

МЕТОД ЭКВИВАЛЕНТНЫХ ЯЧЕЕК

Н.А. КОРХМАЗЯН, Н.Н. КОРХМАЗЯН

Армянский государственный педагогический институт им. Х. Абовяна

(Поступила в редакцию 9 августа 1995 г.)

Развит новый метод расчета эффективных потенциалов, который позволяет выявить некоторые весьма важные особенности каналирования в ионных кристаллах. Получены потенциалы для объемноцентрированных и гранецентрированных кристаллов.

1. Потенциал объемноцентрированного кристалла

В настоящей работе разработан новый метод расчета эффективных потенциалов в ионных кристаллах, который приводит к более простым математическим выражениям для эффективных потенциалов, и, кроме того, позволяет выявить некоторые, весьма важные, с физической точки зрения, стороны явления каналирования в ионных кристаллах. Поэтому этот метод представляется более предпочтительным, чем предложенный ранее в работе [1].

Вычислим потенциал бесконечного объемноцентрированного кристалла с кубической симметрией (рис.1).

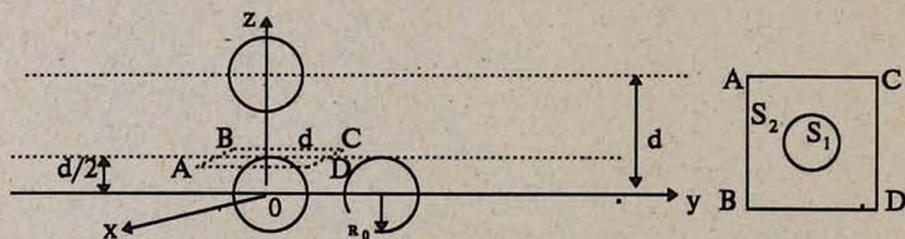


Рис.1. Усреднение потенциала по ячейке ABCD.

Поскольку кристаллическая решетка такого кристалла представляет собой две разноименные кубические подрешетки, смещенные друг относительно друга на вектор $\alpha = (d/2, d/2, d/2)$, мы проведем детальное вычисление только для положительной подрешетки кристалла. Совмещая начало координат с центром масс какого-либо положительного иона, мы получим для потенциала положительной подрешетки

$$\varphi^+(\mathbf{R}) = \varphi_0^+(\mathbf{R}) + \sum_{l \neq 0} \varphi^+(\mathbf{R} - l), \quad (1.1)$$

где $\varphi^+(\mathbf{R})$ — потенциал иона, находящегося в начале координат (в узле $l=0$), а бесконечная сумма представляет собой сумму потенциалов ионов, находящихся во всех остальных узлах положительной подрешетки при температуре кристалла $T=0$ К.

Для потенциала отрицательной подрешетки соответственно получим

$$\varphi^-(\mathbf{R}) = \varphi_0^-(\mathbf{R} - \alpha) + \sum_{l \neq 0} \varphi^-(\mathbf{R} - \alpha - l) \quad (1.2)$$

Пусть частица каналируется вдоль заряженной плоскости (x, y) . Ввиду того, что потенциал (1.1) является периодической функцией на плоскости с периодом d по обеим координатам, достаточно найти его среднее значение на квадрате ABCD, со стороной d (см. рис. 1). Этот квадрат находится на плоскости $z = \text{const}$, причем, в силу симметрии задачи, потенциал можно вычислять только для значений $0 \leq z \leq d/2$, поскольку потенциал во второй половине канала является зеркальным отображением потенциала в первой его половине.

Нетрудно заметить, что ни один положительный ион, кроме центрального, не пересекается с квадратом ABCD. Поэтому второе слагаемое в выражении (1.1) представляет собой сумму потенциалов точечных ионов. Что же касается иона, находящегося в узле $l=0$, то для него все точки пересечения с плоскостью $z = \text{const}$ являются внутренними. Поэтому потенциал, созданный этим ионом на квадрате ABCD, будет зависеть от плотности заряда внутри иона. Представим плотность заряда в виде [1]

$$\rho(\mathbf{r}) = \rho_{\text{нuc}} + \rho_{\text{el}} = |e| [z\delta(\mathbf{r}) - V(\mathbf{r})], \quad (1.3)$$

где $V(\mathbf{r}) = V(r)$ есть функция сферически симметричного распределения плотности электронного заряда [2], а z — число протонов в точечном ядре. Тогда для напряженности поля в точке \mathbf{R} имеем

$$\mathbf{E}(\mathbf{R}) = |e| \left[z \int_0^R \delta(\mathbf{r}) d\mathbf{r} - 4\pi \int_0^R V(r) r^2 dr \right] \frac{\mathbf{R}}{R^3} = |e| \frac{z - \chi}{R^2} \frac{\mathbf{R}}{R}, \quad (1.4)$$

$$\chi(R) = 4\pi \int_0^R V(r) r^2 dr$$

Спроектируем вектор \mathbf{E} на направление \mathbf{R} и воспользуемся соотношением $d\varphi = -E_R dR$. В результате получим

$$\varphi_0^+(\mathbf{R}) = \frac{|e| z^+}{R} - |e| \int_R^\infty \frac{\chi^+(R)}{R^2} dR; \quad \varphi_0^+(\infty) = 0. \quad (1.5)$$

Таким образом, с учетом формул (1.1), (1.2) и (1.5) для потенциала получим

$$\varphi^+(R) = \frac{|e| z^+}{R} - |e| \int_R^\infty \frac{\chi^+(R)}{R^2} dR + \sum_{l \neq 0} \frac{|e|}{|\mathbf{R} - \mathbf{l}|}, \quad (1.6)$$

$$\varphi^-(R) = \frac{|e| z^-}{|\mathbf{R} - \alpha|} - |e| \int_{|\mathbf{R} - \alpha|}^\infty \frac{\chi^-(R)}{R^2} dR - \sum_{l \neq 0} \frac{|e|}{|\mathbf{R} - \alpha - \mathbf{l}|}, \quad (1.7)$$

где функция $\chi(R)$ зависит от конкретного вида функции распределения плотности электронного заряда $V(r)$. Выберем в качестве таковой модель Иенсена [2]

$$V(r) = \frac{N}{A} \frac{e^{-x}}{x^3} (1 + Cx)^3; \quad x = \sqrt{\alpha r}; \quad \alpha = \xi z^{1/3} / a_0, \quad (1.8)$$

где N — число электронов в ионе, C и ξ — вариационные параметры, которые определяются из условия минимизации электронной системы, a_0 — радиус Бора. Величина A находится из условия нормировки функции $V(r)$:

$$A = \frac{8\pi}{\xi^3 z} a_0^3 P_c; \quad P_c = 120C^3 + 72C^2 + 18C + 2 \quad (1.9)$$

Тогда для функции $\chi(R)$ получим

$$\chi = \chi_0 (P_c - e^{-x_0} [C^3 x_0^5 + (5C^3 + 3C^2) x_0^4 + (20C^3 + 12C^2 + 3C) x_0^3 + (60C^3 + 36C^2 + 9C + 1) x_0^2 + P_c x_0 + P_c]) \quad (1.10)$$

$$x_0 = \sqrt{\alpha R}, \quad \chi_0 = \frac{8\pi}{\alpha^3} \frac{N}{A} = \frac{N}{P_c}$$

Для интеграла в выражении (1.6) с учетом формулы (1.10) получим

$$\int_R^{\infty} \frac{\chi^+(r) dr}{r^2} = \frac{N^+}{R} - \frac{N^+}{R} \Phi^+(R), \quad (1.11)$$

$$\Phi^+(R) = \frac{e^{-x}}{P_c} [2C^3 x_0^4 + (14C^3 + 6C^2)x_0^3 + (54C^3 + 30C^2 + 6C)x_0^2 + P_c x_0 + P_c]. \quad (1.12)$$

Таким образом, для функции $\Phi^+(R)$ с учетом (1.11)-(1.12) получим

$$\varphi^+(R) = \frac{|e|z^+}{R} - \frac{|e|N^+}{R} + \frac{|e|N^+}{R} \Phi^+(R) + \sum_{l \neq 0} \frac{|e|}{|R-l|}. \quad (1.13)$$

Первый член в этом выражении представляет собой потенциал ядра центрального иона с координатой $l=0$, последующие два члена описывают поле электронного облака этого иона, а последний член представляет собой суммарное поле всех остальных ионов кристаллической решетки. Отсюда, с учетом того, что

$$\frac{|e|z^{\pm} - |e|N^{\pm}}{R} = \pm \frac{|e|}{R}, \quad (1.14)$$

получим

$$\varphi^+(R) = \frac{eN^+}{R} \Phi^+(R) + \sum_{l,m,n} \frac{|e|}{|R-l|} \quad (1.15)$$

Для потенциала отрицательной подрешетки соответственно получим

$$\varphi^-(R) = \frac{eN^-}{|R-\alpha|} \Phi^-(R) - \sum_{l,m,n} \frac{|e|}{|R-\alpha-l|} \quad (1.16)$$

Как видно из формул (1.15)-(1.16), при $\Phi(R) \rightarrow 0$ ($|R| \geq R_0$) потенциал равняется сумме потенциалов "точечных" ионов, включая центральный ион.

2. Эффективный потенциал плоскостного каналирования

Эффективный потенциал плоскостного каналирования получается путем усреднения потенциала (1.15) по ячейке ABCD:

$$\varphi_{ef}^+(z) = \frac{|e|}{d^2} \int_{-d/2}^{d/2} \int_{-d/2}^{d/2} dx dy \left[N^+ \frac{\Phi^+(R)}{R} + \sum_{l,m,n} \frac{1}{|R-l|} \right] \quad (2.1)$$

Вычислим второе слагаемое в этом выражении. Для этого

сначала проведем интегрирование по переменной y . В результате, осуществив замену $z/d \rightarrow z$, $x/d \rightarrow x$, получим

$$\sum_{l,m,n} \langle 1/|R-l| \rangle = \frac{1}{d} \sum_{l,m,n} \int_{-\frac{1}{2}}^{\frac{1}{2}} \ln \frac{\sqrt{(x-l)^2 + (m-1/2)^2 + (z-n)^2} - (m-1/2)}{\sqrt{(x-l)^2 + (m+1/2)^2 + (z-n)^2} - (m+1/2)} dx, \quad (2.2)$$

где z принимает значения $0 \leq z \leq 1/2$.

Ввиду особой зависимости этого выражения от индекса m оказывается возможным провести суммирование по всему спектру значений m . Действительно, заменяя в (2.2) суммирование по индексу m от $-k$ до -1 на суммирование от 1 до k и собирая все слагаемые под знак логарифма, после необходимых сокращений, получим

$$\sum_{l,m,n} \langle 1/|R-l| \rangle = \frac{1}{d} \sum_{l,n} \int_{-\frac{1}{2}}^{\frac{1}{2}} \ln \frac{4(k+1/2)^2}{(x-l)^2 + (z-n)^2} dx \quad (2.3)$$

Таким образом, с учетом (2.3) и (1.7) имеем

$$\sum_{l,m,n} \langle 1/|R-l| \rangle - \sum_{l,m,n} \langle 1/|R-l-\alpha| \rangle = \frac{1}{d^2} \sum_{l,n} \int_{-\frac{1}{2}}^{\frac{1}{2}} \ln \frac{(l-x)^2 + (z-1/2-n)^2}{(l-x)^2 + (z-n)^2} dx. \quad (2.4)$$

Можно показать, что выражение (2.4), после суммирования по индексу l и последующих необходимых преобразований, равняется нулю. Таким образом, эффективный потенциал плоскостного каналирования, с учетом сказанного, преобразуется к виду

$$\varphi_{ef}(z) = \frac{|e|}{d^2} \int_{S_1 \cup S_2} dx dy [N^+ \Phi^+ / R + N^- \Phi^- / |R - \alpha|]. \quad (2.5)$$

Следует отметить, что первое слагаемое в (2.5) обозначает, в силу (2.1) и (2.4), не весь положительный эффективный потенциал, а только часть его, которая и вносит реальный вклад в общий потенциал. Поэтому естественно назвать эту часть потенциала действующим потенциалом и обозначить φ_R^+ :

$$\varphi_R^+ = \frac{|e|}{d^2} \int_{S_1 \cup S_2} \frac{N^+ \Phi^+}{R} dx dy \quad (2.6)$$

То же самое относится ко второму слагаемому в выражении (2.5). Таким образом, мы приходим к заключению, что влияние всех остальных ионов кристаллической решетки на формирование поля вблизи центрального иона весьма существенно и им нельзя пренебречь. Вычислим интеграл (2.6). Поскольку область S_1 представляет собой круг с радиусом $\rho^+ = \sqrt{R_{0+}^2 - z^2}$, то в интеграле по области S_1 можно перейти к интегрированию по цилиндрическим координатам. Тогда, ввиду того, что переменная ρ входит в функцию $\Phi^+(R)$ лишь в комбинации $\alpha \sqrt{\rho^2 + z^2}$, можно считать, что как величина ρ , так и координата z , а также величины a_c , R_{0+} и ρ^+ измеряются в единицах d . Таким образом, для интеграла (2.6), с учетом сказанного, получим

$$\frac{|e|N^+}{d^2} \int_{S_1} \frac{\Phi^+(R)}{R} dx dy = \frac{|e|N^+ \pi}{d} \int_0^{\rho^+} \frac{\Phi^+(R, \alpha)}{\sqrt{\rho^2 + z^2}} d\rho^2 \quad (2.7)$$

Заменим в этом выражении интегрирование по $d\rho^2$ интегрированием по переменной $x_0 = [\alpha^2(\rho^2 + z^2)]^{1/4}$. Тогда, согласно (1.12), имеем

$$\int_0^{\rho^+} \frac{\Phi^+(\rho)}{\sqrt{\rho^2 + z^2}} d\rho^2 = \int_{\sqrt{\alpha z}}^{\sqrt{\alpha R_{0+}}} [C_1 x_0^5 + C_2 x_0^4 C_3 x_0^3 + C_4 (x_0^2 + x_0)] e^{-x_0} dx_0, \quad (2.8)$$

где введены обозначения

$$C_1 = \frac{8\pi C^3}{\alpha P_c}; C_2 = \frac{4\pi(14C^3 + 6C^2)}{\alpha P_c}; C_3 = \frac{4\pi(54C^3 + 30C^2 + 6C)}{\alpha P_c}; C_4 = \frac{4\pi}{\alpha}$$

Интеграл (2.8) преобразуется к виду

$$\int_0^{\rho^+} \frac{\Phi^+(\rho)}{\sqrt{\rho^2 + z^2}} d\rho^2 = [\psi(\sqrt{\alpha z}) - \psi(\sqrt{\alpha R_{0+}})] \quad (2.9)$$

$$\psi(x) = e^{-x} [A_1 x^5 + A_2 x^4 + A_3 x^3 + A_4 x^2 + A_5 (x+1)];$$

$$A_1 = C_1 = \frac{8\pi C^3}{\alpha P_c}; \quad A_2 = 3A_1/C; \quad A_3 = \frac{24\pi C}{\alpha P_c};$$

$$A_4 = \frac{4\pi}{\alpha P_c} (450C^3 + 162C^2 + 18C + P_c); \quad (2.10)$$

$$A_5 = \frac{4\pi}{\alpha P_c} (870C^3 + 324C^2 + 36C + 3P_c).$$

Для второго интеграла в выражении (2.5) соответственно получим

$$\int_{s_1} \frac{\Phi^-(R)}{|R - \alpha|} dx dy = \psi \left[\sqrt{\alpha^- |z - 1/2|} \right] - \psi \left[\sqrt{\alpha^- R_{0-}} \right]. \quad (2.11)$$

Таким образом, для эффективного потенциала плоскостного каналирования в объемноцентрированном кубическом кристалле окончательно получим

$$\varphi_{ef}(z) = \frac{|e|\pi}{d} \left\{ N^+ \left[\Psi(\sqrt{\alpha^+ z}) - \Psi(\sqrt{\alpha^+ R_{0+}}) \right] + N^- \left[\Psi(\sqrt{\alpha^- z}) - \Psi(\sqrt{\alpha^- R_{0-}}) \right] \right\} \quad (2.12)$$

В заключение необходимо отметить, что такая простая, с математической точки зрения, формула для эффективного потенциала получается в силу особой симметрии в кубическом объемноцентрированном кристалле. Вследствие этого при усреднении потенциала по этой ячейке бесконечные суммы по индексам l и m взаимно сокращаются, что приводит к выражению (2.12).

3. Метод эквивалентных ячеек

Как показано в работе [4], элементарная ячейка в гранецентрированном кубическом кристалле представляет собой прямоугольник со сторонами $d/\sqrt{2}$ и $\sqrt{6}d/4$ соответственно по x и по y . Поэтому для того, чтобы иметь возможность пользоваться формулами для φ_R^+ и φ_R^- и в этом случае, необходимо заменить прямоугольник эквивалентной квадратной ячейкой и проводить усреднение по этому квадрату. Правомерность такой замены обусловлена тем фактом, что значение усредненного потенциала, действующего на каналированную частицу, не зависит от

перераспределения ионов в пределах элементарной ячейки, по которой проводится усреднение [5]. Исходя из этого, можно заменить прямоугольную ячейку квадратом равной площади. Из условия равенства площадей находим

$$d_{Eq} = 3^{1/4} d / 2, \quad (3.1)$$

где d_{Eq} — сторона эквивалентной квадратной ячейки. Теперь уже можно применять формулу (2.12) к гранецентрированным кристаллам:

$$\Phi_R^+ = \frac{8\pi N^+ |e|}{3d} \int_0^{p^+} \frac{\Phi^+(\alpha, \rho)}{\sqrt{\rho^2 + z^2}} \rho d\rho, \quad (3.2)$$

где безразмерная координата z , так же, как и величины α, ρ , и ρ^+ , измеряется в единицах $d' = d/\sqrt{3}$ (расстояние между одноименными плоскостями).

Формула (3.2) правильно описывает каналирование в тяжелых гранецентрированных кристаллах, для которых в качестве функции распределения плотности электронного заряда используется модель Ленца-Иенсена [2]. Ниже приводятся таблица для значений параметров ионов и графики для эффективных потенциалов каналирования в кристаллах CsCl и KCl, рассчитанные на основе формул (2.12) и (3.2) (рис.2, а, б)

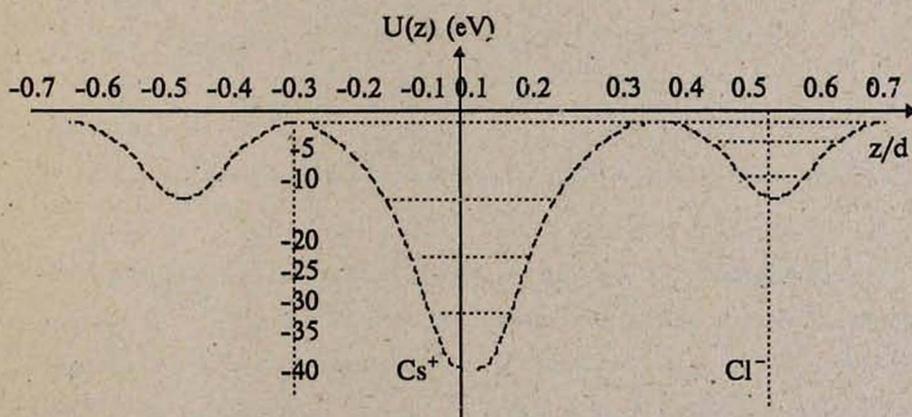
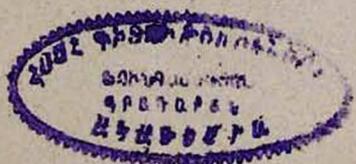


Рис.2.а. Эффективный потенциал плоскостного каналирования электронов в кристалле CsCl.



Как видно из рис.2.а, глубина потенциальной ямы в кристалле CsCl для электронов составляет приблизительно 36 эВ и 12 эВ. Потенциальная яма для позитронов получается в два раза шире, чем для электронов.

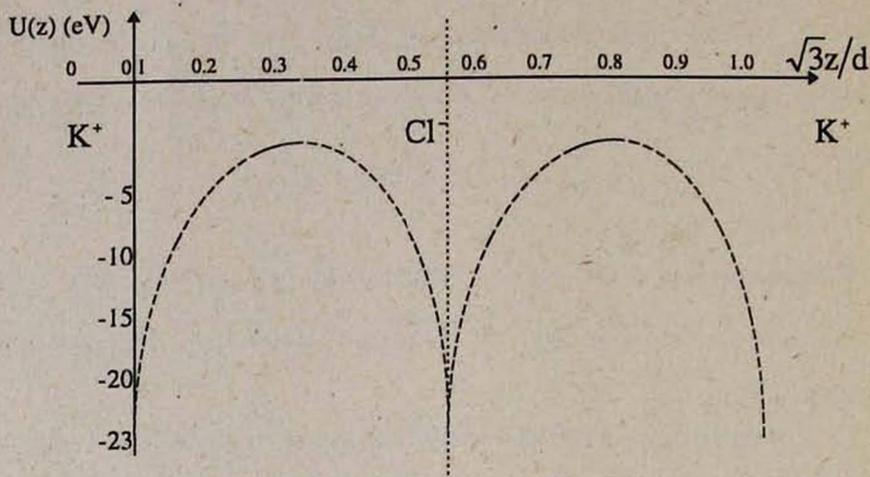


Рис.2.б. Эффективный потенциал плоскостного каналирования в кристалле KCl.

Таблица. Значения параметров ионов.

	N	z	C	ξ	$R_0(\text{Å})$
Cs _s	54	55	0.272	11.29	1.69
K _s	18	19	0.285	12.04	1.33
Cl	18	17	0.243	9.76	1.81

Для кристалла KCl (рис.2, б) получаются симметричные потенциальные ямы с глубиной приблизительно 20 эВ каждая. Одинаковая глубина потенциальной ямы K и Cl обусловлена, прежде всего, близостью значений параметров N (число электронов) и z (число протонов) для положительных и отрицательных ионов, а также тем, что расстояние между разноименными плоскостями значительно превышает радиусы ионов.

ЛИТЕРАТУРА

1. А.С.Геворкян, Н.Н.Корхмазян, Г.Г.Меликян, ЖТФ, 59, вып.3, 54 (1989).
2. П.Гамбош. Статистическая теория атома и ее применение. М., ИЛ, 1951.
3. И.С.Градштейн, И.М.Рыжик. Таблицы интегралов, сумм, рядов и произведений. М., Физматгиз, 1962.
4. Н.Н.Корхмазян, Г.Г.Меликян, Изв. НАН Армении, Физика, 28, вып.2-3, с 56, (1993).
5. В.А.Базылев, Н.К.Жеваго. Излучение быстрых частиц в веществе и во внешних полях. М., Наука, 1987, 369с.

METHOD OF EQUIVALENT CELLS

N.A. GHORKHMAZIAN and N.N. GHORKHMAZIAN

A new method of calculation which allows to reveal some important features of the phenomenon of channeling in ionic crystals is developed. The effective potentials of plane channeling in body-centered and face-centered crystals are obtained.

ՀԱՄԱՐԺԵՔ ԲՁԻՋՆԵՐԻ ՍԵԹՈՂԸ

Ն.Ա. ԴՈՐԽՄԱԶՅԱՆ, Ն.Ն. ԴՈՐԽՄԱԶՅԱՆ

Առաջարկված է իոնային բյուրեղներում էֆեկտիվ պլանեցիայի հաշվման նոր եղանակ, որը հնարավորություն է տալիս պարզաբանելու կանալացման երևույթի որոշ լակուն կողմերը: Ստացված են ժամպլակներում և նիստակներում բյուրեղների էֆեկտիվ պլանեցիայները: