

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

В. В. Сыщенко<sup>1,\*</sup>, А. И. Тарновский<sup>1</sup>, А. С. Парахин<sup>1</sup>, А. Ю. Исупов<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Белгородский государственный национальный исследовательский университет, 308015 Белгород, Россия

<sup>2</sup>Лаборатория физики высоких энергий ОИЯИ, 141980 Дубна, Россия

\*E-mail: syshch@yandex.ru

В серии предшествующих статей [1-9] исследовались различные проявления квантового хаоса в каналировании быстрых частиц в кристаллах. Исходными данными для такого исследования являются спектр собственных значений гамильтониана (уровни энергии поперечного движения частиц, движущихся в режиме аксиального каналирования) и соответствующие этим стационарным состояниям двумерные волновые функции. Поиск тех и других осуществлялся численно с помощью так называемого спектрального метода [10]. При этом ранее исследовалось каналирование электронов в направлении [110], а также каналирование электронов и позитронов в направлении [100] кристалла кремния. В первом случае потенциальная яма, в которой происходит финитное поперечное движение каналированных частиц, обладает симметрией  $C_{2v}$  (симметрия прямоугольника), а во втором – симметрией  $C_{4v}$  (симметрия квадрата). В обоих случаях задание функций координат в процедуре моделирования выполняется на квадратной дискретной сетке.

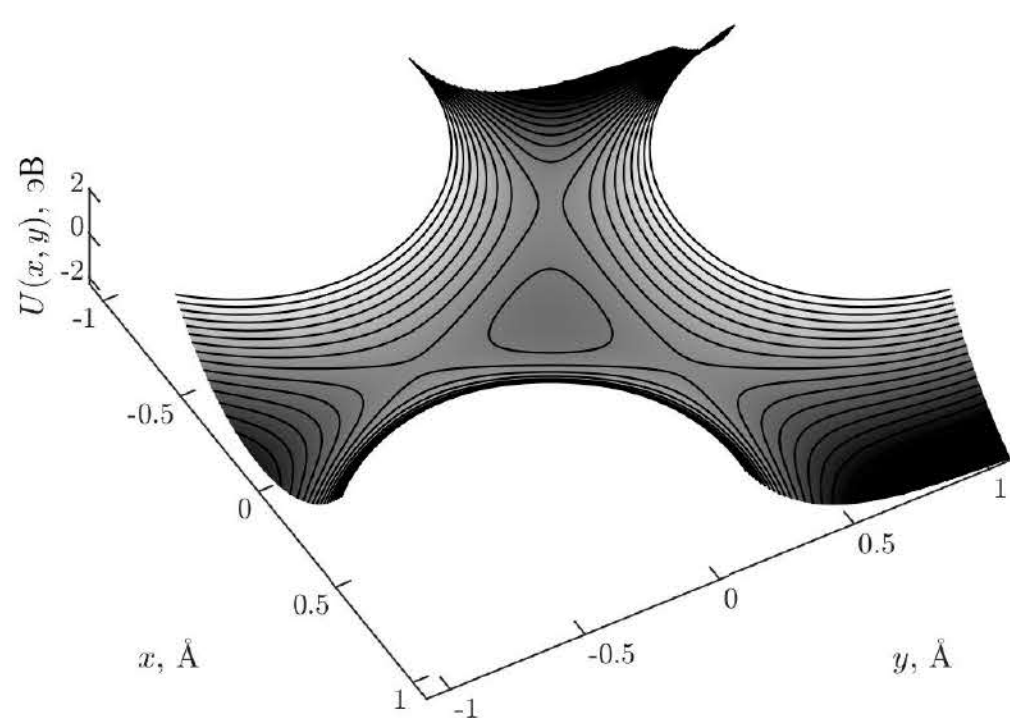


Рис. 1. Потенциальная энергия позитрона, движущегося вблизи направления [111] кристалла кремния.

В настоящем докладе рассмотрено каналирование позитронов в направлении [111]. Небольшая потенциальная яма (рис. 1), возникающая между тремя соседними цепочками [111], обладает симметрией  $C_{3v}$  (симметрией равностороннего треугольника). Оказывается, что ранее разработанная процедура, использующая квадратную пространственную сетку, приводит к возникновению артефактов численного моделирования. В докладе представлен алгоритм моделирования на основе **гексагональной сетки**, учитывающий симметрию задачи (рис. 2, слева). Дано сравнение результатов обоих подходов.

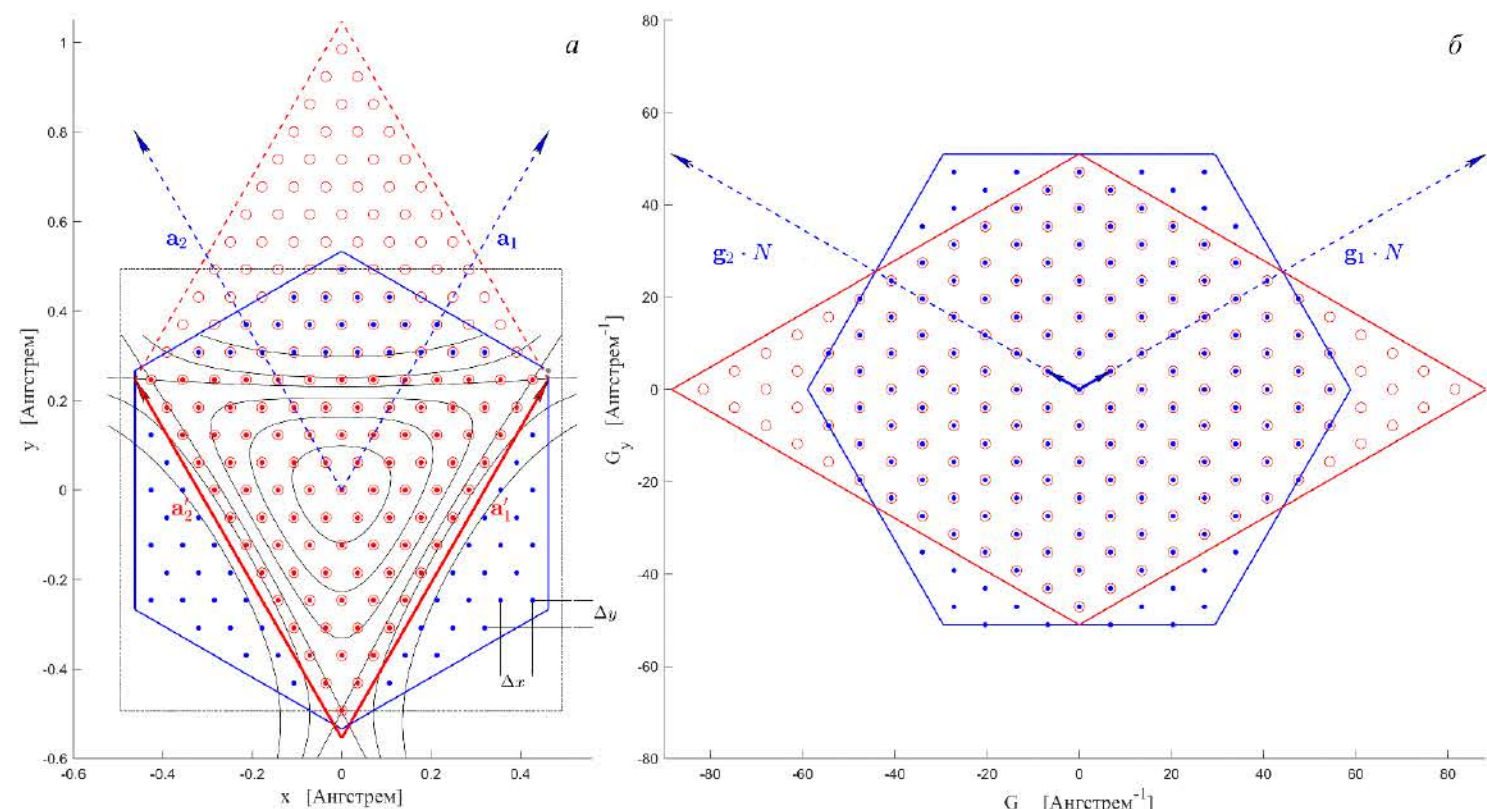


Рис. 2. (а) Схематическое изображение гексагональной сетки для численного моделирования в конфигурационном пространстве (для построения рисунка выбрано значение  $N = 13$ ). (б) То же в обратном пространстве.

Для представления функции в виде ряда Фурье используем хорошо известное в физике твердого тела понятие обратной решетки:

$$\Psi(\mathbf{r}) = \sum_m \Psi_m \exp(i\mathbf{G}_m \cdot \mathbf{r}) = \sum_{m_1=-\infty}^{\infty} \sum_{m_2=-\infty}^{\infty} \Psi_{m_1, m_2} \exp(i(m_1 \mathbf{g}_1 + m_2 \mathbf{g}_2) \cdot \mathbf{r}), \quad (1)$$

где основные векторы обратной решетки  $\mathbf{g}_1, \mathbf{g}_2$  строятся на основе основных векторов трансляции прямой решетки  $\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, \mathbf{a}_3$ , причем в случае двумерной решетки в качестве вектора  $\mathbf{a}_3$  выбирается единичный вектор, перпендикулярный плоскости, содержащей  $\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2$ :

$$\mathbf{g}_1 = 2\pi \frac{\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3}{\mathbf{a}_1 \cdot (\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3)}, \quad \mathbf{g}_2 = 2\pi \frac{\mathbf{a}_3 \times \mathbf{a}_1}{\mathbf{a}_1 \cdot (\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3)}. \quad (2)$$

Как известно, представление функции в виде ряда Фурье возможно либо для периодической функции, либо для функции, заданной на ограниченной области пространства. В нашем случае эта область в виде правильного шестиугольника играет роль ячейки Вигнера-Зейтца в прямом пространстве, а векторы  $\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2$  будут для нее основными векторами трансляции.

Задание функции на дискретной сетке в пределах такой ячейки приводит, в соответствии с теоремой Найквиста-Котельникова-Шеннона, к ограничению спектра функции в обратном пространстве, то есть к ограничению на суммирование в (7) пределах

$$-(N-1) \leq m_{1,2} \leq N-1, \quad (3)$$

где  $N = |\mathbf{a}_{1,2}|/\Delta x$  – число строк гексагональной сетки в координатном пространстве, которое укладывается вдоль вектора  $\mathbf{a}_1$  или  $\mathbf{a}_2$ . Это число удобно выбрать нечетным, а саму сетку – таким образом, чтобы ее центральный узел совпадал с центром треугольной потенциальной ямки. Векторы обратной решетки в (1) задают гексагональную сетку в обратном пространстве, а условие (3) ограничивает в нем ячейку Браве в виде ромба (кружки на рис. 3). Параллельные переносы отдельных узлов этой сетки на векторы  $\pm N\mathbf{g}_{1,2}$  не нарушают справедливости разложения (1) и позволяют построить вместо ячейки Браве ячейку Вигнера-Зейтца в виде правильного шестиугольника (точки на рис. 3), в наибольшей степени соответствующую условиям задачи. В наших вычислениях использована гексагональная сетка в координатном пространстве с  $N = 115$  и с шагом  $\Delta x \approx 0.0075 \text{ \AA}$ . Для сравнения было выполнено также моделирование на квадратной сетке с  $N = 128$  и с шагом  $\Delta x \approx 0.0077 \text{ \AA}$ .

Преобразование Фурье корреляционной функции выявляет энергии только тех стационарных состояний, которые оставляют в суперпозиции начальный волновой пакет  $\Psi(x, y, 0)$ . Если мы выберем в качестве последнего несимметричную гауссиану

$$\Psi(x, y, 0) = \psi_0(x, y) = \frac{1}{\pi\sigma_x\sigma_y} \exp\left(-\frac{(x-x_0)^2}{2\sigma_x^2} - \frac{(y-y_0)^2}{2\sigma_y^2}\right), \quad (10)$$

в ней будут содержаться все стационарные состояния в нашей ямке. Однако, для исследования спектра гамильтониана его собственные состояния необходимо классифицировать в соответствии со свойствами симметрии потенциала.

Состояния поперечного движения классифицируются по неприводимым представлениям группы  $C_{3v}$  в зависимости от типа симметрии волновой функции. Элементы группы включают в себя тождественное преобразование  $I$ , повороты на углы  $2\pi/3$  и  $4\pi/3$ , обозначаемые  $R$  и  $R^2$ , отражение в «вертикальной» плоскости  $P$  и комбинации  $PR$  и  $PR^2$ . Эта группа имеет два одномерных неприводимых представления, обозначаемых  $A_1$  и  $A_2$ , соответствующих невырожденным уровням энергии, и одно двумерное, обозначаемое  $E$ , соответствующее двукратно вырожденным уровням.

Для поиска уровней энергии, соответствующих данным типам симметрии, необходимо использовать в качестве затравочных функций алгоритма функции, преобразующиеся по этим представлениям (рис. 3).

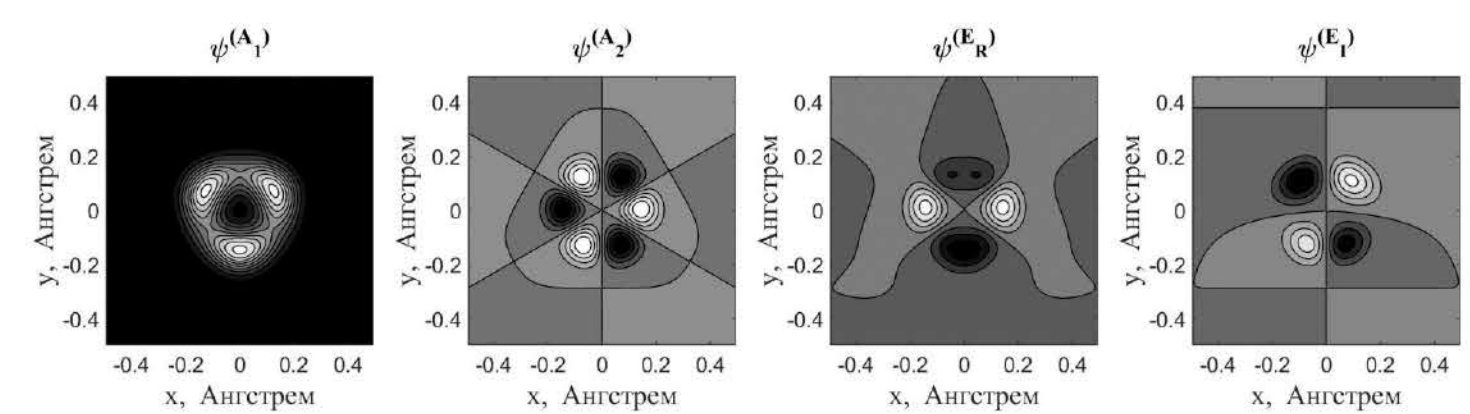


Рис. 3. Графики начальных функций.

В таблице представлены результаты численного нахождения уровней энергии поперечного движения для различных значений  $E_{||}$ . Оказывается, что исследованных значений энергии продольного движения недостаточно для появления в яме хотя бы одного связанного состояния, обладающего симметрией типа  $A_2$ .

Из таблицы видно, что моделирование на квадратной сетке, наряду с выявлением истинных собственных значений энергии позитрона в ямке, порождает артефакты двух видов. Прежде всего, алгоритм, использующий начальные функции, относящиеся к одному из двух типов симметрии,  $A_1$  либо  $E_R$ , возвращает в результате моделирования некоторое количество ложных уровней, совпадающих с истинными уровнями, относящимися ко второму из этих двух типов (в чем можно убедиться, построив соответствующую такому значению энергии собственную функцию гамильтониана); все такие ложные собственные значения отмечены в таблице скобками. Их появление обусловлено тем обстоятельством, что заданная на квадратной сетке функция не будет обладать ненарушенной симметрией  $A_1$  либо  $E_R$ , а будет представлять собой суперпозицию функций обоих этих типов.

Таблица 1.

Уровни энергии поперечного движения (в электрон-вольтах) в потенциальной яме (1), найденные численно с дискретным заданием функций на квадратной и гексагональной сетках; в скобках – нефизические артефакты, подчеркнутые значения – нефизическое расщепление вырожденных уровней.

Квадратная сетка			Гексагональная сетка		
$A_1$	$E_R$	$E_I$	$A_1$	$E_R$	$E_I$
$E_{  } = 2 \text{ ГэВ}$					
0.13020			0.13022		
(0.25466)	0.25467	0.25467		0.25507	0.25507
$E_{  } = 2.5 \text{ ГэВ}$					
0.11648			0.11649		
(0.22822)	0.22846	0.22845		0.22858	0.22858
0.32355	(0.32355)		0.32594		
$E_{  } = 3 \text{ ГэВ}$					
0.10635			0.10636		
(0.20865)	0.20900	0.20899		0.20904	0.20904
0.29783	(0.29792)		0.29879		
(0.31292)	0.31297	0.31295		0.31360	0.31360
$E_{  } = 3.5 \text{ ГэВ}$					
0.09848			0.09848		
	0.19381	0.19380		0.19382	0.19382
0.27743	(0.27768)		0.27783		
(0.29021)	0.29045	0.29043		0.29071	0.29071
$E_{  } = 4 \text{ ГэВ}$					
0.09213			0.09213		
	0.18152	0.18152		0.18153	0.18153
0.26075			0.26093		
(0.27199)	0.27218	0.27217		0.27229	0.27229

Артефактом другого рода является наблюдаемое вблизи верхнего края ямы нефизическое расщепление двукратно вырожденного уровня типа  $E$ . Оно связано с тем, что заданный на квадратной области потенциал, фактически, не обладает  $C_{3v}$ -симметрией, и нарушение этой симметрии за пределами треугольной ямки проявляется для наиболее высоколежащих состояний; в таблице все такие расщепившиеся собственные значения подчеркнуты. Этой же причиной обусловлено и увеличивающееся от дна к вершине потенциальной ямы различие в абсолютных значениях уровней энергии, найденных на квадратной и гексагональной сетках.

Моделирование на гексагональной сетке лишено обоих описанных недостатков.

- Шульга Н.Ф., Сыщенко В.В., Нерябова В.С. // Поверхность. Рентген-, синхротр. и нейтрон. исслед. 2013. № 3. С. 91.
- Shul'ga N.F., Syshchenko V.V., Neryabova V.S. // Nucl. Instrum. Methods B. 2013. V. 309. P. 153.
- Шульга Н.Ф., Сыщенко В.В., Тарновский А.И., Исупов А.Ю. // Поверхность. Рентген-, синхротр. и нейтрон. исслед. 2015. № 7. С. 72.
- Shul'ga N.F., Syshchenko V.V., Tarnovsky A.I., Isupov A.Yu. // Nuclear Instrum. Methods B. 2016. V. 370. P. 1.
- Shul'ga N.F., Syshchenko V.V., Tarnovsky A.I., Isupov A.Yu. // Journal of Physics: Conference Series. 2016. V. 732. P. 012028.
- Сыщенко В.В., Тарновский А.И. // Поверхность. Рентген-, синхротр. и нейтрон. исслед. 2021. № 7. С. 84.
- Сыщенко В.В., Тарновский А.И., Исупов А.Ю., Соловьев И.И. // Поверхность. Рентген-, синхротр. и нейтрон. исслед. 2020. № 3. С. 103.
- Shul'ga N.F., Syshchenko V.V., Tarnovsky A.I., Dronik V.I., Isupov A.Yu. // Journal of Instrumentation. 2019. V. 14. P. C12022.
- Сыщенко В.В., Тарновский А.И., Дроник В.И., Исупов А.Ю. // Поверхность. Рентген-, синхротр. и нейтрон. исслед. 2022. № 3. С. 79.
- Feit M.D., Fleck J.A., Jr., Steiger A. // Journal of Computational Physics. 1982. V. 47. P. 412.