

Препринт ЕФИ-1051(14)-88

ԵՐԵՎԱՆԻ ՖԻԶԻԿԱԶԻ ԻՆՏԻՏՈՒՏ
ЕРЕВАНСКИЙ ФИЗИЧЕСКИЙ ИНСТИТУТ
YEREVAN PHYSICS INSTITUTE



А.С.ГЕВОРКЯН, Н.Н.КОРХМАЗЯН, Г.Г.МЕЛИКЯН

**ИЗЛУЧЕНИЕ ПРИ ПЛОСКОСТНОМ КАНАЛИРОВАНИИ
ЛЕГКИХ ЧАСТИЦ В ИОННЫХ КРИСТАЛЛАХ
ТИПА CsCl**

ЦНИИАтоминформ
ЕРЕВАН—1988

Ո.Ս. ԳԵՎՈՐԳՅԱՆ, Ն.Ն. ՂՈՐԴՄԱԶՅԱՆ, Գ.Գ. ՄԵԼԻՔՅԱՆ

**ԸՍԸ ՏԻՖԻ ԻՈՆԱՅԻՆ ԲՑՈՒՐԵՂՆԵՐՈՒՄ ՀԱՐԹ ԿԱՆՈՒԱՅՎԱԾ
ԹԵԹԵՎ ՄՈՍՆԻԿՆԵՐԻ ԸԱՌՈՂԱՅԹՈՒՄԸ**

Ինքնահամաձայնեցված դաշտի զծայնացված հտվաարման միջոցով հետազոտված է էլեկտրատառիկ դաշտի կտուցվածքը իոնային ըյուրեղներում: Ակալյար պոտենցիալի համար ստացված նշգրիտ արտահայտությունը միջինացված է, ըստ Ֆոնոնների կրանզանու /սպեկտր/: Բյուրեղներում էլիցրավորված արագ մասնիկների վրա ազդող արդյունարար պոտենցիալը զտնելու նպատակով, եռաչափ պոտենցիալը միջինացված է, ըստ ըյուրեղային հարթությանը զուգահեռ դիրք ունեցող տարրական բջջի,

ԸՍԸ կազմածի համար: Թվայնորեն հետազոտված է արդյունարար պոտենցիալի կախումը ջերմաստիճանից: Երկրեւո մոտավորությամբ հետազոտված է հարթ կանալացված ուղյակախորանի էլեկտրոնի ճառագայթման երանյանու տոանձնահատկությունները և կտուցված են համադաստիան զծանկարներ:

Երևանի Ֆիզիկայի Ինստիտուտ

Երևան 1988



Препринт ВФИ-1051(14)-88

УДК 621.039.8

А.С.ГЕВОРКЯН, Н.Н.КОРХМАЗЯН, Г.Г.МЕЛИКЯН

ИЗЛУЧЕНИЕ ПРИ ПЛОСКОСТНОМ КАНАЛИРОВАНИИ ЛЕГКИХ
ЧАСТИЦ В ИОННЫХ КРИСТАЛЛАХ ТИПА $CsCl$

В рамках линеаризованного уравнения самосогласованного поля исследована структура электростатических полей в ионных кристаллах. Получено точное решение для скалярного потенциала, усредненное по фоновому спектру. С целью нахождения эффективного потенциала проведено усреднение полученного трехмерного потенциала по элементарной ячейке кристаллической плоскости для структурного типа $CsCl$. Проведен численный анализ выражения для эффективного потенциала в зависимости от температуры кристалла. В дипольном приближении исследованы спектральные особенности излучения плоскоканализованного релятивистского электрона и построены соответствующие графики.

Ереванский физический институт

Ереван 1988

Preprint YERPHI-1051(14)-88

A.S. GEVORKIAN, N.N. CORKHMAZIAN, G.G. MELIKIAN

THE RADIATION AT PLANE CHANNELING OF LIGHT PARTICLES
IN CsCl TYPE ION CRYSTALS

The structure of electrostatic fields in ion crystals is investigated in the framework of a linearized equation of a self-consistent field. The exact solution for the scalar potential is received then averaged over the phonon spectrum. With the aim to find an effective potential, the three-dimensional potential is averaged over the elementary cell of the crystal plane of CsCl structure type. A numerical analysis of the effective potential expression in dependence with the crystal temperature is made. In a dipole approximation the spectral peculiarities of the plane channeled relativistic electron radiation is investigated and the corresponding plots are built.

Yerevan Physics Institute

Yerevan 1988

Введение

Теоретическое исследование излучения электронов (позитронов) высоких энергий при каналировании в кристаллических структурах различных типов может выявить принципиально новые особенности этого физического явления. До сих пор процесс каналирования и сопровождающее его излучение достаточно обстоятельно исследовались в основном в кристаллах с ковалентной связью. В частности, как показано в многочисленных экспериментах и теоретических исследованиях [1], ориентационные эффекты, а вместе с ними и направленное коротковолновое излучение в этих кристаллах подавляются на относительно малых расстояниях. Причем известно, что для уменьшения диссипативных процессов наиболее выгодны простые кристаллические структуры, которые встречаются обычно у легких образцов. С другой стороны, для усиления эффекта каналирования и связанного с ним излучения целесообразно рассматривать тяжелые кристаллы. Использование традиционных ковалентных кристаллов, как справедливо отмечают авторы работы [2], не может удовлетворить этим противоречивым требованиям. В этом

смысле, на наш взгляд, наиболее подходящими кристаллическими радиаторами могут служить ионные кристаллы типа CsCl . В этих кристаллах, в отличие от кристаллов типа NaCl , главные кристаллографические плоскости в целом заряжены. Последнее обстоятельство может стать причиной резкого улучшения характеристик каналирования и сопровождающих его эффектов.

Для подробного исследования этого явления в ионных кристаллах первостепенной задачей является корректное вычисление потенциала взаимодействия частицы с кристаллом в режиме каналирования.

Напомним, что до сих пор для исследования ориентированного движения заряженных частиц в кристаллах с ионной связью применялись, как правило, эффективные потенциалы, полученные от усреднения по Линдхардту модельных потенциалов для изолированных атомов [3-5]. Нетрудно убедиться, что такая практика не является удовлетворительной по ряду причин. Во-первых, не учитывается изменение параметров экранирования ядер в условиях образования ионной связи, и, во-вторых, не учитывается то обстоятельство, что в ионных кристаллах существуют дальнедействующие силы, порожденные отдельными заряженными осями и плоскостями, которые оказывают коллективное сильное влияние на формирование структуры электростатического поля вблизи каждой отдельной плоскости. Целью настоящей работы является, в первую очередь, нахождение решения линейризованного уравнения самосогласованного поля для трехмерного бесконечного ионного кристалла CsCl с учетом тепловых колебаний, а также получение аналитического выра-

ления для эффективного потенциала в случае планарного каналирования и исследования спектральных особенностей излучения.

I. Нахождение периодических решений электростатического поля в бесконечных ионных кристаллах типа CsCl . Учет влияния фононного спектра.

Из большого класса бинарных неорганических соединений с общей формулой AX нас будет интересовать структурный тип CsCl (рис. I). Как видно из рисунка, ионы Cl^- расположены в вершинах кубической ячейки, а в центре её находится ион противоположного знака Cs^+ . Совершенно аналогично можно выделить ячейку, где каждый ион хлора окружен восемью ионами цезия. Если совместить начало координат с центром тяжести атома цезия, то его координаты будут (0,0,0), а координаты хлора - (1/2, 1/2, 1/2). Для вычисления потенциала кристалла воспользуемся приближением Иенсена-Майера-Гослера-Роде [6], которое состоит в том, что положительные и отрицательные ионы в решетке упакованы как шары соответственно с радиусами R_{o+} и R_{o-} , и что набор шаров с одинаковыми радиусами образует две подобные подрешетки с кубической симметрией. Это приближение в применении к щелочным и галогидным ионам дает хорошее совпадение с опытными данными [7]. Кроме того, оно допускает применение линеаризованного уравнения самосогласованного поля для системы зарядов

$$\Delta\varphi(\vec{r}) = -4\pi\rho(\vec{r}); \quad \rho(\vec{r}) = \rho^+(\vec{r}) + \rho^-(\vec{r}), \quad (I)$$

где $\rho^+(\vec{r})$ - плотность заряда в данной точке от всех положительных, а $\rho^-(\vec{r})$ - соответственно отрицательных ионов. Ввиду линейности оператора Δ аналогичное разделение можно сделать и в потенциале. Тогда вместо (1) будем иметь два уравнения:

$$\Delta\varphi^+(\vec{r}) = -4\pi\rho^+(\vec{r}), \quad (2)$$

$$\Delta\varphi^-(\vec{r}) = -4\pi\rho^-(\vec{r}). \quad (3)$$

Эти уравнения, с учетом того, что каждая подструктура представляет собой кубическую решетку, можно представить в виде

$$\Delta\varphi^+(\vec{r}) = -4\pi \sum_{\vec{r}_+ \in L_+^3} \rho_i^+(\vec{r} - \vec{r}_+), \quad (4)$$

$$\Delta\varphi^-(\vec{r}) = -4\pi \sum_{\vec{r}_- \in L_-^3} \rho_i^-(\vec{r} - \vec{r}_-), \quad (5)$$

где $\rho_i^\pm(\vec{r} - \vec{r}_\pm)$ - плотность распределения заряда в ионе, находящемся в узле \vec{r}_\pm . Формальное решение этих уравнений можно представить в виде

$$\varphi(\vec{r}) = -4\pi \int G_\pm(\vec{r} - \vec{r}') \rho_i^\pm(\vec{r}') d\vec{r}', \quad (6)$$

где гринаовская функция $G_\pm(\vec{r} - \vec{r}')$ задается уравнением

$$\Delta G_\pm(\vec{r} - \vec{r}') = \sum_{\vec{r}_\pm \in L_\pm^3} \delta(\vec{r} - \vec{r}' - \vec{r}_\pm). \quad (7)$$

Решение этого уравнения, которое отвечает симметрии задачи, представляется в виде*

$$G(\vec{r} - \vec{r}') = -\frac{1}{d^3} \sum_{\vec{k}} \frac{1}{k^2} e^{i\vec{k}(\vec{r} - \vec{r}')} \quad (8)$$

где d - расстояние между одинаковыми ближайшими ионами в кристалле, а \vec{k} - трехмерный вектор обратной решетки

$$\vec{k} = \frac{2\pi}{d} l \hat{x} + \frac{2\pi}{d} n \hat{y} + \frac{2\pi}{d} m \hat{z}.$$

Подставляя (8) в (6) и учитывая принцип суперпозиции для полей и факт смещения подрешеток относительно друг друга на величину $d/2$ по всем координатам, получим выражение для электростатического поля, создаваемого всем кристаллом

$$\begin{aligned} \Psi(\vec{r}) = & 4\pi \int d\vec{r}' \left(\frac{1}{d^3} \sum_{\vec{k}} \frac{1}{k^2} e^{i\vec{k}(\vec{r} - \vec{r}')} \right) \rho_i^+(\vec{r}') + \\ & + 4\pi \int d\vec{r}' \left(\frac{1}{d^3} \sum_{\vec{k}} \frac{1}{k^2} (-1)^{m+n+l} e^{i\vec{k}(\vec{r} - \vec{r}')} \right) \rho_i^-(\vec{r}'). \end{aligned} \quad (9)$$

В формулах (6) и (9) функцию $\rho_i^\pm(\vec{r}')$ с учетом того, что тепловые колебания центра тяжести иона происходят во много раз медленнее, чем внутренние движения, можно с хорошей точностью представить в виде

* В дальнейшем знаки \pm опускаются.

$$\rho_i^{\pm}(\vec{z}') = W^{\pm}(\vec{R}) P^{\pm}(\vec{R}_T); \quad \vec{z}' = \vec{R} + \vec{R}_T. \quad (10)$$

Здесь $W^{\pm}(\vec{R})$ обозначает плотность заряда в ионе при температуре среды $T=0$, а $P^{\pm}(\vec{R}_T)$ - плотность вероятности тепловых смещений ионов решетки из положения равновесия.

Динамика колебания решетки с одним атомом в элементарной ячейке достаточно подробно исследована и хорошо описывается теорией Дебая, что нельзя сказать о кристаллах с более сложной ячейкой. Дело в том, что в сложных кристаллах, наряду с акустическими, возникают оптические и смешанные оптико-акустические колебания, для которых теория Дебая в обычном ее виде неверна [8]. Тем не менее, для относительно низких температур кристаллической среды, когда оптические ветви подавлены по отношению к акустическим и амплитуда колебания последних мала по отношению к постоянной кристаллической решетки d , можно в качестве функции распределения $P(\vec{R}_T)$ использовать гармоническое изотропное представление

$$P(\vec{R}_T) = P(R_{Tx})P(R_{Ty})P(R_{Tz}), \quad (11)$$

$$P(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}U_0} \exp\left(-\frac{x^2}{2U_0^2}\right).$$

В формуле (11) U_0^2 обозначает среднее значение квадрата амплитуды тепловых колебаний [9]. Что касается связи между амплитудами акустических колебаний двух базисных атомов U_{0+} и U_{0-} , то она имеет вид [10]

$$U_{0+} = U_{0-}. \quad (12)$$

При увеличении температуры среды начинают эффективно возбуждаться и оптические ветви колебания решетки. Поэтому, начиная с некоторых температур, при усреднении соответствующих формул по фоновому спектру их влияние обязательно надо учитывать.

Подставляя (II) и (IO) в (9) и проводя элементарное интегрирование по координате \vec{R}_T , находим потенциал, создаваемый кристаллом в данной точке пространства с учетом влияния фонового спектра

$$\begin{aligned} \varphi(\vec{z}) = 4\pi \int d\vec{R} \left(\frac{1}{d^3} \sum_{\vec{k} \neq 0} \frac{1}{k^2} e^{-\frac{k^2 U_{0+}^2}{2}} e^{i\vec{k}(\vec{z}-\vec{R})} \right) W^+(\vec{R}) + \\ + 4\pi \int d\vec{R} \left(\frac{1}{d^3} \sum_{\vec{k} \neq 0} \frac{1}{k^2} (-1)^{m+n+l} e^{-\frac{k^2 U_{0-}^2}{2}} e^{i\vec{k}(\vec{z}-\vec{R})} \right) W^-(\vec{R}). \end{aligned} \quad (I3)$$

Напомним, что в (I3) m, n, l принимают целочисленные значения. Если принять, что распределение заряда внутри ионов обладает сферической симметрией $W(\vec{R}) = W(R)$, то решение (I3) сильно упрощается в областях, не пересекающихся с парами-ионами, т.е. вне структуры

$$\varphi_{\text{вн.ст.}}(\vec{z}) = 4\pi |e^-| \cdot \frac{1}{d^3} \sum_{\vec{k} \neq 0} \frac{1}{k^2} e^{i\vec{k}\vec{z}} \left(e^{-\frac{k^2 U_{0+}^2}{2}} - (-1)^{m+n+l} e^{-\frac{k^2 U_{0-}^2}{2}} \right). \quad (I4)$$

В случае, когда частица пересекает ион данной подрешетки, упрощается член, который описывает взаимодействие с другой подрешеткой.

2. Эффективный потенциал взаимодействия заряженной частицы с кристаллом в режиме планарного каналирования

Пусть быстрая заряженная частица летит под малым углом по отношению к какой-либо, в целом заряженной, кристаллической плоскости $\{x, y\}$ и под большим углом по отношению к главным кристаллографическим осям, находящимся в этой плоскости. Тогда потенциал взаимодействия частицы с кристаллом будет усредняться в направлении быстрого движения, т.е. вдоль выбранной плоскости. Ввиду того, что потенциал (13) есть периодическая функция на плоскости $\{x, y\}$, его среднее значение находится по формуле

$$\bar{\varphi}(z) = \frac{1}{d^2} \int_0^d dx \int_0^d dy \varphi(x, y, z) = \frac{1}{d^2} \int_0^d \int_0^d (\varphi^+(\bar{z}) + \varphi^-(\bar{z})) dx dy. \quad (15)$$

Ниже, ввиду полной аналогии между подрешетками L_+ и L_- , приводится детальное вычисление только для первого члена в сумме (15). Предположим, что частица движется в плоскости, параллельной плоскости $\{x, y\}$ и находящейся от нее на расстоянии $|z - md| \leq R_{o+}$. Тогда элементарная ячейка разделяется на две существенно различные области S_1 и S_2 (рис. 2 (а, б, в)). В области S_1 частица подвергается воздействию со стороны такого поля, которое создает решетка, если принять, что в ее узлах расположены точечные заряды. Что касается области S_2 , то там

частица совершает движение внутри одного иона, и поэтому в потенциале взаимодействия частицы с кристаллом в этой области должен фигурировать структурный фактор иона. Исходя из вышесказанного и с учетом (I3)-(I5), можно написать

$$\overline{\Psi^+}(\mathbf{z}) = \frac{1}{d^2} \left\{ \int_{S_2} (\Psi^+(\bar{\mathbf{z}}) - \Psi_{\text{бн.ст.}}^+(\bar{\mathbf{z}})) dx dy + \int_{S_1 \cup S_2} \Psi_{\text{бн.ст.}}^+(\bar{\mathbf{z}}) dx dy \right\}. \quad (\text{I6})$$

Поскольку ионы обладают сферической симметрией, то область S_2 будет представлять собой круг с радиусом

$$\bar{R}(\mathbf{z}) = \text{Re} \sqrt{R_0^2 - \eta^2(\mathbf{z})d^2}, \quad \eta(\mathbf{z}) = \frac{1}{2} + (-1)^n \left(\left\{ \frac{z}{d} \right\} - \frac{1}{2} \right), \quad n = \left[\frac{2z}{d} \right]. \quad (\text{I7})$$

где скобки $\{\dots\}$ и $[\dots]$, соответственно, обозначают дробную и целую части функции.

Переходя теперь с формулы (I6) к цилиндрическим координатам (ρ, z, φ) и учитывая (I7), для $\overline{\Psi^+}(\mathbf{z})$ будем иметь

$$\overline{\Psi^+}(\mathbf{z}) = \frac{1}{d^2} \left(\int_0^{2\pi} \int_0^{\bar{R}(\mathbf{z})} (\Psi(z, \rho, \varphi) - \Psi_{\text{бн.ст.}}(z, \rho, \varphi)) \rho d\rho d\varphi + \int_0^d \int_0^d \Psi_{\text{бн.ст.}}(\bar{\mathbf{z}}) dx dy \right). \quad (\text{I8})$$

Вычисление интегралов в (I8) с учетом (I3) и (I4) приводит к следующему результату

$$\overline{\Psi^+}(\mathbf{z}) = \frac{|e^-|}{d^2 \pi} \sum_{m,n,\ell} \frac{\bar{R}(\mathbf{z})}{\mu^2 \nu} \exp(i \frac{2\pi}{d} m z - \lambda_+^2 \mu^2) J_1(\frac{2\pi}{d} \nu \bar{R}(\mathbf{z})) [W^+(m,n,\ell) - 1] + \quad (\text{I9})$$

$$\frac{z|e^-|}{\pi d} \sum_{m=1}^{\infty} \frac{1}{m^2} \exp(-\lambda_+^2 m^2) \cos(\frac{2\pi}{d} m z); \quad W^+(m,n,\ell) = \int e^{-i\vec{k}\vec{R}} W^+(\vec{R}) d\vec{R},$$

где

$$\lambda_+ = \sqrt{2\pi} U_{0+}/d; \quad \mu^2 = m^2 + n^2 + \ell^2 > 1; \quad \nu^2 = n^2 + \ell^2. \quad (20)$$

Аналогичное вычисление для $\overline{\Psi^-(z)}$ приводит к следующему выражению

$$\overline{\Psi^-(z)} = \frac{|e^-|}{\pi d^2} \sum_{m,n,\ell} \frac{(-1)^m \bar{R}(z - \frac{d}{2})}{\mu^2 \nu} \exp\left(i \frac{2\pi}{d} m z - \lambda^2 \mu^2\right) \times \\ \times J_1\left(\frac{2\pi}{d} \nu \bar{R}(z - \frac{d}{2})\right) [W^-(m,n,\ell) + 1] - \frac{2|e^-|}{\pi d} \sum_{m=1}^{\infty} \frac{(-1)^m}{m^2} \exp(-\lambda^2 m^2) \cos\left(\frac{2\pi}{d} m z\right). \quad (21)$$

Окончательное выражение для эффективного потенциала взаимодействия заряженной частицы с ионным кристаллом типа CsCl в режиме плоскостного каналирования с учетом (I2), (I5), (I9) и (21) будет иметь вид:

$$\overline{\Psi(z)} = \frac{2|e^-|}{\pi d} \sum_{m=0}^{\infty} \left\{ \sum_{n,\ell=-\infty}^{\infty} \alpha_m \frac{\cos\left(\frac{2\pi}{d} m z\right)}{\mu^2 \nu} e^{-\lambda^2 \mu^2} [\bar{R}(z) J_1\left(\frac{2\pi}{d} \nu \bar{R}(z)\right) \times \right. \\ \times (W^+(m,n,\ell) - 1) + (-1)^m \bar{R}(z - \frac{d}{2}) J_1\left(\frac{2\pi}{d} \nu \bar{R}(z - \frac{d}{2})\right) (W^-(m,n,\ell) + 1)] + \\ \left. + \frac{\cos\left(\frac{2\pi}{d} (m+1) z\right)}{(m+1)^2} e^{-\lambda^2 (m+1)^2} (1 - (-1)^{m+1}) \right\}, \quad (22)$$

где

$$\lambda = \lambda_+ = \lambda_-; \quad \alpha_m = \begin{cases} 1, & m \neq 0 \\ 1/2, & m = 0 \end{cases}$$

3. Аппроксимация потенциала планарного каналирования

Эффективный потенциал в виде (22) невозможно использовать для конкретных траекторных расчетов без вычисления явного вида функции $W^{\pm}(m, n, \ell)$. В связи с этим целесообразно представить распределение заряда внутри иона в виде

$$W^{\pm}(\vec{R}) = V^{\pm}(\vec{R}) + z^{\pm} \delta(\vec{R}), \quad (23)$$

где $V^{\pm}(\vec{R})$ - распределение электронов внутри ионов кристалла, а z^{\pm} - число протонов в точечном ядре. Подставляя (23) в (19) и проводя интегрирование, находим

$$W^{\pm}(m, n, \ell) = z^{\pm} + \chi^{\pm}(m, n, \ell), \quad (24)$$

$$\chi^{\pm}(m, n, \ell) = \frac{4\pi}{K} \int_0^{\infty} V^{\pm}(R) R \sin KR dR; \quad K = |\vec{K}|. \quad (25)$$

Для детального исследования интеграла (25) необходимо уточнить вид функции $V^{\pm}(R)$. Поскольку статистическая ионная модель Томаса-Ферми-Дирака имеет решение и на расстояниях, меньших, чем граничные радиусы свободных ионов, в качестве электронного распределения в ионе кристалла можно использовать решение Ленца-Иенсена, но с уточнением некоторых параметров в аппроксимации [6]

$$V(R) = \frac{N}{A} \frac{e^{-x}}{x^3} (1+cx)^3; \quad A = \frac{8\pi a_0^3}{\xi^3 z} P(c); \quad x = \left(\frac{R\xi}{a_0}\right)^{1/2} z^{1/6}, \quad (26)$$

где N - число электронов в ионе данного сорта, z - порядковый номер, a_0 - радиус Бора, а $P(c)$ - полином от C вида

$$P(c) = 6 + 72 C + 360 C^2 + 720 C^3. \quad (27)$$

В формулах (26), (27) C и ξ - вариационные параметры, они определяются из условия минимизации энергии электронной системы.

Для интеграла (25) получим

$$\chi(m, n, \ell) = - \frac{8\pi N}{\kappa A} \left(\frac{a_0}{\xi z^{1/3}} \right) I_m \int_0^{\infty} (1+cx)^3 e^{i\ell x^2 - x} dx; \quad \ell = \frac{2\pi a_0 \mu}{\xi d z^{1/3}}. \quad (28)$$

Воспользуемся формулой (II)

$$\int_0^{\infty} x^{n-1} e^{-px^2 - qx} dx = \Gamma(n) (2p)^{-\frac{n}{2}} e^{q^2/8p} D_{-n} \left(\frac{q}{\sqrt{2p}} \right) \\ (\operatorname{Re} n, \operatorname{Re} q > 0; \operatorname{Re} p = 0) \quad (29)$$

и представим функцию в виде

$$\chi(\ell, n, m) = - \frac{4d}{A} \left(\frac{a_0}{\xi z^{1/3}} \right)^2 I_m \left\{ e^{-i(2\ell)^{-2}} [\ell D_{-1}(\ell) + \right. \\ \left. + 6c\ell^2 D_{-2}(\ell) + 18c^2\ell^3 D_{-3}(\ell) + 24c^3\ell^4 D_{-4}(\ell)] \right\}; \quad \ell = (-2i\ell)^{-1/2}, \quad (30)$$

где $D_n(x)$ обозначает функцию параболического цилиндра. В выражении (30) можно разделить действительные и мнимые части. Ввиду того, что результат получается громоздким, он здесь не приводится. Отметим, что для численного расчета гораздо удобнее исходное выражение (28) для $\chi(m, n, \ell)$.

Ниже, конкретно для параметра кристалла $CsCl$ (см. 6), в случае двух разных температур, рассчитаны потенциалы планарного каналирования для электронов (рис.3,4) и позитронов (рис.3а, 4а). Как видно из рисунков, электрон может каналироваться или между двумя отрицательно заряженными плоскостями ионов $CsCl$, или вблизи одной из них. Причем глубина потенциальной ямы в первом случае получается примерно в 4,5 - 5 раз больше по сравнению с глубиной ямы, образованной вдоль одной отрицательно заряженной плоскости. Что касается разницы между потенциалами планарного каналирования в кристаллах с ковалентной связью и соответствующими потенциалами в ионных кристаллах типа $CsCl$, то она заключается, во-первых, в том, что ширина основной потенциальной ямы в кристалле $CsCl$ почти в два раза больше соответствующей в кристаллах с ковалентной связью, имеющих примерно одинаковый вес с $CsCl$. Кроме того, и максимальная глубина потенциальной ямы в кристалле $CsCl$ значительно больше, чем в кристаллах с ковалентной связью.

Довольно интересным является поведение потенциала в случае планарного каналирования позитронов (рис.3а, 4а). В частности, из рис.3а и 4а видно, что если поперечная энергия частицы меньше высоты центрального барьера, то в этом случае каналирование возможно между отрицательно и положительно заряженными плоскостями. Если же поперечная энергия позитрона больше высоты центрального барьера, то частица будет пересекать кристаллическую плоскость. Следовательно, сработает один из основных механизмов деканалирования, связанный с рассеянием на больших углах при столкновениях с ядрами ионов на малых прицельных расстояниях.

4. Излучение заряженных частиц, каналированных в ионных кристаллах типа CsCl

Как показано в первых работах по каналированию [1], динамика быстрой заряженной частицы в канале в широком энергетическом диапазоне описывается классическими уравнениями движения. Генерированное при этом частотно-угловое распределение мощности излучения определяется по известной формуле классической электродинамики

$$\frac{dI}{d\omega d\Omega} = \frac{e^2 \omega^2}{4\pi^2 c^3} |\vec{A}_\omega|^2, \quad (31)$$

где τ - время пролета частицы, \vec{A}_ω - вектор, пропорциональный фурье-образу напряженности электрического поля

$$\vec{A}_\omega = \int_{-\infty}^{\infty} \vec{a}(t) e^{i\omega(1-\vec{n}\vec{\beta})t} dt, \quad (32)$$

$$\vec{a}(t) = [\vec{n} [\vec{n}\vec{\beta}(t)]] e^{-i\frac{\omega}{c} \vec{n}\delta\vec{r}(t)}, \quad (33)$$

$\vec{\beta}c$ - скорость частицы, $\delta\vec{r}$ - осциллирующая часть вектора перемещения частицы. Воспользуемся разложением в ряд фурье-вектора \vec{a}

$$\vec{a}(t) = \sum_{k=-\infty}^{\infty} \vec{a}_k e^{-ik\omega t}, \quad (34)$$

где

$$\vec{a}_k = \frac{\omega}{2\pi} \int_0^{2\pi/\omega} \vec{a}(t) e^{ik\omega t} dt \quad (35)$$

и подставим (32) - (35) в (31). После некоторых несложных преобразований получим

$$\frac{dI}{d\omega d\Omega} = \sum_{k=1}^{\infty} \frac{e^2 \omega^2}{2\pi c} \frac{\omega_k^2}{k\omega} |\vec{\alpha}_k|^2 \delta(\omega - \omega_k), \quad (36)$$

где $\omega_k = k\bar{\omega}/(1 - \vec{n}\vec{\beta})$, $\bar{\omega}$ - частота колебания каналированной частицы.

Для дальнейшего исследования спектра излучения, как показано в [1], удобно $\vec{\alpha}_k$ представить в виде

$$|\vec{\alpha}_k|^2 = |\vec{b}_k|^2 - |\vec{n}\vec{b}_k|^2, \quad (37)$$

$$\vec{b}_k = \frac{1}{T} \int_0^T \vec{\beta} \exp[ik\bar{\omega}t - i\frac{\omega}{c} \vec{n}\delta\vec{z}(t)] dt.$$

Разлагая вектор \vec{b}_k на параллельную и перпендикулярную к направлению поступательного движения компоненты, получим

$$b_{k\perp} = \frac{1}{T} \int_{-\frac{T}{2}}^{\frac{T}{2}} \beta_{\perp}(t) \exp(ik\bar{\omega}t - i\frac{\omega}{c} \vec{n}\delta\vec{z}) dt, \quad (38)$$

$$b_{k\parallel} = \frac{1}{T} \int_{-\frac{T}{2}}^{\frac{T}{2}} (\beta - \beta_{\perp}^2/2\beta) \exp(ik\bar{\omega}t - i\frac{\omega}{c} \vec{n}\delta\vec{z}) dt, \quad (39)$$

где $\delta\vec{z} = \int_0^t (\vec{\beta} - \vec{\beta}) dt$, а $\vec{\beta}_{\perp}(t)$ определяется из закона Ньютона

$$\dot{\vec{\beta}}_{\perp}(t) = -1/m\gamma \vec{\nabla}U, \quad (40)$$

а черточка означает среднее по времени.

Таким образом, вычисление спектральной плотности излучения

сводится к вычислению коэффициентов $\beta_{k\perp}$ и β_{kn} .

Полученные формулы значительно упрощаются при выполнении условия дипольности излучения $\gamma\psi_1 \ll 1$, где ψ_1 - угол отклонения скорости частицы от направления продольной скорости. В этом случае для спектрального распределения плотности излучения получим

$$\frac{dI}{d\omega} = \frac{e^2}{c} \sum_{k=1}^{\infty} \frac{|\dot{\beta}_{k\perp}|^2}{\Omega_k^2} \omega \left[1 - 2\left(\frac{\omega}{\omega_k}\right) + 2\left(\frac{\omega}{\omega_k}\right)^2 \right] \eta(\omega - \omega_k), \quad (41)$$

где $\omega_k = 2\gamma^2 k \bar{\omega}$, $\dot{\beta}_{k\perp}$ - фурье-компонента поперечного ускорения, η - единичная ступенчатая функция. Из-за сложного вида потенциала аналитическое исследование выражения (41) становится невозможным и возникает необходимость численного счета. Однако в некоторых частных случаях возможно аналитическое вычисление $dI/d\omega$, если потенциал взаимодействия аппроксимируется параболой $U(z) = U_0 \left(\frac{2z}{d_p}\right)^2$,

$$\dot{\beta}_{\perp k} = -i \frac{\Omega_0}{2} \sqrt{\frac{2E_{\perp}}{E}} \delta_{k1}, \quad E_{\perp} \ll U_0, \quad (42)$$

где $\Omega_0 = \frac{2c}{d_p} \sqrt{\frac{2U_0}{E}}$, E_{\perp} и E - соответственно поперечная и полная энергии частицы.

Учитывая (42), для параболического потенциала в дипольном приближении получим

$$\frac{dI}{d\omega} = \frac{e^2}{2c} \frac{E_{\perp}}{E} \omega \left[1 - 2\left(\frac{\omega}{\omega_1}\right) + 2\left(\frac{\omega}{\omega_1}\right)^2 \right]. \quad (43)$$

Выражение (43) - хорошо известная формула из теории излучения релятивистского ондулятора и впервые получена в работе П.А. Корхмазяна (см. [12]). Как видно из формул (41) - (43), максимумы интенсивности излучения в дипольном приближении приходятся на характерные частоты $\omega_k = 2\gamma^2 \bar{\omega}_k$, а в случае параболического потенциала на частоту $\omega_1 = 2\gamma^2 \bar{\omega}$.

Приведенные выше формулы дают возможность проводить количественный анализ спектра излучения плоскоканализированных электронов в бинарных ионных кристаллах типа CsCl.

Поскольку при определенных начальных значениях углов в зависимости от начальной координаты z_0 частица может попадать в разные потенциальные ямы, спектр излучения (рис.5) в этом случае будет иметь два максимума

$$\omega_{\max} = 4\gamma^{3/2} \frac{c}{d_p} \sqrt{\frac{2U_0}{m_0 c^2}}, \quad (44)$$

где d_p - характерная ширина, а U_0 - глубина параболической ямы.

Заключение

Таким образом, в настоящей работе с помощью метода уравнения самосогласованного поля исследована структура электростатического поля в ионных кристаллах с конечной температурой.

Показано, что данный подход является универсальным,* наибо-

* Этот подход легко обобщить на все кристаллы (включая металлические кристаллы [13]).

лее последовательным и строгим по сравнению с подходами Линдхардта, Мольера и других, особенно, когда вопрос касается исследования полей в ионных, металлических и других моно- и поликристаллах, в узлах решеток которых расположены ионы. Эффективный потенциал планарного каналирования, который получается усреднением трехмерного потенциала кристаллической решетки по элементарной ячейке на плоскости, сводится к усреднению функции Грина данной ячейки. Ввиду относительно простого вида этой функции двумерное интегрирование по плоскости удается проводить аналитически. В этом случае для эффективного поля плоскостного каналирования получается выражение в виде решеточной суммы от произведения некоторых известных функций с факторами отдельных базисных ионов в импульсном представлении. Дальнейшее исследование формы и значения эффективного поля приводит к необходимости вычисления явных видов соответствующих факторов. Для этого в работе в качестве функции распределения электронного заряда в ионах как положительных, так и отрицательных использована модель Иенсена-Ленца с вариационными параметрами почти свободных ионов. Эта модель позволила для факторов получить явные аналитические формулы в виде линейной комбинации от специальных функций параболического цилиндра разных порядков.

Наиболее важным результатом работы является получение общего выражения для эффективного потенциала планарного каналирования, устраняющего все вышеуказанные трудности, которые присущи теории Линдхардта и его модификациям.

Возможны разные пути уточнения полученных результатов, связанные с использованием более точных моделей для функции распределения заряда в ионах кристалла при помощи:

а) соответствующих квантовых расчетов в рамках метода Хартри-Фока (см. напр. [6]);

б) одноэлектронного приближения в твердом теле с псевдоизмом [16] ;

в) уточнения вариационных параметров в модели Иенсена-Ленца.

Во второй части работы исследован спектр излучения релятивистского электрона в рамках классической электродинамики. Для этого принимается, что электрон вблизи относительных минимумов потенциала совершает колебания с синусоидальной траекторией. Отметим, что такие траектории возникают, когда эффективный потенциал вблизи минимумов аппроксимируется параболой. После этих допущений удастся провести аналитическое исследование для спектральной плотности излучения электрона. В спектре излучения возникает два максимума, каждый из которых соответствует излучению частиц, каналированных соответственно в первой и второй ямах.

Авторы считают своим приятным долгом выразить благодарность профессору Н.А.Корхмазяну за постоянные стимулирующие дискуссии и И.А.Багдасаряну за помощь в численных расчетах.

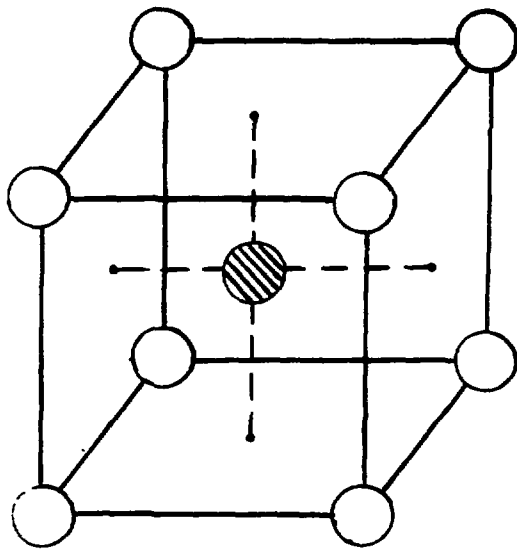


FIG. 1

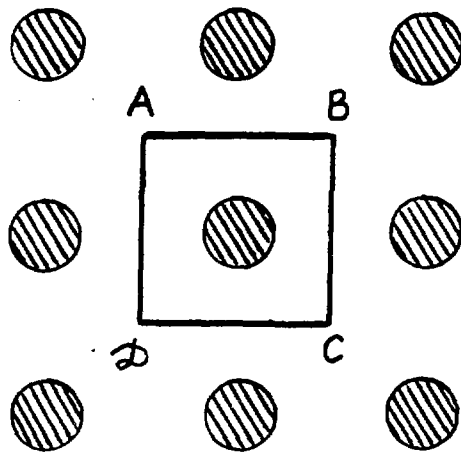


FIG. 2a

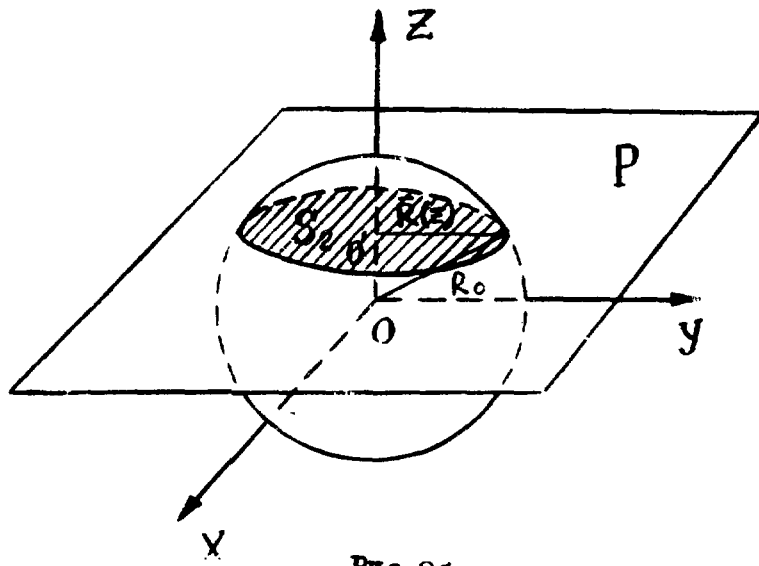


FIG. 26

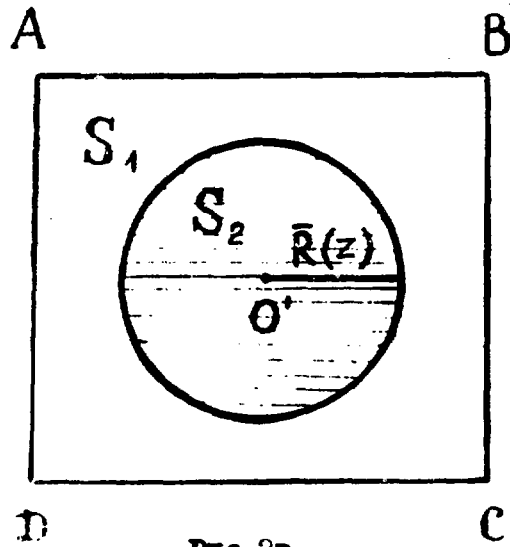


FIG. 2B

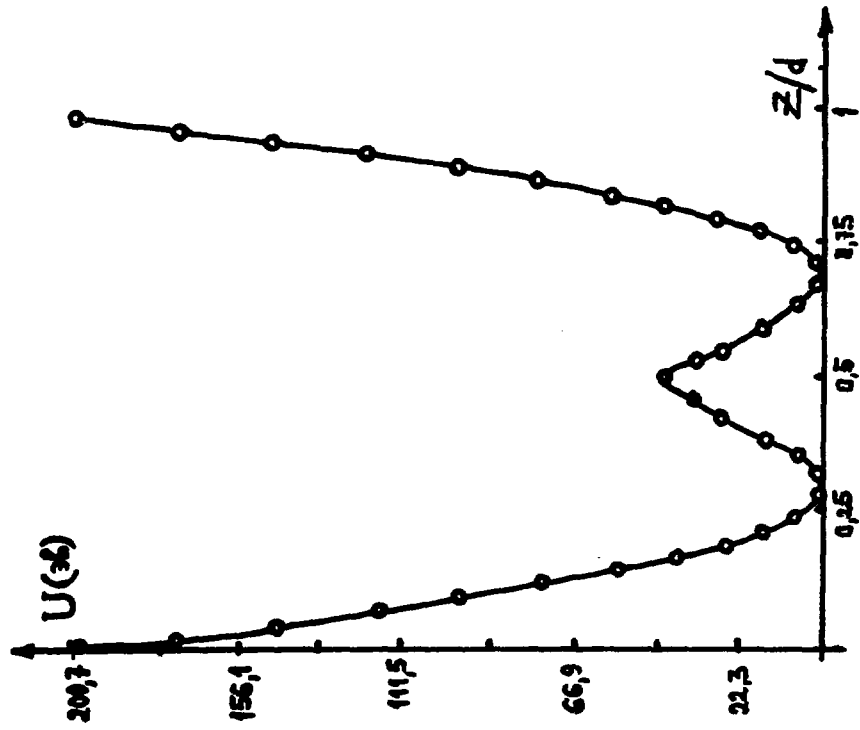


FIG. 3a

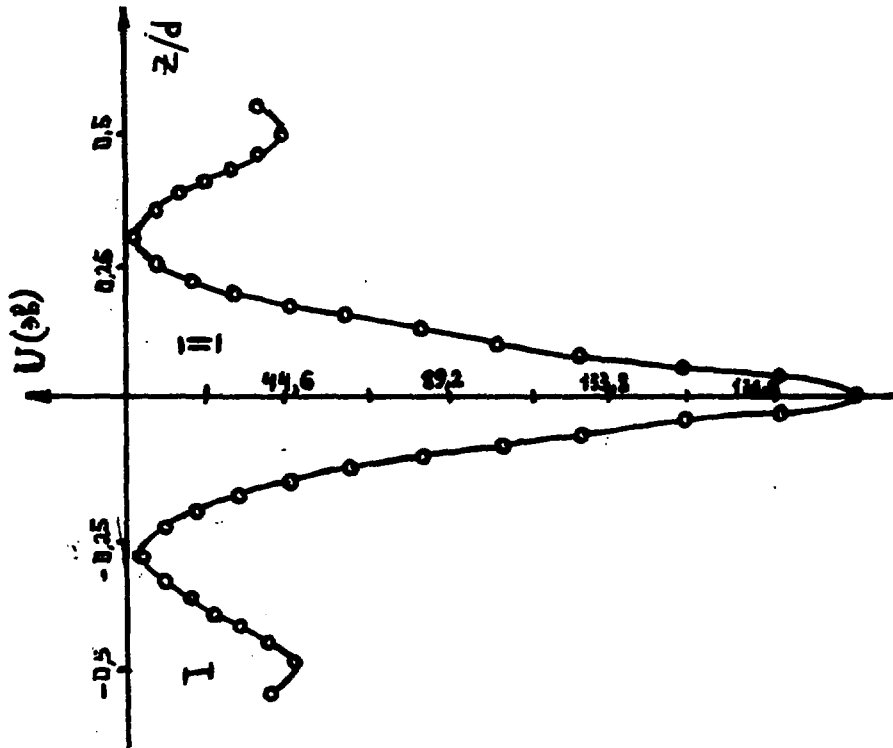


FIG. 3

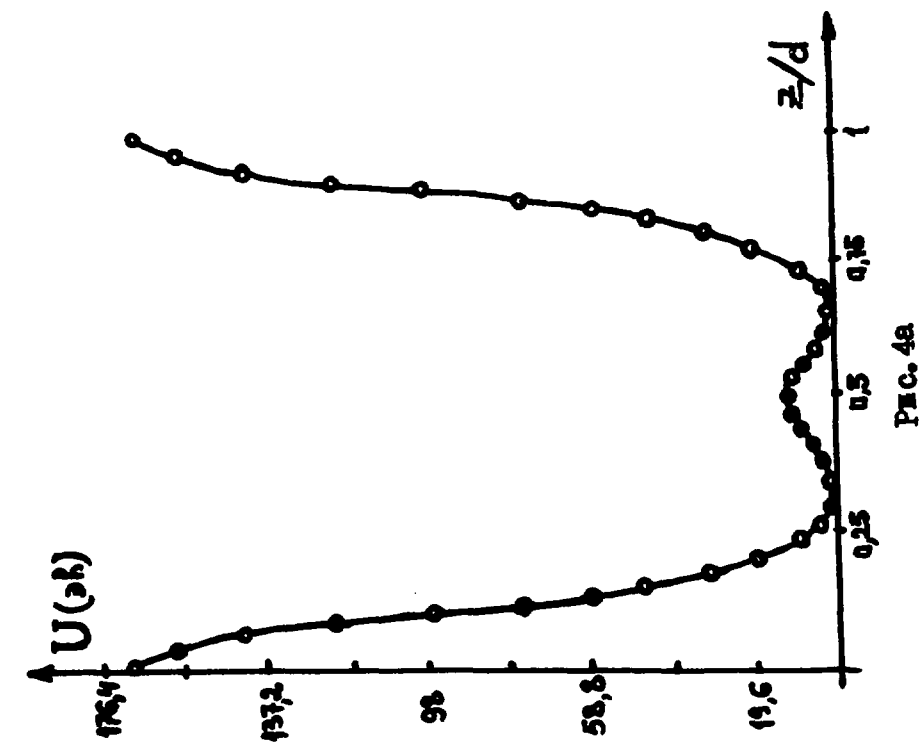


FIG. 4a

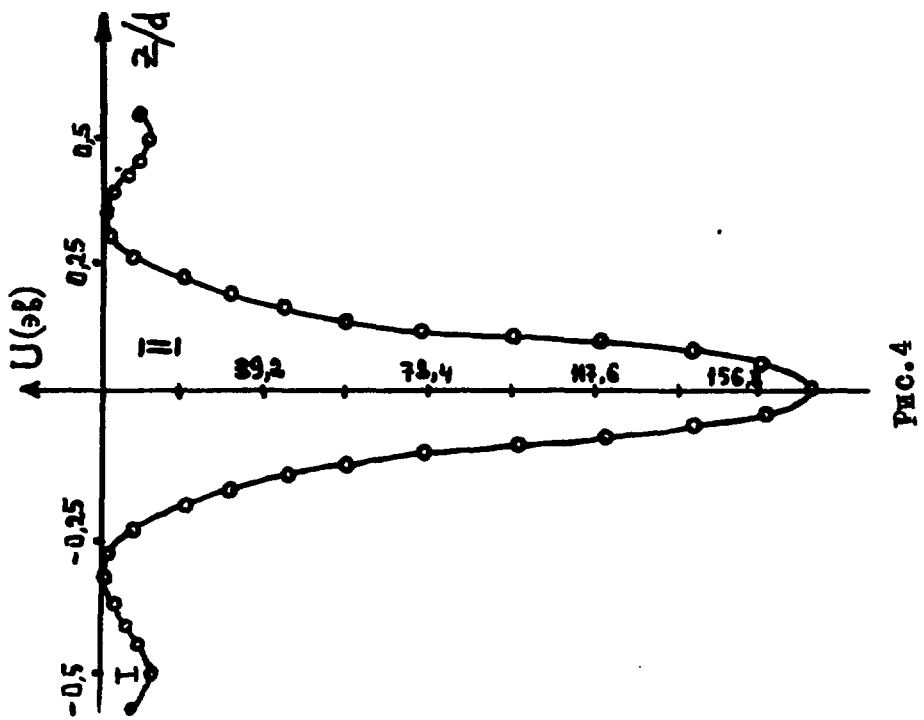


FIG. 4

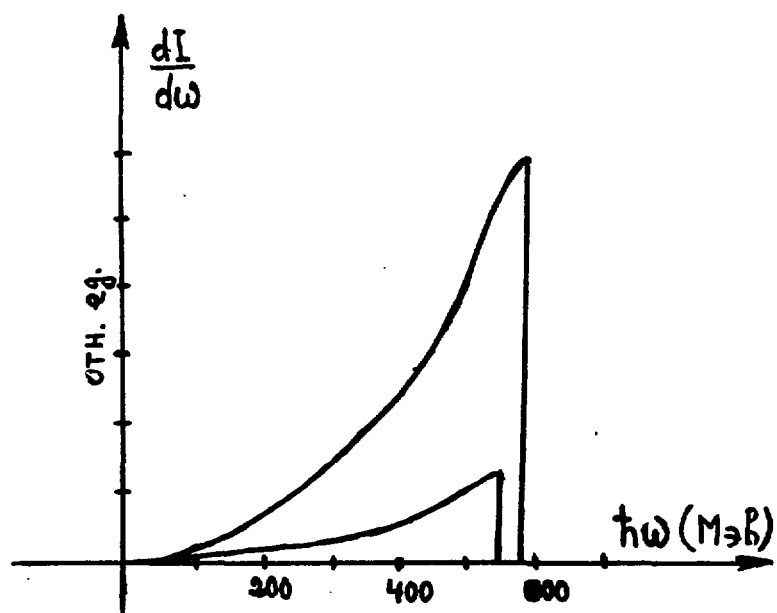


Рис. 5

ПОДПИСИ К РИСУНКАМ

- Рис.1 Элементарная ячейка кристалла CsCl .
- Рис.2а Квадрат $ABCD$ обозначает проекцию элементарной ячейки подрешетки L_+^3 на параллельную к $\{x,y\}$ плоскости.
- Рис.2б Пересечение иона с плоскостью $\{p\}$, параллельной плоскости $\{x,y\}$ и смещенной по координате z на расстояние $OO' = z - md$.
- Рис.2в В области S_1 частица находится вне структуры ионов данной подрешетки. В случае, когда частица движется в области S_2 , она чувствует особенности структуры.
- Рис.3,4 Вид потенциала взаимодействия электрона с кристаллом CsCl в режиме планарного каналирования соответственно для температур $\eta = 0,001$; $\eta = 0,03$.
- Рис.3а, 4а Вид потенциала взаимодействия позитрона с кристаллом CsCl в режиме планарного каналирования соответственно для температур $\eta = 0,001$; $\eta = 0,03$.
- Рис.5 Графики частотной плотности излучения электронов в каналах типа (1)-(2).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Кумахов М.А. Излучение каналированных частиц в кристаллах. М.: Энергоиздат, 1986, с.160.
2. Высоцкий В.И., Кузьмин Р.Н., Максута Н.В. О возможности аномального каналирования электронов в ионных кристаллах. Тезисы докладов XVI Всесоюзного совещания по физике заряженных частиц с кристаллами. Изд-во МГУ, 1986, с.57.
3. Линдхардт И. Влияние кристаллической решетки на движение быстрых заряженных частиц. УФН, 1969, т.95, вып.2, с.249-296.
4. Gemell D.S., Channeling and related effects in the motion of charged particles through crystals.- Rev.Mod.Phys., 1974, vol.46, p.129.
5. Moliere G., Theori der strahlung schneller gehender teilchen.- Z.Naturforsch, 1947, Bd.2a, S.133.
6. Гамбош П. Статистическая теория атома и её применение. М.: ИЛ, 1951, с.398.
7. Jensen H. Zs.f.Phys., 1932, vol.77, p.722.
Lenz W. Zs. f.Phys., 1932, vol.77, p.713.
Slater J.C. Phys.Rev., 1930, vol.36, p.57.
8. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Статистическая физика. М.:Наука, 1976, т.5, с.583.
9. Тер-Микаелян М.Л. Влияние среды на электромагнитные процессы при высоких энергиях. Ереван, 1969, с.457.
10. Киттель Ч. Введение в физику твердого тела. М.: Наука, 1978, с.791.

11. Прудников А.П., Бричков Ю.А., Маричев О.И. Интегралы и ряды (элементарные функции). М.: Наука, 1981, т.1, с.798.
12. Корхмазян Н.А. Некоторые вопросы ондуляторного излучения. Изв. АН АрмССР. Физика, 1973, т.8, с.405-411.
13. Андрианов В.А., Капитонов В.С., Попов В.Н. Функциональный подход к выводу эффективного взаимодействия электронов в теории простых металлов. ЛОМИ, 1983, т.131, с.3-13.
14. Ястребов Л.И., Канцельсон А.А. Основы одноэлектронной теории твердого тела. М.: Наука, 1981, с.320.

Рукопись поступила 22 января 1986 г.

А.С.ГЕВОРКЯН, Н.Н.КОРХМАЗЯН, Г.Г.МЕЛИКЯН

ИЗЛУЧЕНИЕ ПРИ ПЛОСКОСТНОМ КАНАЛИРОВАНИИ ЛЕГКИХ ЧАСТИЦ В
ИОННЫХ КРИСТАЛЛАХ ТИПА CsCl

Редактор Л.Н.Мукаян

Технический редактор А.С.Абрамян

Подписано в печать 27/IV-88г. ВФ-03069 Формат 60x84/16
Офсетная печать. Уч.изд.л.1,5 Тираж 299 экз.П.23 к.
Зак.тип, № 201 Индекс 3624

Отпечатано в Ереванском физическом институте
Ереван 36, Маркаряна 2

The address for requests:
Information Department
Yerevan Physics Institute
Markaryan St., 2
Yerevan, 375036
Armenia, USSR

индекс 3624



ЕРЕВАНСКИЙ ФИЗИЧЕСКИЙ ИНСТИТУТ