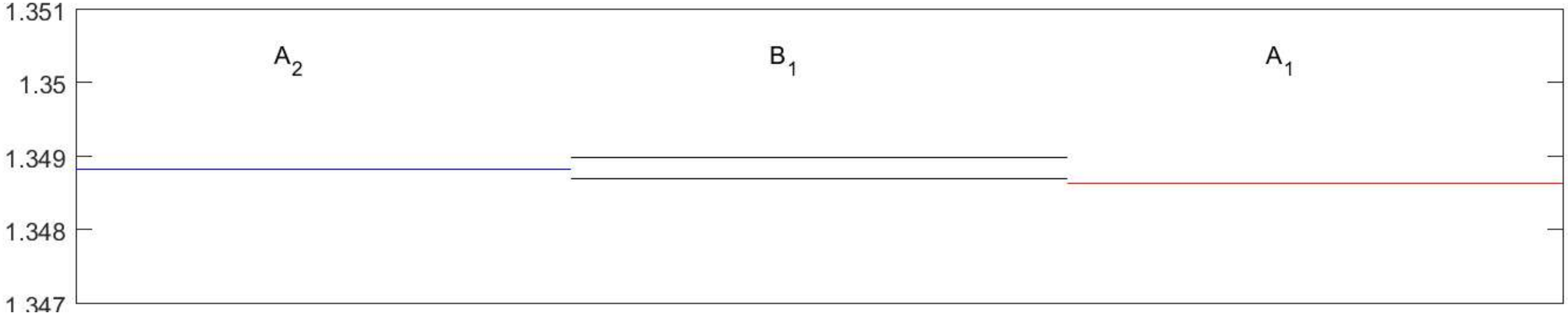
Первые четыре представления одномерны и соответствуют невырожденным уровням энергии. Именно эти четыре типа волновых функций мы и будем анализировать.

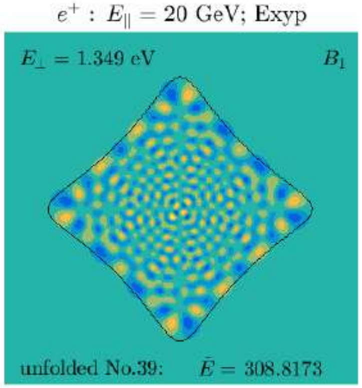
Среди найденных стационарных состояний есть множество пар (и не только пар) волновых функций, линейные комбинации которых обладают ясным квазиклассическим смыслом. Например:

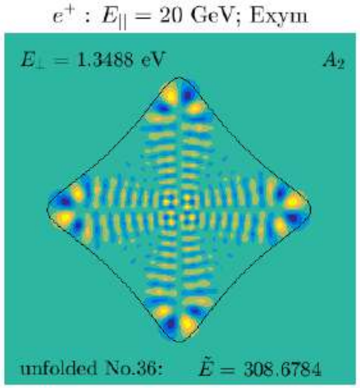


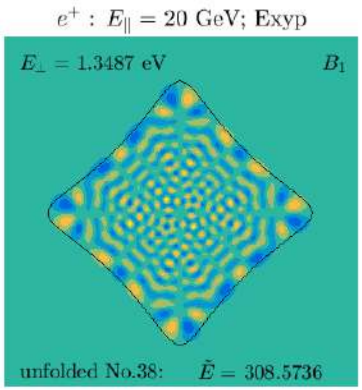
На суперпозиции в нижнем ряду наложены соответствующие классические орбиты. Такие состояния локализованы в динамически изолированных друг от друга областях фазового пространства.

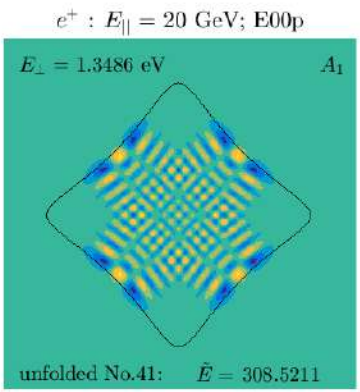
Есть и случаи взаимодействия четырех уровней, например:



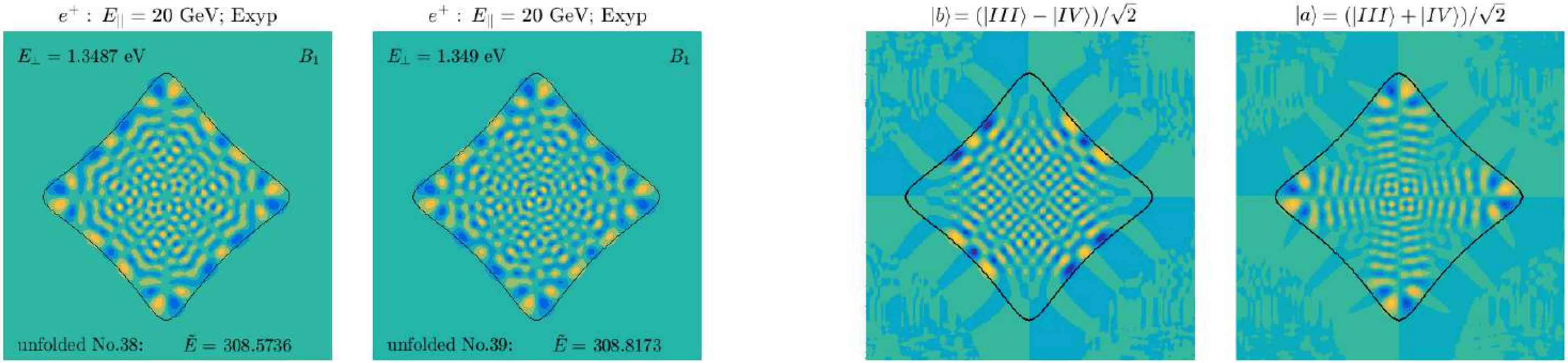


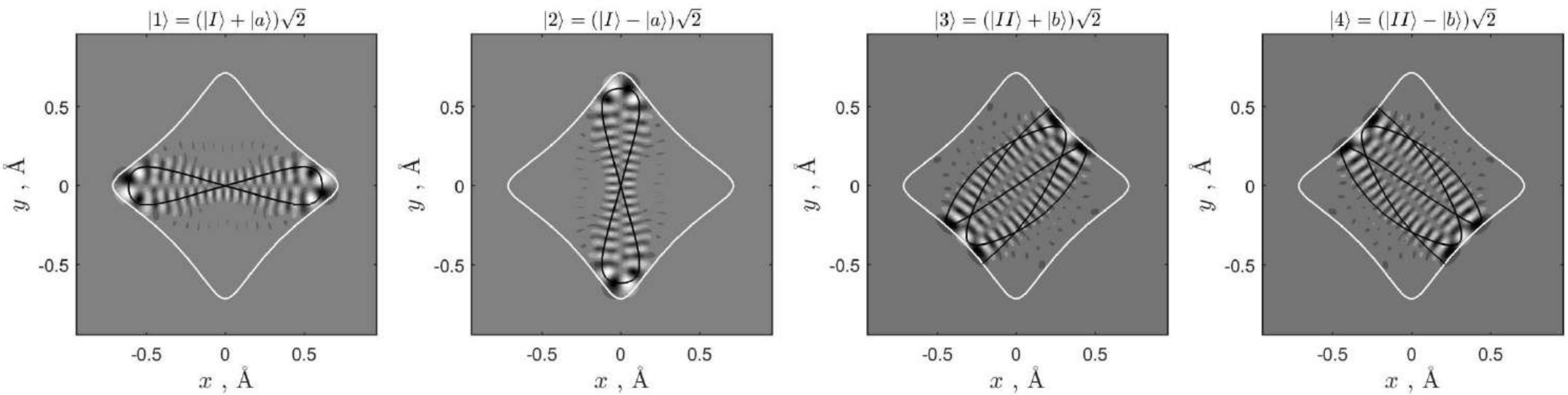




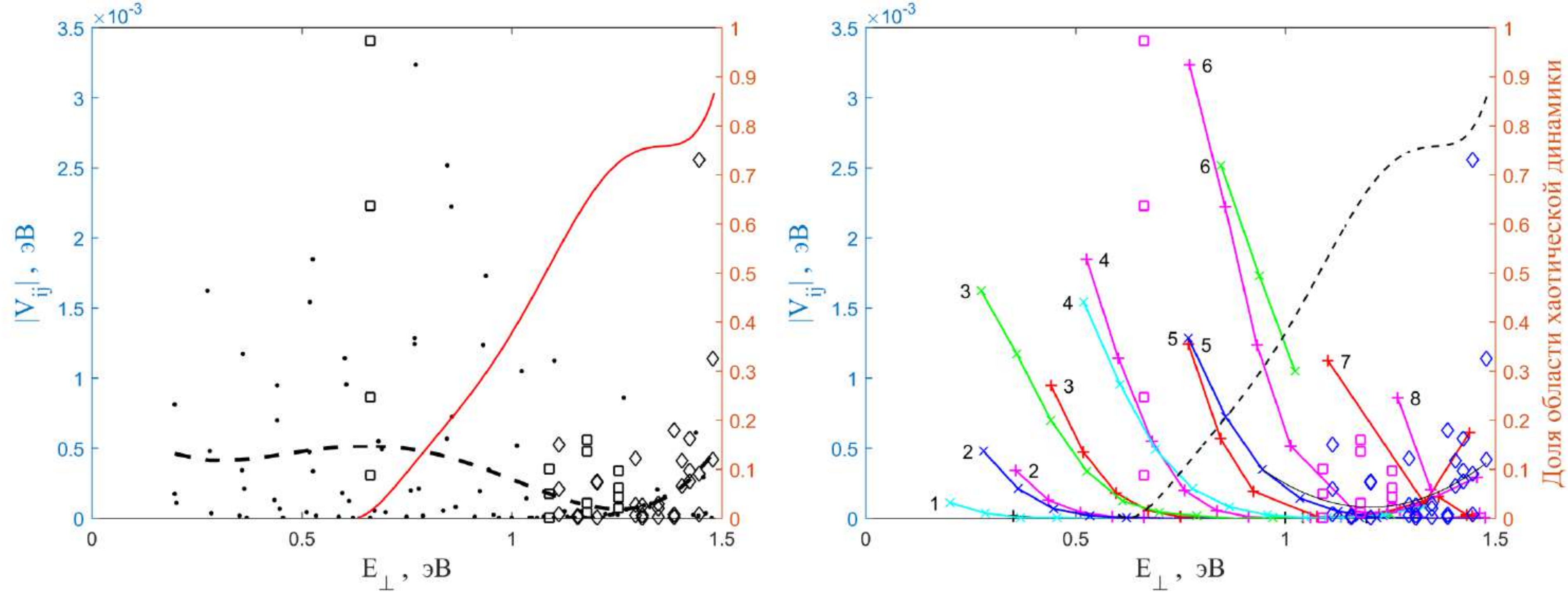


Из двух состояний типа B_1 можно составить суперпозиции, парные к двум оставшимся состояниям:



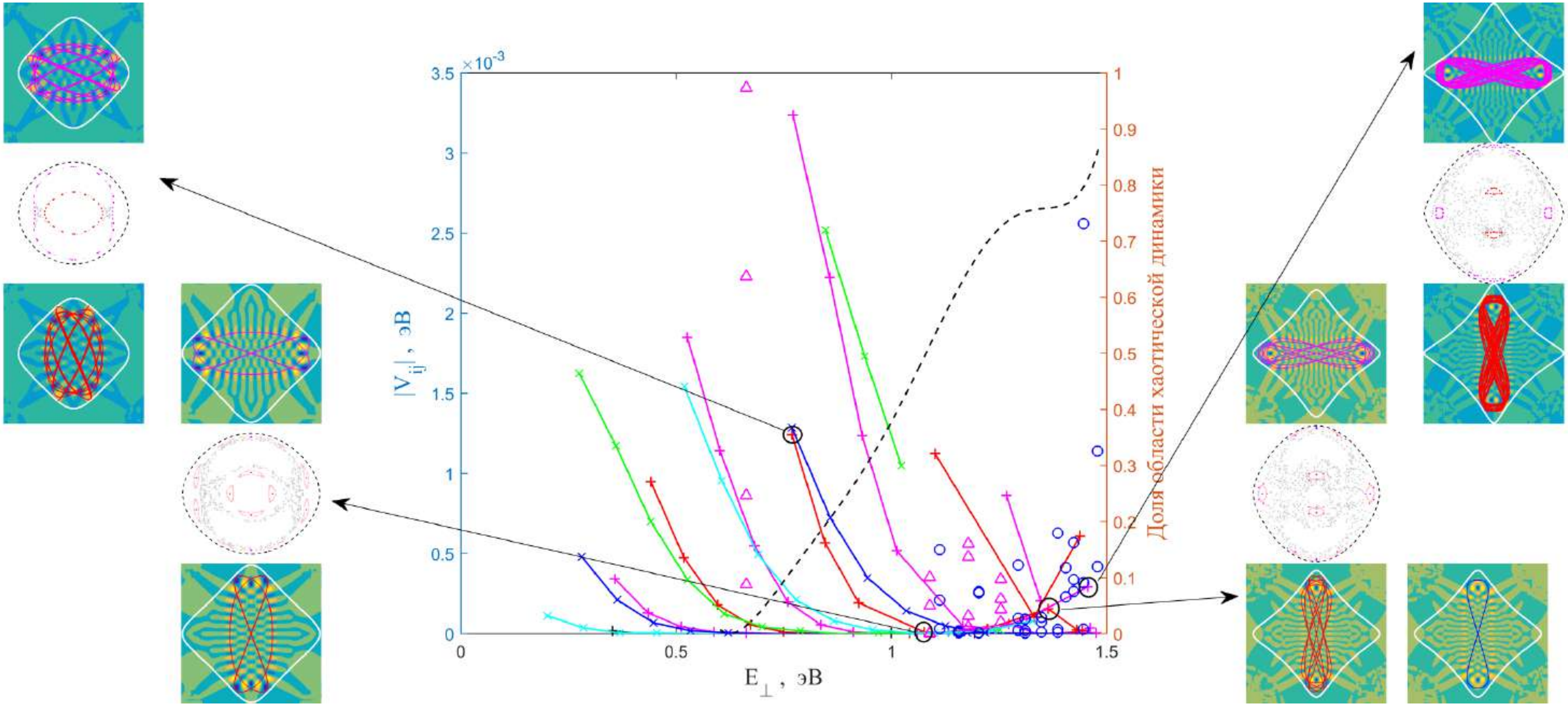


Абсолютные значения всех найденных недиагональных матричных элементов гамильтониана отмечены на рисунке точками (парные взаимодействия) и взаимодействия четырех квазиклассических состояний (ромбы и квадраты):

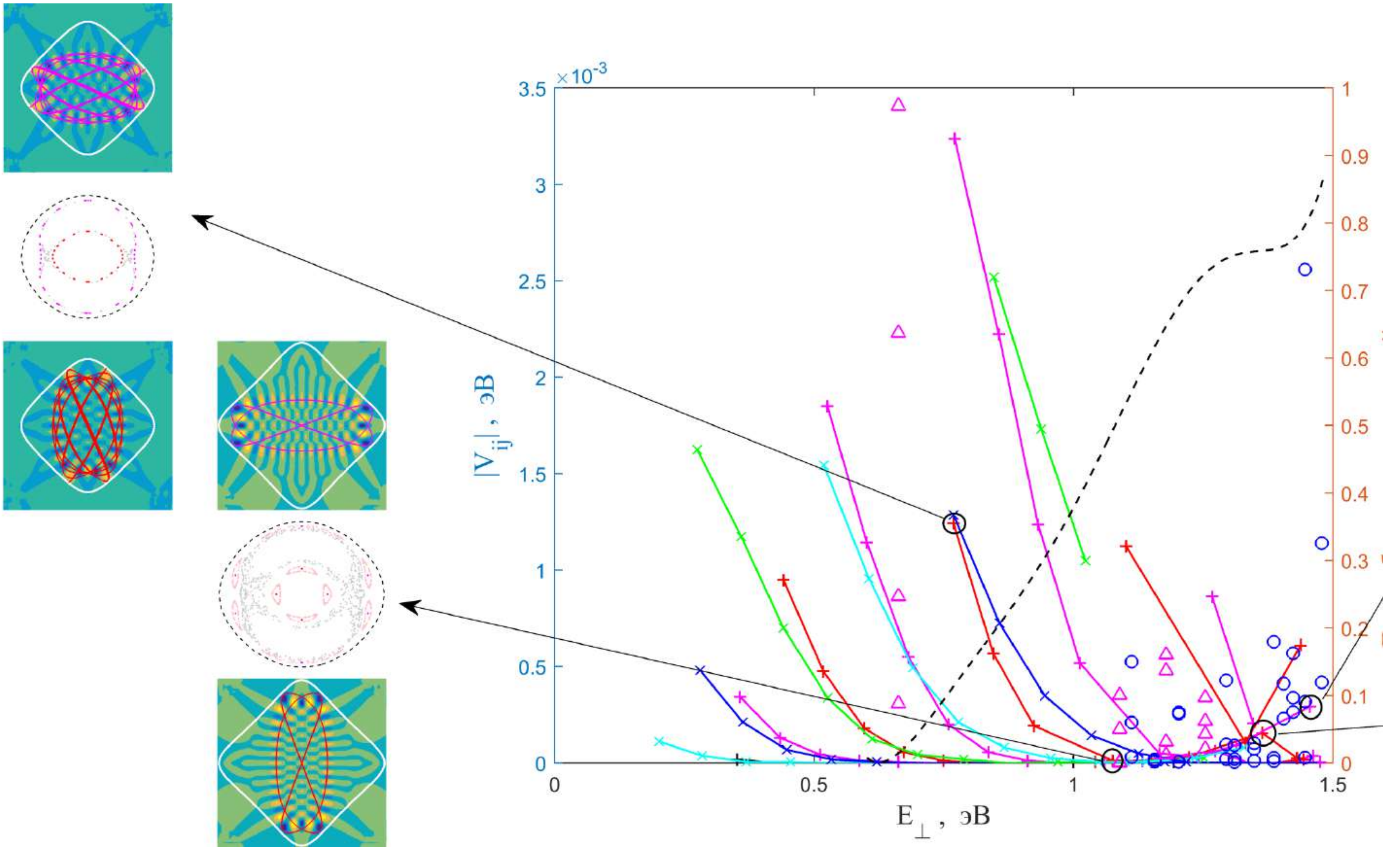


Закономерность в величине амплитуд перехода можно увидеть, если классифицировать состояния по числу полуволн, укладывающихся вдоль узкой стороны квазиклассической волновой функции, рассматривая при этом отдельно состояния, соответствующие классическим орбитам, соединяющим два противоположных угла потенциальной ямы (прямые крестики), и состояния, соответствующие орбитам, соединяющим противоположные стороны квадратной потенциальной ямы (косые крестики). Семейства состояний каждого типа объединены пунктирными линиями.

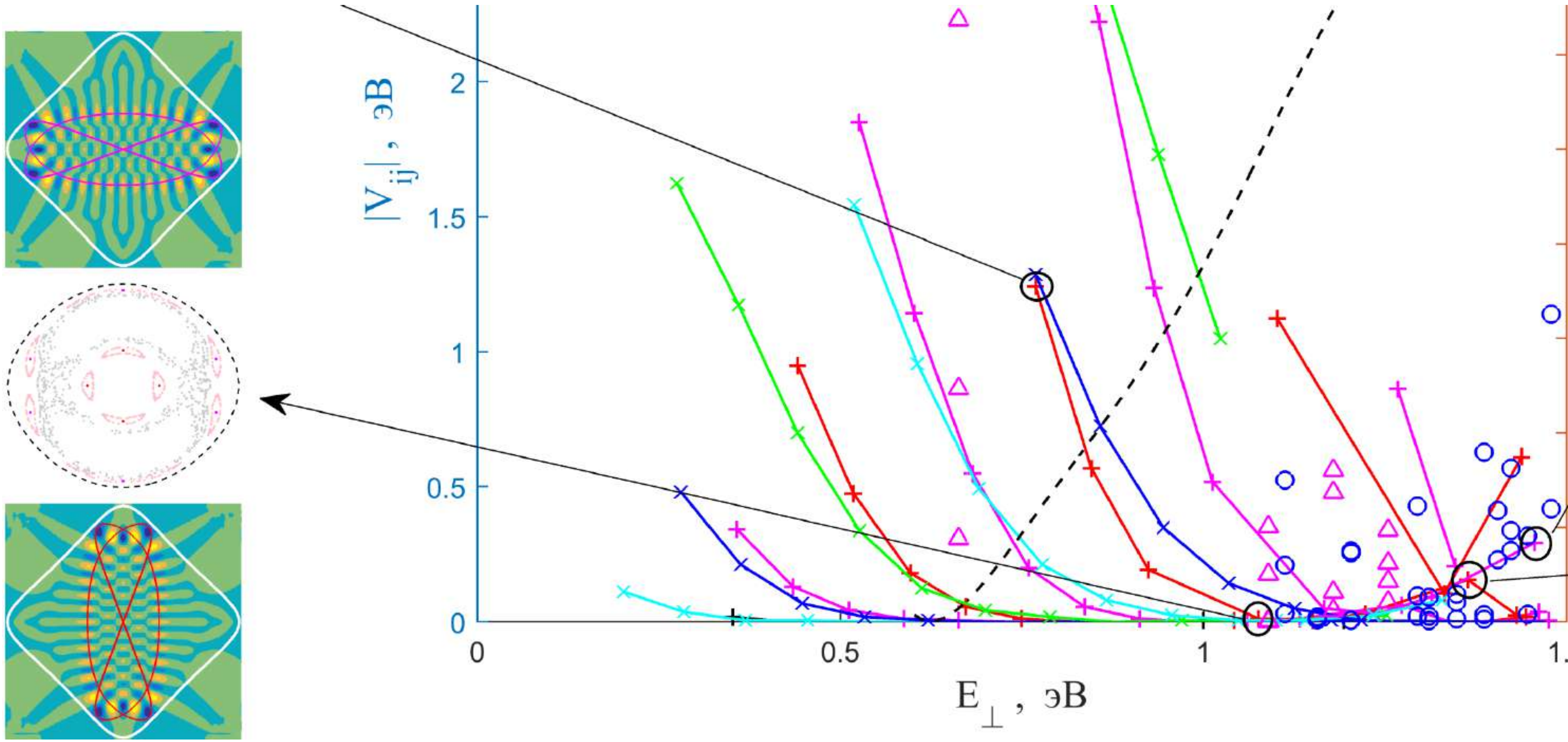
Для каждого из таких семейств величина расщепления в зависимости от энергии состояния сначала убывает, а затем снова возрастает. Почему?



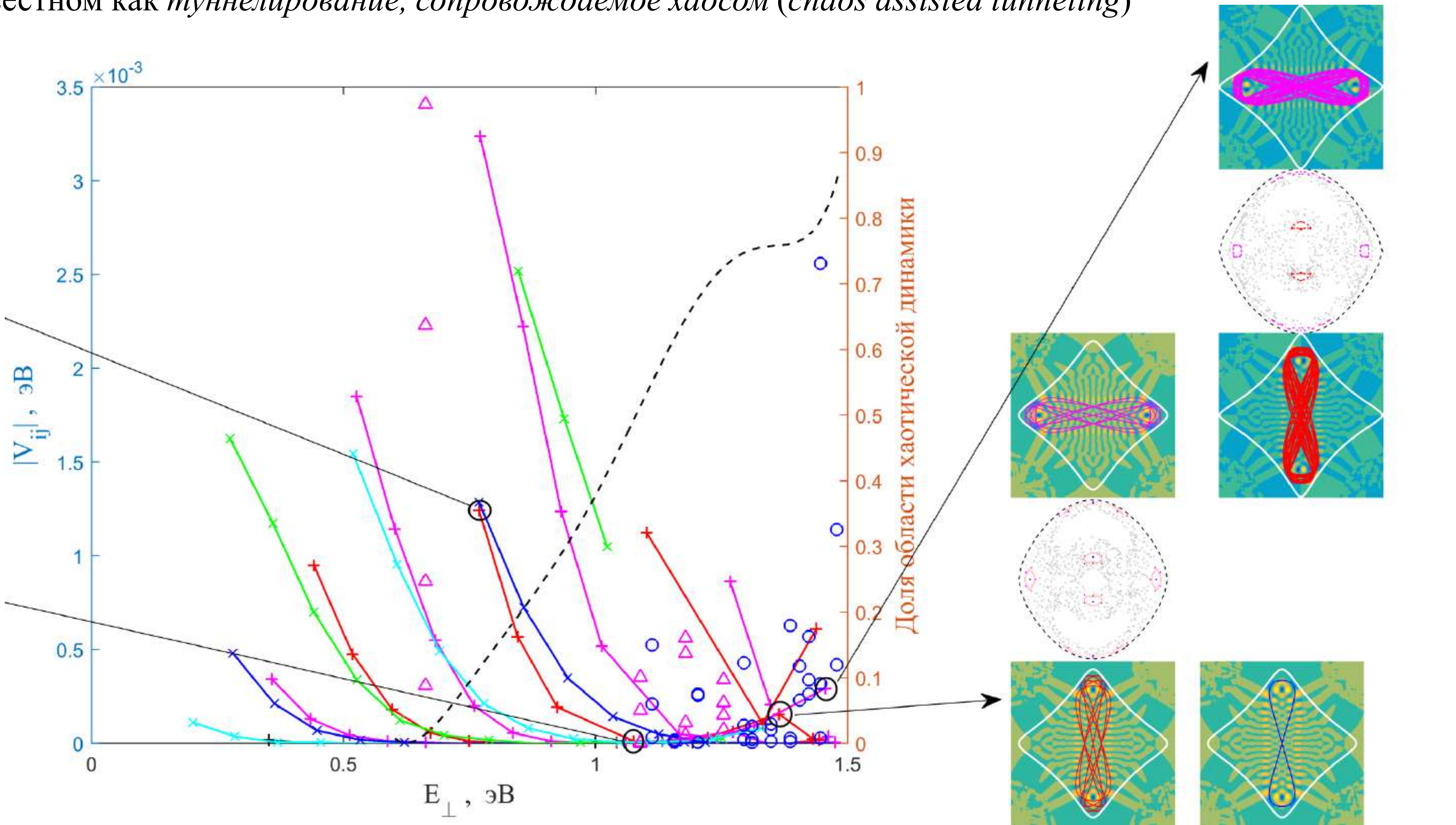
В глубине потенциальной ямы динамика частиц носит регулярный характер практически для всех начальных условий, так что границы различных динамически изолированных друг от друга областей регулярного движения соприкасаются друг с другом. Поэтому, если волновая функция состояния достигает краев такой области, вероятность туннельного проникновения в регулярную область, соответствующую состоянию-партнеру, будет достаточно велика, что приведет к значительной величине расщепления собственных энергий симметричной и антисимметричной комбинаций.



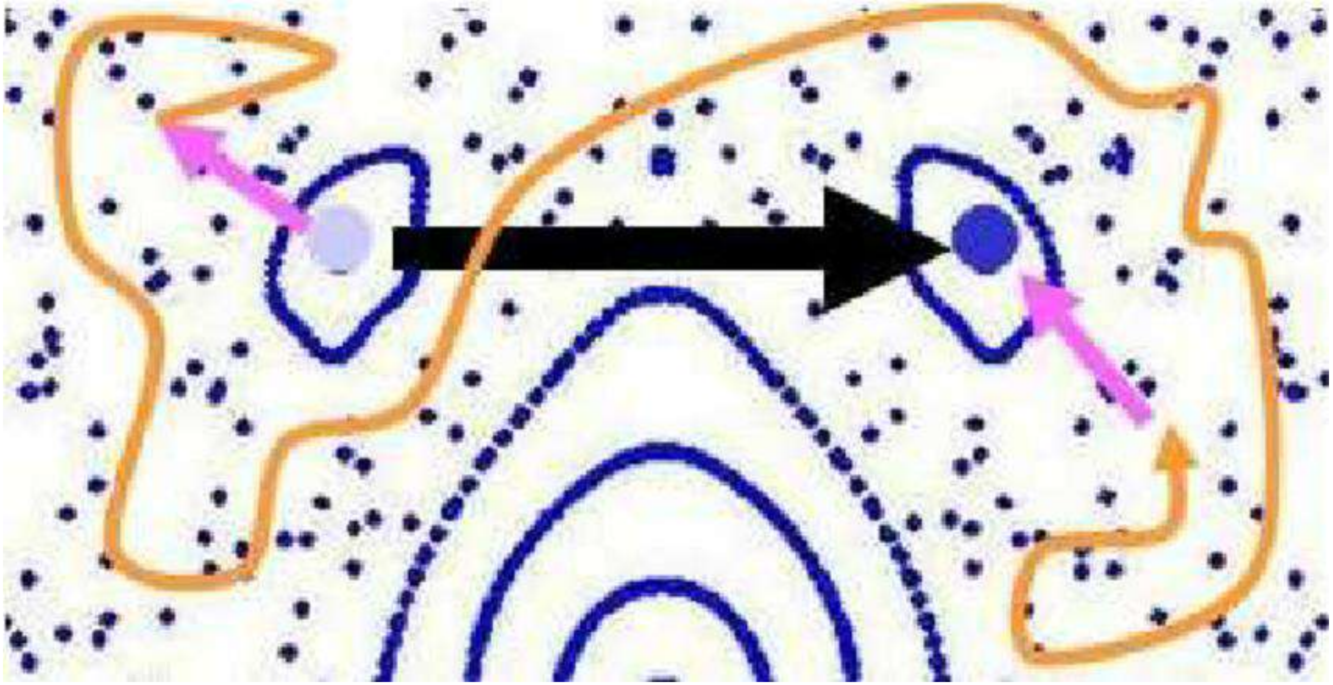
С увеличением энергии уменьшается характерное значение дебройлевской длины волны, поэтому состояние с малым числом полуволн в поперечном направлении будет локализовано в фазовом пространстве в области меньшего относительного объема, окруженной областями локализации других регулярных состояний. Поэтому вероятность туннелирования сквозь динамически недоступные области будет снижаться.



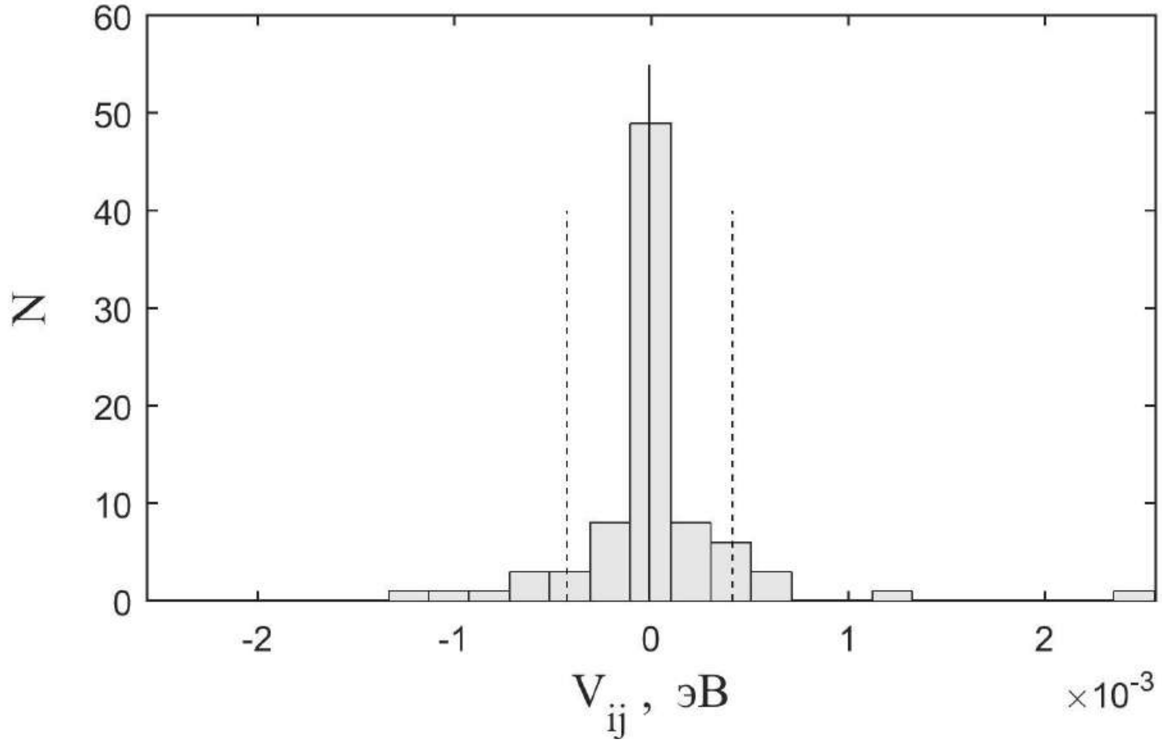
Однако, при дальнейшем увеличении энергии доля фазового объема, соответствующего регулярной динамике, будет сокращаться, так что вблизи верхнего края потенциальной ямы фазовое пространство содержит несколько динамически изолированных друг от друга областей, соответствующих разным типам регулярных орбит, разделенных областью хаотической динамики. Поэтому волновые функции выбранного типа могут снова оказаться существенно отличными от нуля вблизи границ областей регулярного движения. И хотя ширина динамически недоступной для движения частицы области будет велика, вероятность туннелирования сквозь нее начнет возрастать благодаря механизму, известном как *туннелирование, сопровождаемое хаосом* (*chaos assisted tunneling*)



Chaos-assisted tunneling (CAT): частице достаточно лишь проникнуть наружу из своей динамически разрешенной области, и она будет подхвачена хаотическим потоком, который рано или поздно доставит ее к границе области-партнера, где частица сможет успешно завершить процесс туннелирования. Этим и обусловлено увеличение расщепления уровней вблизи верха потенциальной ямы



Схематическое сравнение прямого туннелирования и туннелирования, сопровождаемого хаосом [*Tureci H., Schwefel H., Stone A.D., Narimanov, E.E. A Gaussian-optical Approach to Stable Periodic Orbit Resonances of Partially Chaotic Dielectric Micro-cavities // Optics express (2002)* ***10****, 752*]



Распределение найденных значений отличных от нуля недиагональных матричных элементов гамильтониана, описывающих переходы между различными состояниями, соответствующими динамически изолированным друг от друга классическим траекториям каналированного позитрона (для массива уровней с энергией поперечного движения E > 1 эВ, для которых доля области хаотической динамики в фазовом пространстве составляет значительную величину). Среднеквадратичное отклонение этих значений составляет 0.00042 эВ. Именно эта величина фигурирует в качестве параметра в распределении Подольского-Нариманова, описывающем статистику межуровневых расстояний квантовой системы, классический аналог которой содержит в своем фазовом пространстве несколько регулярных областей, разделенных областью хаотической динамики.

Summary:

- Найдены уровни энергии волновые функции поперечного движения позитронов с E = 20 ГэВ, каналированных в направлении [100] кристалла кремния.
- Среди этих стационарных состояний выделены группы, которые можно интерпретировать как результат взаимодействия квазиклассических состояний, соответствующих локализации частицы в динамически изолированных друг от друга областях фазового пространства. Найдены значения матричных элементов переходов между такими квазиклассическими состояниями.
- Фазовое пространство поперечного движения каналированных электронов содержит значительную область хаотической динамики, относительная доля которой возрастает к верхнему краю потенциальной ямы.
- Согласно концепции туннелирования, сопровождаемого хаосом (chaos assisted tunneling, CAT), наличие этой хаотической области способствует туннелированию частицы между динамически изолированными друг от друга областями регулярного движения, что приводит к усилению расщепления уровней энергии поперечного движения каналированных позитронов. Найденные матричные элементы переходов согласуются с этой интерпретацией.
- Полученные результаты (в частности, величина среднеквадратичного отклонения для массива матричных элементов туннельных переходов) могут быть использованы для статистического анализа межуровневых расстояний рассматриваемой квантовой системы в рамках теории квантового хаоса (распределение Подольского-Нариманова [V.A. Podolskiy, E.E. Narimanov // Phys. Lett. A 362 (2007) 412-416], учитывающее влияние туннелирования, сопровождаемого хаосом).

Спасибо за внимание!