

05; 10

© 1990 г.

КРИТЕРИЙ ПЛОСКОСТНОГО КАНАЛИРОВАНИЯ В СЛОИСТЫХ СТРУКТУРАХ

М. И. Файнгольд

Развит простой способ описания рассеивающих свойств слоистой структуры с помощью одного безразмерного параметра ζ , являющегося «сквозной» характеристикой брэгговской дифракции и плоскостного каналирования. Величина ζ зависит от периода структуры, а также от ширины барьера (или ямы) и максимального перепада потенциального рельефа в пределах периода. По отношению к ζ режимы брэгговской дифракции и каналирования антагонистичны: первый выражен при $\zeta \ll 1$, второй — при $\zeta \gg 1$. Таким образом, величина ζ определяет, какой из режимов возникнет при прохождении данных частиц через рассматриваемую структуру. Рассмотрен промежуточный режим, отвечающий значениям $\zeta \approx 1$.

Введение

Эффекты брэгговской дифракции и каналирования в монокристаллах обычно рассматриваются независимо друг от друга. Это связано, в частности, с тем, что главные характерные особенности каналирования могут быть поняты в рамках чисто классического рассмотрения [1, 2]. Последовательная квантовая теория эффекта каналирования (с учетом сопутствующих неупругих процессов) была развита в работах [3, 4]. В [5, 6] режимы брэгговской дифракции и плоскостного каналирования были рассмотрены как разные предельные случаи прохождения частиц через пространственно-периодическую систему. Там же введен параметр, значение которого позволяет определить, какой из режимов может быть реализован при прохождении частиц через рассматриваемую систему. Проведенный анализ показал, в частности, возможность каналирования нейтральных частиц, но не в обычных кристаллах, а в длиннопериодных слоистых структурах.

В данной работе режимы брэгговской дифракции и плоскостного каналирования рассмотрены в рамках одного подхода. На модели Кронига—Пенни получено простое описание промежуточной области, дающее картину непрерывного перехода между обоими режимами. При этом обобщается полученный в [5, 6] критерий каналирования, который оказывается зависящим не только от периода и глубины модуляции потенциала, но и от ширины каналов. Выявлена простая связь между обобщенным критерием каналирования и зонной структурой системы. Получена также простая формула, количественно описывающая предсказанное в [3] уменьшение классического угла каналирования за счет квантовых эффектов.

Параметр слоистости

Пусть частица с массой M и энергией E падает на периодическую структуру под углом скольжения θ к отражающим слоям (или атомным плоскостям). Характер движения частицы в структуре зависит, помимо величины θ еще от отношения между брэгговским углом

$$\sin \theta_B^{(1)} = \frac{\pi}{ak} \quad (1)$$

и углом каналирования

$$\sin \theta_c = \frac{k_1}{k} = \left(\frac{U_0}{E} \right)^{1/2}. \quad (2)$$

Здесь $k = \sqrt{2ME}/\hbar$, a — период структуры, U_0 — высота усредненного по плоскости потенциального барьера между соседними каналами (для определенности рассматривается нерелятивистский случай; обобщение на релятивистскую область не изменит основных результатов).

При рассмотрении каналирования обычно пренебрегают прозрачностью барьеров U_0 . Между тем для частиц с поперечной энергией $E_{\perp}^{(n)} \ll U_0$ подбарьерное туннелирование может оказаться существенным. Это обстоятельство, как отмечено в [3], должно приводить к эффективному уменьшению угла θ_c : $\theta_c \Rightarrow \bar{\theta}_c < \theta_c$. Сильное подбарьерное туннелирование поперек слоев возможно даже при $E_{\perp}^{(n)} \ll U_0$ (см. ниже). В этом случае может наблюдаться полное исчезновение режима каналирования, несмотря на существование отличной от нуля величины θ_c и выполнение начального условия $\theta < \theta_c$.

Возникает вопрос, каким дополнительным требованиям должна удовлетворять система (частица + слоистая структура), чтобы могло возникнуть каналирование. Ответ, данный в [5, 6], состоит в рассмотрении параметра

$$\zeta \equiv \frac{\pi}{\sqrt{2}} \frac{\sin \theta_c}{\sin \theta_{\text{B}}^{(1)}} = \frac{a}{\hbar} \sqrt{MU_0}, \quad (3)$$

не зависящего явно от E . Величина ζ определяет, какой из эффектов возможен в данной системе. Если $\zeta \gg 1$, то в системе возможно каналирование (при $\theta < \theta_c$). Если $\zeta \ll 1$, то каналирование невозможно, зато (при $\theta \rightarrow \theta_{\text{B}}^{(n)}$) могут четко наблюдаться первый и последующий порядки дифракции.

Введенный «критерий ζ » может быть получен прямо из первых принципов. Для каналированной частицы волновая функция $\Psi(x)$, где x — поперечное к слоям направление, локализована в области порядка a . Соответствующая неопределенность поперечного импульса $\Delta k_{\perp} \sim a^{-1}$. Из условия существования траектории $\Delta k_{\perp} \ll k_{\perp}$, т. е. $k\theta_c \gg 1/a$, следует $\zeta \gg 1$.

В приведенном рассуждении ширина канала a_1 принималась близкой к периоду « a », а для угла θ_c использовалось классическое выражение (2). Поэтому область применимости «критерия ζ » ограничена условиями $a_1 \ll a$, $D(E_{\perp}) \ll 1$ при $E_{\perp} < U_0$, где D — прозрачность барьера.

Ниже устанавливается более общий «критерий ζ », свободный от указанных ограничений. Рассмотрим для простоты слои, имеющие плоскость симметрии (это реализуется в большинстве случаев, имеющих практический интерес). Известно [7], что одномерная симметричная яма со сколь угодно малыми шириной a_1 и глубиной U_0 содержит по крайней мере один уровень

$$E_{\perp}^{(0)} = U_0 - \delta U_0, \quad \delta U_0 \approx \frac{1}{2} \frac{Ma_1^2 U_0^2}{\hbar^2}, \quad (4)$$

расположенный вблизи ее верха. В этом смысле в системе, содержащей только один канал, сколь бы узким и мелким он ни был, каналирование возможно всегда (см. также [8]). Но при достаточно малых a_1 и U_0 поперечная локализация частицы не ограничена шириной a_1 . Действительно, длина затухания x_1 волновой функции частицы вне ямы $\Psi(x) \sim \exp(-x/x_1)$, согласно (4), равна

$$x_1 = \frac{\hbar}{\sqrt{2M\delta U_0}} \approx \frac{\hbar^2}{Ma_1 U_0}, \quad \frac{x_1}{a_1} = \frac{1}{2} \frac{U_0}{\delta U_0} \gg 1. \quad (5)$$

Таким образом, частица с $E_{\perp} \approx U_0$, будучи связанной каналом, практически движется вне его.

В реальной структуре ямы чередуются с периодом $a = a_1 + a_2$, где a_2 — ширина барьеров. Теперь уровень $E_{\perp}^{(0)}$ проходит под вершинами барьеров, прозрачность которых определяется экспоненциальным фактором

$$\zeta^2 \equiv \frac{1}{\hbar} \int_0^{a_2} \sqrt{2M(U(x) - E_{\perp}^{(0)})} dx. \quad (6)$$

Предположим, что $U(x)$ — прямоугольная функция (модель Кронига—Пенни). В этом случае с помощью (3)—(5) получаем

$$\zeta^2 = \frac{a_2}{\hbar} \sqrt{2M\delta U_0} = \frac{a_2}{x_1} = \frac{MU_0 a_1 a_2}{\hbar^2} = \frac{a_1 a_2}{a^2} \zeta^2. \quad (7)$$

Величина параметра ζ определяет картину движения. Если $\zeta \gg 1$ ($a_2 \gg x_1$), то частица, связанная одной ямой, не «чувствует» соседних, так как проникаемость барьера и соответствующее уширение уровня $\delta E_{\perp}^{(0)} \sim D \sim \exp(-\zeta^2)$ экспоненциально малы. Каналирование возможно. Если же $\zeta \ll 1$ ($a_2 \ll x_1$), то соседние ямы размывают уровень $E_{\perp}^{(0)}$ в зону, частица эффективно туннелирует поперек слоев и каналирование невозможно. В новом «критерии ζ » параметр ζ уменьшен по сравнению с ζ в отношении $\sqrt{a_1 a_2/a}$, симметрично зависящим от a_1 и a_2 . Симметрия связана с тем, что при фиксированных a , U_0 сужение барьеров ($a_1 \rightarrow 0$) или ям ($a_2 \rightarrow 0$) в равной мере ускоряют поперечное туннелирование частицы: в первом случае — из-за повышения прозрачности барьера $D \rightarrow 1$, во втором — из-за описанного выше «выдавливания» уровня $E_{\perp}^{(0)} \Rightarrow U_0 - \delta U_0$ под самую вершину барьера ($\delta U_0 \rightarrow 0$). Запишем ζ в виде, допускающем возможное обобщение на каналы произвольного профиля. Определим средние по периоду высоту барьера и глубину ямы

$$\bar{U} = \frac{a_2}{a} U_0, \quad \bar{U} = \frac{a_1}{a} U_0, \quad (8)$$

а также эффективный перепад потенциала (рельефность)

$$\bar{U}_0 \equiv \frac{\bar{U} \bar{U}}{U_0} = \frac{a_1 a_2}{a^2} U_0. \quad (9)$$

Тогда параметр ζ определяется произведением

$$\zeta^2 = \frac{\bar{U} \bar{U}}{U_0^2} \zeta^2 = \frac{Ma^2}{\hbar^2} \bar{U}_0 = \frac{\pi^2}{2} \frac{\sin^2 \bar{\theta}_c}{\sin^2 \theta_c^{(1)}}, \quad (10)$$

где

$$\sin \bar{\theta}_c = \left(\frac{\bar{U}_0}{E} \right)^{1/2} = \frac{\sqrt{a_1 a_2}}{a} \sin \theta_c. \quad (11)$$

При этом зависимость ζ ($\bar{\theta}_c$) оказывается такой же, как ζ (θ_c) в (3). Угол $\bar{\theta}_c$ может быть назван эффективным углом каналирования, а формула (11) количественно описывает его уменьшение по сравнению с θ_c , предсказанное в [9]. Существенное отличие $\bar{\theta}_c$ от θ_c (равно, как и ζ от ζ) должно наблюдаться при $a_j/a \ll 1$, $j=1, 2$. Такая ситуация может реализоваться, например, при плоскостном каналировании электронов или позитронов в кристаллах, для которых ширина соответствующей ямы (или барьера) может быть на порядок меньше периода [9]. Например, при каналировании электронов в Si вдоль плоскости 110 имеем $a=5.43 \text{ \AA}$, томас-фермиевский радиус экранирования $r_0 \approx 0.3 \text{ \AA}$, так что $a_1 \approx 2r_0 = 0.6 \text{ \AA}$ [10] и $a_1/a \approx 0.1$. Это справедливо и для позитронов с заменой $a_1 \rightarrow a_2$ [9]. Поэтому в данном случае должно быть $\bar{\theta}_c \approx 1/3 \theta_c$.

Модель гребенчатого потенциала

Формулы (7), (11) получены в предположении, что в исходной яме имеется лишь один мелкий уровень. Покажем, что в интересующих нас случаях $a_j/a \ll 1$ они верны независимо от числа возможных уровней. Рассмотрим точную дисперсионную зависимость между E_{\perp} и поперечным квазиимпульсом x для потенциала Кронига—Пенни (при $E_{\perp} < U_0$)

$$\cos ax = \cos a_1 k_{\perp} \cdot \operatorname{ch} a_2 \sqrt{k_0^2 - k_{\perp}^2} + \frac{1}{2} \frac{k_0^2 - 2k_1}{k_{\perp} \sqrt{k_0^2 - k_{\perp}^2}} \sin a_1 k_{\perp} \operatorname{sh} a_2 \sqrt{k_0^2 - k_{\perp}^2}, \quad (12)$$

где

$$k_0 \equiv \frac{\sqrt{2MU_0}}{\hbar}, \quad k_{\perp} \equiv \frac{\sqrt{2M|E_{\perp}|}}{\hbar}. \quad (13)$$

Пусть $a_2 \rightarrow 0$, $U_0 \rightarrow \infty$ так, что средняя высота барьера (8) остается постоянной. Тогда средняя глубина соответствующей ямы $\bar{U} = (a_1/a) U_0 \rightarrow U_0 \rightarrow \infty$ и (9) дает $\bar{U}_0 = \bar{U} = \text{const}$. Согласно (10), параметр ζ при этом должен быть равен

$$\zeta^2 = \frac{Ma^2}{\hbar^2} \bar{U} = \frac{Ma a_2}{\hbar^2} U_0. \quad (10a)$$

Переходя в (12) к пределу $a_2 \rightarrow 0$, $\bar{U} = \text{const}$, получаем

$$\cos ax = \cos ak_{\perp} + \zeta^2 \frac{\sin ak_{\perp}}{ak_{\perp}}, \quad (14)$$

где параметр ζ совпадает с (10a).

Аналогичный предельный переход к δ -образным ямам при $(a_1 U_0)/a = \bar{U} = \text{const}$ приводит к соотношениям

$$\cos ax = \begin{cases} \cos ak_{\perp} - \zeta^2 \frac{\sin ak_{\perp}}{ak_{\perp}}, & E_{\perp} > 0, \\ \operatorname{ch} ak_{\perp} - \zeta^2 \frac{\operatorname{sh} ak_{\perp}}{ak_{\perp}}, & E_{\perp} < 0, \end{cases} \quad (15a, б)$$

где

$$\zeta^2 \equiv \frac{Maa_1}{\hbar^2} U_0 = \frac{Ma^2}{\hbar^2} \bar{U}. \quad (10б)$$

Таким образом, параметр ζ , полученный выше путем нестрогих рассуждений, естественным образом появляется из основных уравнений. При этом в рассматриваемых случаях $a_j/a \rightarrow 0$ область применимости выражений (7), (11) практически неограничена.

Переход между режимами брэгговской дифракции и каналирования

Выделение в явном виде параметра слоистости ζ в дисперсионном уравнении позволяет проследить зависимость решения от ζ . Чтобы избежать усложнений, связанных с необходимостью различать состояния с $E_{\perp} > 0$ и $E_{\perp} < 0$ в системах, ограничимся здесь случаем δ -образных барьеров. Рассмотрение сводится к графическому анализу уравнения (14). Решение соответствующей задачи хорошо известно (см., например, [11, 12]). Для получения интересных результатов необходимо добавить составляющую движения частиц вдоль плоскостей и использовать подходящие граничные условия, одинаковые для всех значений ζ . Картина оказывается проще при выборе геометрии Брэгга. Она отвечает рассмотрению дифракции частиц на стопке плоскостей методом Дарвина [13]. В случае каналирования это соответствует вводу частиц в структуру не через торцевые сечения каналов, как обычно принято, а через грань образца, параллельную отражающим слоям. При таком способе в систему проникнет лишь незначительная часть пучка, но зато можно при надлежащей коллимации последнего избирательно заселить только одну моду (поперечный уровень). Тип возникающего при этом каналирования можно назвать приповерхностным каналированием [14].

Переход между обоими режимами может быть описан следующим образом.

1. При $\zeta \ll 1$ уравнение (14) имеет решение всюду, кроме правых окрестностей точек $ak_{\perp}^{(j)} = (\pi/a)j$, $j=0, \pm 1, \pm 2; \dots$, соответствующих брэгговским рефлексам

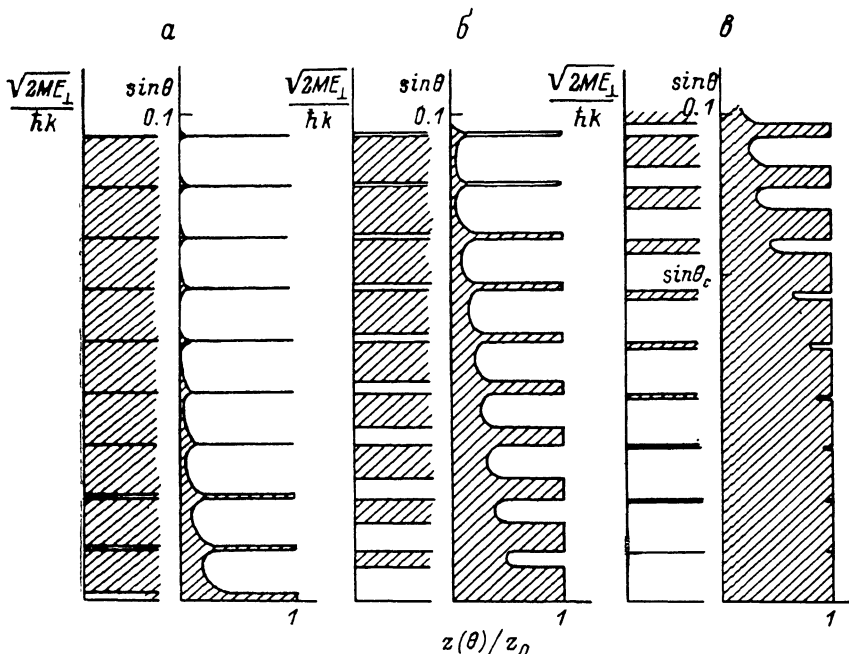
$$\sin \theta_B^{(j)} = \frac{k_{\perp}^{(j)}}{k} = \frac{\pi}{ak} j \quad (15)$$

$$\delta\theta_{\text{B}}^{(j)} = \begin{cases} \bar{\theta}_c \approx \frac{\sqrt{2}}{\pi} \bar{\zeta} \cdot \theta_{\text{B}}^{(1)}, & j=0, \\ 2 \frac{\bar{\theta}_c^2}{\sin 2\theta_{\text{B}}^{(j)}} = \frac{2}{\pi^2 j} \frac{\sin \theta_{\text{B}}^{(1)}}{\cos \theta_{\text{B}}^{(j)}} \bar{\zeta}^2, & j \neq 0. \end{cases} \quad (16a, б)$$

Ширины соответствующих запрещенных зон

$$\delta E_{\perp}^{(j)} = \frac{\hbar^2}{M} \left\{ \frac{1}{2} (\delta k_{\perp}^{(0)})^2 \right\} = \frac{\hbar^2}{M a^2} \bar{\zeta}^2 \begin{cases} 1 & j=0 \\ 2 & j \neq 0 \end{cases} \quad (17a, б)$$

весьма малы в силу малости $\bar{\zeta}$. Разрешенные значения E_{\perp} образуют широкие зоны (см. рисунок, а). Таким образом, квазидискретных разрешенных уровней



Зонный спектр и коэффициент отражения для структуры с гребенчатым потенциалом. $\alpha - \bar{\zeta} \ll 1$, $\beta - \bar{\zeta} \approx 1$, $\epsilon - \bar{\zeta} \gg 1$. На графиках зонных спектров по вертикали отложена величина $E_{\perp}^{1/2}$ (с масштабным множителем $E^{-1/2} = \sqrt{2M}/(\hbar k)$). Зоны разрешенных E_{\perp} заштрихованы. На графиках коэффициента отражения значения последнего (вычисленные без учета поглощения) отложены по горизонтали. α — ширина 1-го максимума $R(\theta)$ совпадает с $\bar{\theta}_c$, ϵ — наглядно видно, что условие каналирования ($\theta < \bar{\theta}_c$) не является пороговым.

в такой системе нет и каналирование невозможно. Величина $\bar{\theta}_c$ в этом случае, как видно из (16а), характеризует ширину рефлекса нулевого порядка и имеет смысл угла полного отражения от всей системы барьеров в полном согласии с ее квантомеханическим обобщением (11).

2. В системах с $\bar{\zeta} \approx 1$ угловой спектр отраженных частиц размыт вследствие уширения рефлексов (и отвечающих им запрещенных зон) в соответствии с формулами (16), (17). Рефлекс нулевого порядка заполняет большую часть угловой области $(0, \theta_{\text{B}}^{(1)})$, так что его ширина $\delta\theta_{\text{B}}^{(0)} \leq \theta_{\text{B}}^{(1)}$. Ширины высших рефлексов растут с увеличением $\bar{\zeta}$ быстрее, чем ширина $\delta\theta_{\text{B}}^{(0)}$. В целом картина представляет собою широкие области полного отражения, чередующиеся с более узкими областями прозрачности, которые ограничены сверху брэгговскими значениями $\theta_{\text{B}}^{(j)}$, $j=1, 2, 3, \dots$ (см. рисунок, б).

Поскольку области прозрачности отвечают разрешенным зонам $E_{\perp}^{(j)}$, то их сужение означает начало перехода к квазидискретным уровням $E_{\perp}^{(j)}$, характерным для каналирования.

3. При $\zeta \gg 1$ ситуация обратна по отношению к изображенной на рисунке, *a*. Низшие разрешенные зоны вырождаются в квазидискретный энергетический спектр $E_{\perp}^{(j)}$. Картина брэгговской дифракции в соответствующих порядках полностью нарушена. Брэгговские значения $\theta_{\text{Б}}^{(j)}$ имеют смысл углов, вблизи которых заселяются уровни $E_{\perp}^{(j)}$, благодаря чему в угловом спектре отражения возникают узкие провалы (см. рисунок, *e*). Ширина соответствующих уровней (ср. [14])

$$\delta E_{\perp}^{(j)} \simeq \frac{\hbar^2}{Ma^2} ak_{\perp} \delta ak_{\perp} = 2\pi^2 \frac{\hbar^2}{Ma^2} \frac{j^2}{\xi^2 + 2}, \quad j \ll \frac{\xi^2}{2\pi}. \quad (18)$$

На уровнях (18) скорость $v_d^{(j)}$ поперечного дрейфа частиц через барьеры много меньше скорости $v_{\perp}^{(j)} = (\hbar k_{\perp}^{(j)})/M = (\hbar/Ma) \pi j$ их колебаний между соседними барьерами. Действительно, v_d определяется средней по периоду групповой скоростью $v_{\text{гп}} = (1/\hbar) (dE_{\perp}^{(j)}/dk_{\perp})$. Так как период квазимпульса $\hbar k$ совпадает с $\pi\hbar/a$, то в силу (18)

$$v_d^{(j)} \simeq \frac{a}{\pi\hbar} \delta E_{\perp}^{(j)} \simeq 2\pi \frac{\hbar}{Ma} \frac{j^2}{\xi^2} = 2 \frac{v_{\perp}^{(j)} \cdot j}{\xi^2} \ll v_{\perp}^{(j)}. \quad (19)$$

Это значит, что на уровнях $E_{\perp}^{(j)}$ с $j \ll \xi^2/2\pi$ частица долго удерживается между соседними барьерами, успевая за время жизни в канале совершить много поперечных колебаний, т. е. налицо ярко выраженное каналирование.

По мере роста j энергии $E_{\perp}^{(j)}$ становятся больше определенной в (8) средней высоты барьеров, что в силу (8)–(11) означает

$$k_{\perp} > \frac{\sqrt{2}}{a} \xi, \quad \sin \theta > \frac{\sqrt{2}}{ak} \xi = \frac{\sqrt{2}}{\pi} \sin \theta_{\text{Б}}^{(1)} \xi = \sin \bar{\theta}_c. \quad (20)$$

При этом уширение уровней уже немалó и не описывается формулой (18) (исследованные в [3] надбарьерные уровни, естественно, отсутствуют в системе с δ -видными барьерами).

Квантовое число $j = j_c$, при котором становится $E_{\perp}^{(j)} \geq \bar{U}$, определяется из условия $\sin \theta_{\text{Б}}^{(j_c)} > \sin \bar{\theta}_c$ и в силу (10) равно

$$j_c \equiv \frac{\sin \theta_{\text{Б}}^{(j_c)}}{\sin \theta_{\text{Б}}^{(1)}} = \left[\frac{\sin \bar{\theta}_c}{\sin \theta_{\text{Б}}^{(1)}} \right] = \left[\frac{2}{\sqrt{\pi}} \xi \right], \quad (21)$$

где $[x]$ означает целую часть x .

Таким образом, параметр системы ξ определяет наибольшее возможное в данной системе число различных каналированных состояний. Отсюда ясен весьма прозрачный смысл условия $\xi \gg 1$ возможности каналирования. При достаточно больших $\theta/\theta_c > 1$ разрешенные зоны шире запрещенных и картина снова, как на рисунке, *a*, отвечает высоким порядкам брэгговской дифракции $j > j_c$. Следовательно, если энергия падающих частиц столь велика, что высокие порядки дифракции могут реализоваться, то последняя не полностью исключается условием $\xi \gg 1$. В угловом спектре отражения наряду с описанной выше областью $\theta < \theta_c$ полного отражения (с узкими провалами) могут наблюдаться при $\theta > \theta_c$ узкие брэгговские рефлексы (хотя экспериментальное наблюдение такой «остаточной» дифракции возможно лишь при весьма специальных условиях).

Подчеркнем еще раз, что в использованной здесь геометрии Брэгга (при $\xi \gg 1$) состояния каналирования реализуются только вблизи дискретных значений $\theta_{\text{Б}}^{(j)} < \bar{\theta}_c$, в отличие от обычной схемы, приводящей к каналированию при всех $\theta < \bar{\theta}_c$.

Таким образом, с помощью введенного параметра слоистости можно по крайней мере для некоторых достаточно простых структур единым образом описать режимы брэгговской дифракции и плоскостного каналирования, равно как и непрерывный переход между ними. Полученные формулы, связывающие ξ со свойствами решетки и числом квазидискретных уровней, позволяют получать простые оценки параметров искусственных слоистых структур, необходимых для реализации выбранных режимов движения данных частиц.

Критерий каналирования для заряженных частиц

Приведенные выше результаты получены для модели Кронига—Пенни, часто используемой для описания гетерогенных слоистых структур. Возникает вопрос, применимы ли эти результаты к каналированию заряженных частиц в монокристаллах, где аппроксимация взаимодействия прямоугольным потенциалом не всегда пригодна. Для выяснения этого вопроса рассмотрим потенциал Пешля—Теллера, позволяющий адекватно аппроксимировать взаимодействие быстрого электрона с атомной плоскостью [9, 15-17],

$$U = -U_0/c\hbar^2 (2x/a_1), \quad |x| \leq \frac{1}{2} a_1 \quad (22)$$

Здесь U_0 — глубина ямы; a_1 — ее ширина, равная по порядку величины радиусу экранирования Томаса—Ферми [17]. При $U_0 < 0$ потенциал (22) описывает плоскостной барьер для позитронов. Периодическое продолжение функции (22)

$$U(x + an) = U(x), \quad n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots \quad (23)$$

дает непрерывный потенциал, с хорошей точностью описывающий взаимодействие заряженной частицы с системой плотноупакованных атомных плоскостей кристалла.

Достоинством модели (22) является ее реалистичность в сочетании с возможностью получения аналитических решений в виде хорошо изученных гипергеометрических функций [7, 16]. В случае (23) необходимо дополнительно потребовать, чтобы волновая функция частицы удовлетворяла условию Блоха

$$\Psi(x) = e^{i\pi x} \cdot \varphi(x), \quad \varphi(x + an) = \varphi(x)$$

и условиям непрерывности для Ψ и $(d\Psi)/(dx)$ на границах области $[-(1/2)a, 1/2 a]$. Эти требования приводят к дисперсионному уравнению, которое для интересующего нас случая $a_1 \ll a$ имеет вид

$$2 \cos ax = \varepsilon \left[\frac{\Gamma^2(\varepsilon)}{\Gamma(\varepsilon - s)\Gamma(\varepsilon + s + 1)} e^{2\varepsilon\delta} + \frac{\Gamma^2(-\varepsilon)}{\Gamma(-\varepsilon - s)\Gamma(s - \varepsilon + 1)} e^{-2\varepsilon\delta} \right]. \quad (24)$$

Здесь

$$\varepsilon \equiv \frac{1}{2} \begin{cases} ia_1 k_{\perp}, & E_{\perp} > 0, \\ a_1 |k_{\perp}|, & E_{\perp} < 0, \end{cases}$$

$$s \equiv \frac{1}{2} \left(\sqrt{1 + 2 \frac{Ma_1^2}{\hbar^2} U_0} - 1 \right), \quad \delta \equiv \frac{a}{a_1},$$

$\Gamma(z)$ — интеграл Эйлера.

Пусть теперь, как и в случае (17)–(15), одновременно $a_1 \rightarrow 0$ и $|U_0| \rightarrow \infty$, так что $a_1|U_0| = \text{const}$. Тогда $s \rightarrow (1/2) Ma_1^2 U_0 / \hbar^2 \rightarrow 0$ и $\Gamma(z+s) \approx \Gamma(z) + \Gamma'(z) \cdot s$. Используя свойства производных от Γ -функций [18], нетрудно убедиться, что уравнение (24) приводится к виду

$$\cos ax = \begin{cases} \cos ak_{\perp} - \frac{Ma_1 U_0}{\hbar^2} \frac{\sin ak_{\perp}}{ak_{\perp}}, & E_{\perp} > 0, \\ \text{ch } a|k_{\perp}| - \frac{Ma_1 U_0}{\hbar^2} \frac{\text{sh } a|k_{\perp}|}{a|k_{\perp}|}, & E_{\perp} < 0. \end{cases} \quad (25a, б)$$

Применяя к (25) определения (3), (7), где под a_1 теперь следует понимать соответствующую эффективную ширину барьера (или ямы), видим, что полученное соотношение (25) для потенциала Пешля—Теллера тождественно уравнениям (14), (15) для модели Кронига—Пенни. Следовательно, вид дисперсионного уравнения по крайней мере для практически важного случая $a_1 \ll a$ нечувствителен к выбору модели взаимодействия. Поэтому все результаты, полученные выше для гетерогенных слоистых структур, сохраняют силу и для прохождения заряженных частиц через монокристаллы. На основе соображений непрерывности следует ожидать, что с точностью до a_1/a эти результаты сохраняются

при любом профиле потенциала (без учета мелкомасштабных модуляций внутри периода), поскольку одна из ширин a_1 или a_2 всегда $\leq 1/2a$. Одной из причин слабой чувствительности критерия каналирования к виду $U(x)$ (и даже к наличию скачков потенциала) является, как видно из определения (6), интегральный характер параметра ξ . Вторая причина связана с периодичностью потенциала, влияние которой на режим перехода от каналирования к брэгговской дифракции оказывается сильнее, чем влияние вида $U(x)$ внутри периода. Оба эти обстоятельства позволяют во многих случаях определять значение ξ без знания детального хода кривой $U(x)$.

Как отмечалось выше, все полученные соотношения могут применяться и к движению релятивистских частиц. Для этого во всех формулах надо лишь заменить массу частицы M на γM , где $\gamma = E/Mc^2$ — лоренц-фактор. В частности, параметр ξ примет вид $\xi = \sqrt{a_1 a_2 \gamma M U_0} / \hbar$. Однако в этом случае величина ξ будет зависеть уже не только от свойств структуры, но и от энергии частицы. Поэтому использованный выше термин «параметр слоистости» можно применять лишь для медленных частиц, когда $\gamma \rightarrow 1$ и $\xi \approx \text{const}$.

Список литературы

- [1] Lindhard J. // Phys. Lett. 1964. Vol. 12. P. 126.
- [2] Erginsoy C. // Phys. Rev. Lett. 1965. Vol. 15. P. 360.
- [3] Каган Ю., Кононец Ю. В. // ЖЭТФ. 1970. Т. 58. Вып. 1. С. 226—244.
- [4] Каган Ю., Кононец Ю. В. // ЖЭТФ. 1973. Т. 64. Вып. 3. С. 1042—1064.
- [5] Vinetsky V. L., Faingold M. I. // Sol. St. Com. 1981. Vol. 40. P. 713.
- [6] Винецкий В. Л., Файнгольд М. И. // УФЖ. 1984. Т. 29. № 11. С. 1628—1631.
- [7] Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М. // Квантовая механика. М.: Физматгиз, 1963. 629 с.
- [8] Файнгольд М. И. // ТМФ. 1988. Т. 77. № 1. С. 118—126.
- [9] Калашников Н. П., Стриханов М. Н. // Квантовая электрон. 1981. Т. 8. № 11. С. 2293—2320.
- [10] Swent R. L., Pantell R. H., Alguard M. J. et al. // Phys. Rev. Lett. 1979. Vol. 43. P. 1723.
- [11] Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М. Статистическая физика. Ч. 2. § 55. М. Наука, 1978. 447 с.
- [12] Вонсовский С. В., Кацнельсон М. И. Квантовая физика твердого тела. Гл. 4. М. Наука, 1983. 336 с.
- [13] Джеймс Р. Оптические принципы дифракции рентгеновских лучей. М.: ИЛ, 1950. 573 с.
- [14] Винецкий В. Л., Файнгольд М. И. // УФЖ. 1987. Т. 32. № 12. С. 1842—1848.
- [15] Жеваго Н. К. // ЖЭТФ. 1978. Т. 75. Вып. 4 (10). С. 1389—1400.
- [16] Каган Ю., Мамонтов Ю. В. // Phys. Lett. 1979. Vol. 72A. N 3. P. 247.
- [17] Хлабутин В. Г., Пивоваров Ю. Л. // ЖТФ. 1981. Т. 51. Вып. 11. С. 2392—2394.
- [18] Градштейн И. С., Рыжик И. М. Таблицы интегралов, сумм, рядов и произведений. М.: Физматгиз, 1962. 1100 с.

Институт технической теплофизики АН УССР
 Отделение теплообменных
 процессов и устройств
 Киев

Поступило в Редакцию
 16 марта 1989 г.
 В окончательной редакции
 14 июня 1990 г.