МОДЕЛИРОВАНИЕ КВАНТОВЫХ СОСТОЯНИЙ ПОЛОЖИТЕЛЬНО ЗАРЯЖЕНЫХ ЧАСТИЦ ПРИ КАНАЛИРОВАНИИ В НАПРАВЛЕНИИ [111] В КРИСТАЛЛЕ КРЕМНИЯ

В.В. Сыщенко1,\*), А.И. Тарновский1), А.С. Парахин1),

А.Ю. Исупов2),

1) НИУ «БелГУ», Белгород, Россия;

 2) ЛФВЭ, ОИЯИ, Дубна, Россия;

\*) e-mail: syshch@bsu.edu.ru

Потенциальная ямка, образуемая непрерывными потенциалами трех соседних цепочек [111] кристалла кремния, обладает симметрией треугольника, описываемой группой *C*3v /1/. В этом случае разработанная ранее /2, 3/ процедура поиска собственных значений энергии поперечного движения каналированных положительно заряженных частиц (позитронов или протонов) и соответствующих этим значениям собственных функций гамильтониана, реализованная на квадратной пространственной сетке, приводит к возникновению артефактов численного моделирования. В докладе представлен алгоритм моделирования на основе гексагональной сетки, учитывающий симметрию задачи. Дано сравнение результатов обоих подходов. Разработанная процедура может быть использована в исследованиях проявлений квантового хаоса в каналировании /4, 5/.

ЛИТЕРАТУРА

1. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Квантовая механика (нерелятивистская теория), М., Наука, 1989, 768 с.
2. Шульга Н.Ф., Сыщенко В.В., Нерябова В.С. // Поверхность. 2013. № 3. С. 91.
3. Shul’ga N.F., Syshchenko V.V., Tarnovsky A.I., Isupov A.Yu. // Nuclear Instrum. Methods B. 2016. V. 370. P. 1.
4. Сыщенко В.В., Тарновский А.И. // Поверхность. 2021. № 7. С. 84.
5. Сыщенко В.В., Тарновский А.И., Дроник В.И., Исупов А.Ю. // Поверхность. 2022. № 3. С. 79.