

270 МГУ
1755 2025

53-я Международная Тулиновская конференция по Физике Взаимодействия
Заряженных Частиц с Кристаллами

Москва, МГУ им М.В. Ломоносова, 28-30 мая 2024

НОВЫЙ МЕХАНИЗМ НАГРЕВА (ОХЛАЖДЕНИЯ) КАНАЛИРОВАННЫХ ИОНОВ УГЛЕРОДА И КРЕМНИЯ

A NEW MECHANISM FOR HEATING (COOLING) CHANNELED CARBON AND SILICON IONS

старое название: Компьютерное моделирование
каналирования атома и иона углерода в (100) плоскостном канале кристалла алмаза



Филiaal MAI

Стрела

¹Кощеев Владимир Петрович

²Штанов Юрий Николаевич



¹) E-mail: koshcheev1@yandex.ru тел.: +7985-476-16-19

²) E-mail: yuran1987@mail.ru тел.: +7922-417-40-22

Введение

- Модель нагрева (охлаждения) [1] объясняет эффект уменьшения (увеличения) максимального значения потенциальной энергии захватом (потерей) электронов каналированным ионом.
- Известно [2], что уменьшение (увеличение) максимального значения потенциальной энергии каналированных ионов сопровождается увеличением (уменьшением) доли деканалированных частиц.
- С другой стороны, эффект когерентного возбуждения каналированных ионов (эффект Огорокова [3]) свидетельствует о том, что зарядовое состояние каналированных ионов является стабильным.
- Таким образом, следует рассмотреть новый механизм нагрева (охлаждения) каналированных ионов.

1. Assmann W. et al. Transverse cooling or heating of channeled ions by electron capture and loss //Physical review letters. – 1999. – Т. 83. – №. 9. – С. 1759.

<https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.83.1759>

2. Линдхард Й. Влияние кристаллической решетки на движение быстрых заряженных частиц //Успехи физических наук. – 1969. – Т. 99. – №. 10. – С. 249-296.

DOI: 10.3367/UFNr.0099.196910c.0249

3. Огороков В. В. Использование когерентного возбуждения релятивистских ядер в кристалле в фундаментальных исследованиях по СТО и ОТО //Успехи физических наук. – 2003. – Т. 173. – №. 4. – С. 447-452. DOI: 10.3367/UFNr.0173.200304g.0447

Теория

Известно [4], что потенциальная энергия иона в плоскостном канале кристалла может быть построен с помощью разложения в тригонометрический ряд Фурье атомного формфактора

$$U(x) = d^{-3} \sum_{n_x} \sum_{j=1}^8 V(g_x) \exp(-\sigma^2 g_x^2 / 2) \cos \left[2\pi n_x (x - x_j) / a_x \right], \quad (1)$$

где σ^2 — средний квадрат амплитуды тепловых колебаний атомов кристалла;

$g_x^2 = (2\pi n_x / a_x)^2$ — квадрат компоненты вектора обратной решетки; для плоскостного канала

(100) периодичность расположения атомов $a_x = d$; d - постоянная решетки.

Теория

$V(g_x)$ — компонента Фурье потенциальной энергии взаимодействия иона с атомом была построена в [5] в первом порядке теории возмущений

$$V(g_x) = \frac{4\pi Z_1 Z_2 e^2}{g_x^2} \left(1 - \frac{F_1(g_x)}{Z_1} \right) \left(1 - \frac{F_2(g_x)}{Z_2} \right), \quad (2)$$

где $F_1(g_x)$ атомный форм-фактор для каналированного иона (атома), $F_2(g_x)$ атомный форм-фактор для атома кристалла.

5. Koshcheev V. P., Shtanov Y. N. Computer Simulation of the Total Energy and the Screening Function of a Nitrogen Molecule in First-Order Perturbation Theory //Journal of Surface Investigation: X-ray, Synchrotron and Neutron Techniques. – 2024. – Т. 18. – №. 2. – С. 474-477. <https://doi.org/10.1134/S1027451024020332>

Теория

Тогда для случая $C^+@Si$ запишем в виде

$$F_1(g_x) = \int n_1(\mathbf{r}) \exp(-i\mathbf{g}_x \mathbf{r}) d^3r, \quad F_2(g_x) = \int n_2(\mathbf{r}) \exp(-i\mathbf{g}_x \mathbf{r}) d^3r, \quad (3)$$

где $n_1(\mathbf{r}) = 2|\psi_{1s}(\mathbf{r})|^2 + 2|\psi_{2s}(\mathbf{r})|^2 + 1|\psi_{2p}(\mathbf{r})|^2$ - электронная плотность для иона углерода, а

$n_2(\mathbf{r}) = 2|\psi_{1s}(\mathbf{r})|^2 + 2|\psi_{2s}(\mathbf{r})|^2 + 6|\psi_{2p}(\mathbf{r})|^2 + 2|\psi_{3s}(\mathbf{r})|^2 + 2|\psi_{3p}(\mathbf{r})|^2$ - электронная плотность

для атома кремния и постоянная решетки кристалла кремния $d = 5.4307 \text{ \AA}$ и

$$\sqrt{\sigma^2} = 0.0753 \text{ \AA}.$$

Теория

Для случая $\text{Si}^+@C$ запишем в виде

$$F_1(g_x) = \int n_1(\mathbf{r}) \exp(-i\mathbf{g}_x \mathbf{r}) d^3r, \quad F_2(g_x) = \int n_2(\mathbf{r}) \exp(-i\mathbf{g}_x \mathbf{r}) d^3r, \quad (4)$$

где $n_1(\mathbf{r}) = 2|\psi_{1s}(\mathbf{r})|^2 + 2|\psi_{2s}(\mathbf{r})|^2 + 6|\psi_{2p}(\mathbf{r})|^2 + 2|\psi_{3s}(\mathbf{r})|^2 + 1|\psi_{3p}(\mathbf{r})|^2$ – электронная

плотность для иона кремния, а $n_2(\mathbf{r}) = 2|\psi_{1s}(\mathbf{r})|^2 + 2|\psi_{2s}(\mathbf{r})|^2 + 2|\psi_{2p}(\mathbf{r})|^2$ – электронная

плотность для атома углерода и постоянная решетки кристалла алмаза $d = 3.56679 \text{ \AA}$ и

$$\sqrt{\sigma^2} = 0.0417 \text{ \AA}.$$

Волновые функции в формуле (3) и (4), которые аппроксимируют решения уравнения Хартри-Фока, представлены в [6].

6. Clementi E., Roetti C. // Atomic Data Nucl. Data Tables. 1974. V. 14. № 3. P. 177. [https://doi.org/10.1016/S0092-640X\(74\)80016-1](https://doi.org/10.1016/S0092-640X(74)80016-1)

Результаты расчетов

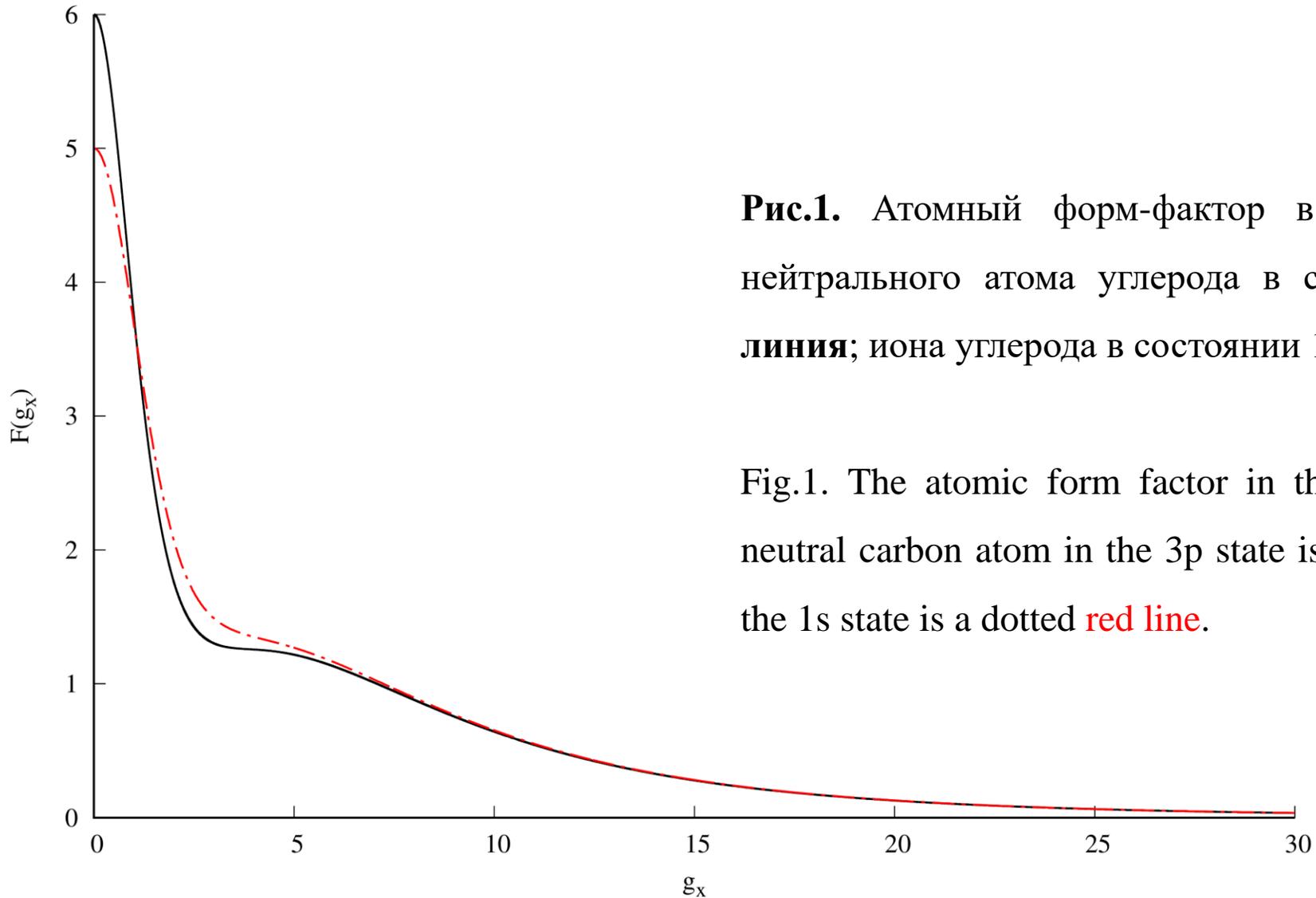


Рис.1. Атомный форм-фактор в приближении Хартри-Фока для нейтрального атома углерода в состоянии 3p – сплошная **черная линия**; иона углерода в состоянии 1s – пунктирная **красная линия**.

Fig.1. The atomic form factor in the Hartree-Fock approximation for a neutral carbon atom in the 3p state is a solid **black** line; the carbon ion in the 1s state is a dotted **red line**.

Результаты расчетов

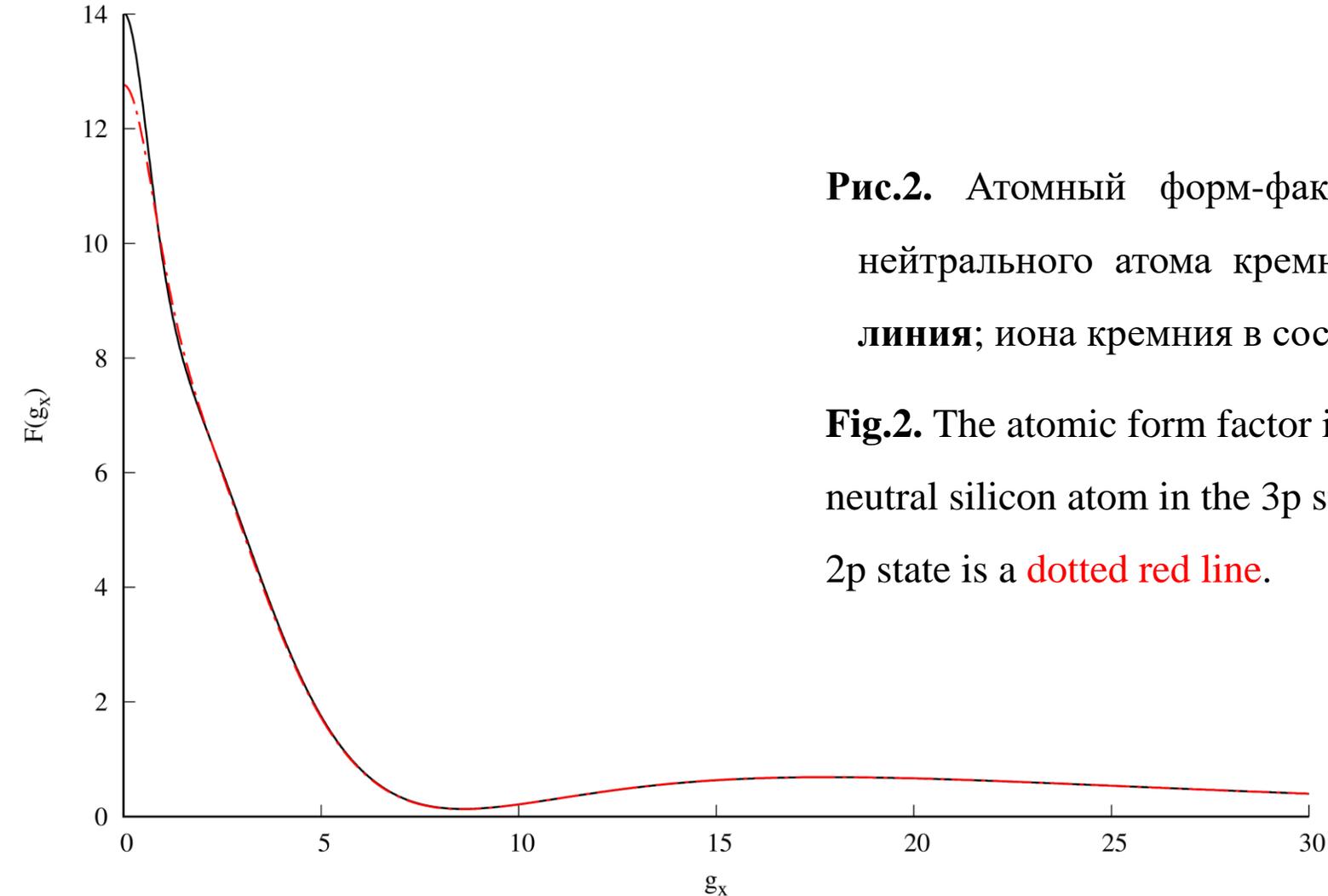


Рис.2. Атомный форм-фактор в приближении Хартри-Фока для нейтрального атома кремния в состоянии 3p – сплошная **черная линия**; иона кремния в состоянии 2p – пунктирная **красная линия**.

Fig.2. The atomic form factor in the Hartree-Fock approximation for a neutral silicon atom in the 3p state is a **solid black line**; a silicon ion in the 2p state is a **dotted red line**.

Результаты расчетов

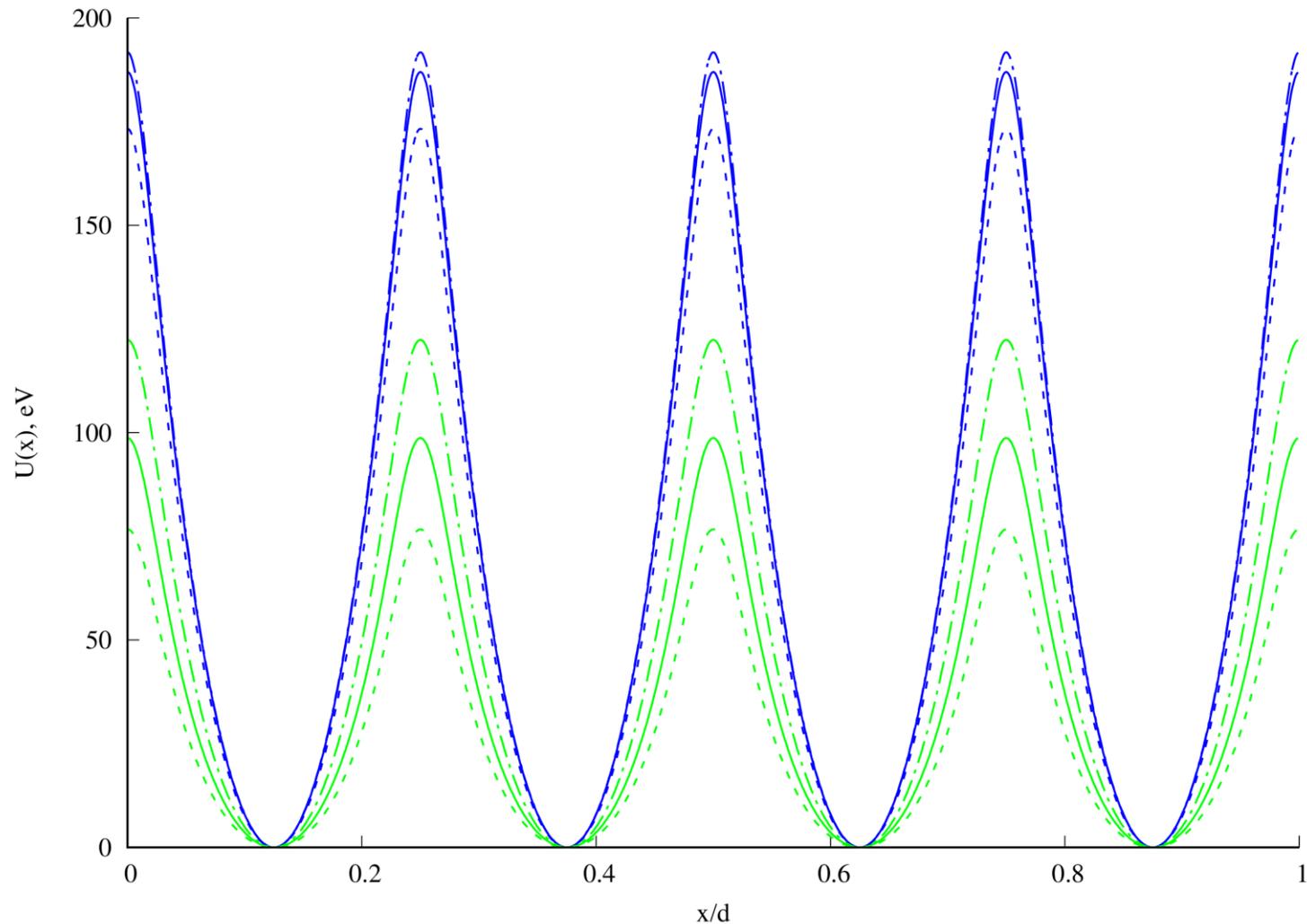


Рис.3. Результаты расчетов $U(x)$ для:

Si@C, (100) —

Si⁺@C, (100) ---

Si¹⁴⁺@C, (100) -·-·-

C@Si, (100) —,

C⁺@Si, (100) ---,

C⁶⁺@Si, (100) -·-·-

Литература

1. Assmann W. et al. Transverse cooling or heating of channeled ions by electron capture and loss //Physical review letters. – 1999. – Т. 83. – №. 9. – С. 1759. <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.83.1759>
2. Линдхард Й. Влияние кристаллической решетки на движение быстрых заряженных частиц //Успехи физических наук. – 1969. – Т. 99. – №. 10. – С. 249-296. DOI: 10.3367/UFNr.0099.196910c.0249
3. Огороков В. В. Использование когерентного возбуждения релятивистских ядер в кристалле в фундаментальных исследованиях по СТО и ОТО //Успехи физических наук. – 2003. – Т. 173. – №. 4. – С. 447-452. DOI: 10.3367/UFNr.0173.200304g.0447
4. Koshcheev V. P., Shtanov Y. N. Potential Energy of Interaction between an Atom and an Atomic Plane //Journal of Surface Investigation: X-ray, Synchrotron and Neutron Techniques. – 2019. – Т. 13. – С. 716-718. DOI: 10.1134/S1027451019040256
5. Koshcheev V. P., Shtanov Y. N. Computer Simulation of the Total Energy and the Screening Function of a Nitrogen Molecule in First-Order Perturbation Theory //Journal of Surface Investigation: X-ray, Synchrotron and Neutron Techniques. – 2024. – Т. 18. – №. 2. – С. 474-477. <https://doi.org/10.1134/S1027451024020332>
6. Clementi E., Roetti C. // Atomic Data Nucl. Data Tables. 1974. V. 14. № 3. P. 177. [https://doi.org/10.1016/S0092-640X\(74\)80016-1](https://doi.org/10.1016/S0092-640X(74)80016-1)

Дополнительные материалы к статье размещены в
<http://www.info.jinr.ru/programs/jinrlib/tropics/index.html>



Спасибо за внимание!

Для связи

Кощев Владимир Петрович E-mail: koshcheev1@yandex.ru тел.: +7985-476-16-19 [elibrary](#)

Штанов Юрий Николаевич E-mail: yuran1987@mail.ru тел.:+7922-417-40-22 [elibrary](#)