

01

## Квантовое стохастическое уравнение эволюции поперечной энергии каналированных частиц

© В.П. Кошечев

Сургутский государственный университет  
E-mail: koscheev@surgu.wsnet.ru

Поступило в Редакцию 26 сентября 2001 г.

Стохастическое уравнение эволюции  $n$ -го квантового уровня энергии релятивистских электронов (позитронов), движущихся в плоскостных каналах кристалла, построено исходя из закона сохранения энергии поперечного движения, в которую входит энергия взаимодействия с атомными электронами и ядрами кристалла.

В [1] было построено стохастическое уравнение эволюции поперечной энергии каналированных частиц исходя из условия несохранения адиабатического инварианта.

Цель настоящей статьи составляет построение стохастического уравнения эволюции поперечной энергии  $n$ -го квантового состояния релятивистских электронов (позитронов), движущихся в плоскостных каналах кристалла.

Движение каналированных частиц происходит в электрическом потенциале кристалла, который складывается из кулоновских потенциалов атомных ядер, расположенных в узлах кристаллической решетки, и кулоновских потенциалов атомных электронов

$$U(r) = \sum_n \left( \frac{Ze^2}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}_n|} - \sum_{j=1}^Z \frac{e^2}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}_{nj}|} \right), \quad (1)$$

где  $Ze$  — заряд атомного ядра;  $\mathbf{r}_n = \mathbf{r}_{n0} + \delta\mathbf{r}_n$ ; вектор  $\delta\mathbf{r}_n$  определяет положение атомного ядра, смещенного из узла кристаллической решетки благодаря тепловым колебаниям;  $\mathbf{r}_{nj} = \mathbf{r}_{n0} + \delta\mathbf{r}_n + \delta\mathbf{r}_{nj}$ ; вектор  $\delta\mathbf{r}_{nj}$  определяет положение  $j$ -го электрона по отношению к положению  $n$ -го атомного ядра. Вектор  $\mathbf{r}_{n0}$  определяет положение  $n$ -го узла кристаллической решетки.

Усреднение по независимым тепловым колебаниям атомов кристалла осуществляется с помощью функции распределения Гаусса. Усреднение по квантовым флуктуациям местоположения атомных электронов осуществляется с помощью метода [2], который Бете использовал для вычисления атомного форм-фактора. Эти усреднения производятся по координатам всех ядер и электронов и обозначаются символами  $\langle \dots \rangle_T$  и  $\langle \dots \rangle_e$  соответственно. Потенциал кристалла может быть представлен в виде

$$U(r) = \bar{U} + \delta U_z(r) + \delta U(r), \quad (2)$$

где  $\bar{U} = \bar{U}(x)$  — непрерывный потенциал плоскостного канала кристалла, усредненный по тепловым колебаниям атомов;  $\delta U_z(r) = \langle U \rangle_{e,T} - \bar{U}$  — поправка к непрерывному потенциалу, связанная с дискретностью расположения атомов в плоскости, которая не является источником флуктуаций;  $\delta U(r) = U(r) - \langle U \rangle_{e,T}$  — флуктуация потенциала, вызванная тепловыми колебаниями атомных ядер и квантовыми флуктуациями местоположения атомных электронов.

Гамильтониан, описывающий процесс взаимодействия релятивистских электронов (позитронов) с кристаллом, имеет вид

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + U(r) + \hat{H}_{crist.}, \quad (3)$$

где  $\hat{p}^2/2m$  — оператор кинетической энергии, а  $U(r)$  — оператор потенциальной энергии взаимодействия релятивистских электронов (позитронов) с кристаллом;  $\hat{H}_{crist.}$  — гамильтониан кристалла, включающий в себя кинетические и потенциальные энергии всех атомных электронов и ядер. Гамильтониан (3) описывает замкнутую систему, энергия которой сохраняется, так как потери энергии на излучение незначительны для релятивистских электронов (позитронов) с энергиями до одного гигаэлектрон-вольта [3]. Известно [4], что полная производная по времени от гамильтониана замкнутой системы равна нулю

$$\frac{d\hat{H}}{dt} = 0. \quad (4)$$

При малоугловом, упругом рассеянии остаются постоянными продольная составляющая кинетической энергии каналированных частиц и энергия кристалла

$$\frac{d}{dt} \frac{\hat{p}_y^2}{2m} = \frac{d}{dt} \frac{\hat{p}_z^2}{2m} = \frac{d\hat{H}_{cryst.}}{dt} = 0. \quad (5)$$

Плоскость  $YOZ$  декартовой системы координат лежит в одной из кристаллографических плоскостей, а ось  $OY$  направлена вдоль одной из атомных цепочек, составляющих данную кристаллографическую плоскость. В режиме плоскостного каналирования быстрые заряженные частицы должны совершать движение под большим углом к атомным цепочкам, из которых состоит кристаллографическая плоскость. Таким образом, продольная составляющая кинетической энергии должна состоять из двух равновеликих компонент, лежащих в плоскости  $YOZ$ , что учтено в (5). С помощью формул (2) и (5) перепишем уравнение (4) в следующем виде:

$$\frac{d\hat{H}_0}{dt} = -\frac{d\delta U}{dt}, \quad (6)$$

где  $\delta U = \delta U_z(r) + \delta U(r)$ ; гамильтониан, с помощью которого описывается движение в непрерывном потенциале атомных плоскостей, имеет вид

$$\hat{H}_0 = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \bar{U}(x).$$

Собственные волновые функции уравнения Шредингера

$$\hat{H}_0 \Psi_n = \varepsilon_n \Psi_n$$

будем искать в квазиклассическом приближении [4]

$$\Psi_n(x) = 2\sqrt{\frac{m}{p_n T}} \cos\left(\frac{1}{\hbar} \int_{x_1}^x p_n dx - \frac{\pi}{4}\right), \quad (7)$$

где  $p_n = \sqrt{2m[\varepsilon_n - \bar{U}(x)]}$ ; точки поворота классической траектории найдем из уравнения  $\bar{U}(x_{1,2}) = \varepsilon_n$ ;  $T = T(\varepsilon_n)$  — период колебаний каналированной частицы в плоскостном канале кристалла.

Усредним (6) с помощью волновых функций (7)

$$\frac{d\varepsilon_n}{dt} = -\frac{4m}{T(\varepsilon_n)} \int_{x_1}^{x_2} \frac{dx}{p_n} \frac{d\delta U}{dt} \cos^2 \left( \frac{1}{\hbar} \int_{x_1}^x p_n dx - \frac{\pi}{4} \right), \quad (8)$$

где  $d\varepsilon_n/dt$  — скорость изменения поперечной энергии  $n$ -го квантового состояния.

Уравнение (8) с точностью до обозначения  $\varepsilon_n \rightarrow \varepsilon$  совпадает с полученным ранее [1] в рамках классической механики результатом

$$\frac{d\varepsilon_n}{dt} = -\frac{2}{T(\varepsilon_n)} \{ \delta U[x_2(\varepsilon_n)] - \delta U[x_1(\varepsilon_n)] \}, \quad (9)$$

если воспользоваться тем же приближением

$$\cos^2 \left( \frac{1}{\hbar} \int_{x_1}^x p_n dx - \frac{\pi}{4} \right) \simeq \frac{1}{2},$$

$$p_n \simeq m \frac{dx}{dt},$$

с помощью которого нормируются квазиклассические волновые функции [4].

С помощью (9) можно построить квантовое кинетическое уравнение, описывающее эволюцию заселенности  $n$ -го квантового состояния, которое в точности совпадает с классическим кинетическим уравнением движения типа Фоккера–Планка. Из вышеизложенного следует, что вероятности заселенностей квантовых состояний эволюционируют независимо друг от друга и становятся неразличимы между собой, когда ширины квантовых уровней начинают превышать расстояние между ними.

## Список литературы

- [1] Кощев В.П. // Письма в ЖТФ. 2001. Т. 27. В. 18. С. 61–64.
- [2] Бете Г. Квантовая механика. М.: Мир, 1965. 333 с.
- [3] Кумахов М.А. Излучение каналированных частиц в кристаллах. М.: Энергоатомиздат, 1986. 161 с.
- [4] Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Квантовая механика. М.: Наука, 1974. 752 с.