

ОСОБЕННОСТИ СПЕКТРА ИЗЛУЧЕНИЯ ПРИ КАНАЛИРОВАНИИ УЛЬТРАРЕЛЯТИВИСТСКИХ ЛЕПТОНОВ

Н. П. Калашников^a, Е. А. Мазур^{a,b}*

^a *Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ»
115409, Москва, Россия*

^b *Национальный исследовательский центр «Курчатовский институт»
123122, Москва, Россия*

Поступила в редакцию 2 июля 2018 г.
после переработки 24 октября 2018 г.
Принята к публикации 24 октября 2018 г.

Рассчитана вероятность излучения фотонов каналированной частицей в недипольном случае. Исследуется излучение жестких фотонов с энергией, сравнимой с энергией падающей каналированной частицы. Выполняется расчет квазиблоховского энергетического спектра ориентированной быстрой заряженной частицы, входящей в кристалл под углом как меньшим, так и большим угла Линдхарда. Исходный и конечный спектры каналированной частицы принадлежат различным наборам волновых функций зон, соответствующих разным энергиям. Процессы фотонной генерации квантовой ориентированной относительно кристалла частицы, влетающей в кристалл под углом как большим, так и меньшим угла Линдхарда, рассматриваются на равных основаниях. Показано, что спектр излучения жестких фотонов состоит из набора хорошо наблюдаемых эмиссионных линий.

DOI: 10.1134/S0044451019040011

1. ВВЕДЕНИЕ. УРАВНЕНИЕ ДЛЯ ВОЛНОВОЙ ФУНКЦИИ БЫСТРОЙ ЗАРЯЖЕННОЙ ЧАСТИЦЫ В БЕЗРАЗМЕРНОЙ ФОРМЕ

Теория излучения фотонов ориентированными быстрыми заряженными частицами была построена в ряде работ [1–8]. В работах [9, 10] рассматривается движение быстрой заряженной частицы без учета периодического характера кристаллического потенциала в виде одиночной ямы, представляющей собой перевернутую параболу. Блоховский характер движения быстрой заряженной частицы в периодическом кристаллическом потенциале никак не учитывается, квантовый характер движения частицы в периодическом кристаллическом потенциале также не учитывается. Матричные элементы перехода первого рода

$$I^{(1)} = \langle \psi_n \exp(ikx) \psi_{n'} \rangle,$$

а также матричные элементы перехода второго рода

$$I^{(2)} = \langle \psi_n \exp(ikx) \partial/\partial x \psi_{n'} \rangle$$

для волновой функции быстрой заряженной частицы в поле кристалла не вычисляются, не учитываются и не обсуждаются. Выводы о роли недипольных эффектов носят умозрительный и оценочный характер и не основаны на расчетах. В интересной работе [11] рассмотрен рост недипольного вклада с ростом энергии, подчеркнута важность надбарьерных состояний. В то же время вопросы недипольного излучения жестких фотонов в условиях, когда начальное и конечное состояния каналированной частицы (КЧ) принадлежат разным базисам, соответствующим разным суммарным энергиям КЧ, не изучены в деталях. Тот факт, что матричные элементы квантового перехода КЧ обычно являются сложными функциями передачи импульса, также не учитывался в расчетах. Роль матричных элементов квантового перехода второго рода КЧ, где как волновая функция начального состояния, так и производная от волновой функции конечного состояния выступают как обкладки матричных элементов [1–8], мало изучены. Расчеты обычно проводятся для подбарьерных переходов КЧ. Рассматривается движение

* E-mail: eugen_mazur@mail.ru

быстрой заряженной частицы (БЗЧ) в периодическом кристаллическом потенциале. В работах [12, 13] полностью учтен блоховский характер движения быстрой заряженной частицы в периодическом кристаллическом потенциале в случае надбарьерного движения быстрой частицы и показано, что спектр излучения каналированной частицы будет иметь пики, соответствующие испусканию жестких фотонов с энергией, соизмеримой с энергией каналированной частицы, впервые установлен факт существования надбарьерного спектра зонных состояний быстрой заряженной частицы, каналированной в кристалле. В работах [12, 13] впервые для расчета эффектов излучения применен формализм, позволяющий учитывать крайне важную роль матричных элементов перехода второго рода быстрой заряженной частицы в поле кристалла и позволяющий учитывать принадлежность волновых функций БЗЧ до и после акта излучения жесткого фотона различным базисам, не отвечающих свойству ортогональности волновых функций БЗЧ до и после излучения. При этом в работах [12, 13] установлено, что движущаяся почти прямолинейно и почти равномерно частица может излучать фотоны с энергиями, сравнимыми с энергией самой частицы. Это кажущееся, на первый взгляд, странным обстоятельство связано с нарушением для релятивистской частицы критерия применимости квазиклассического приближения [14] $m\hbar F/p^3 < 1$ для движения такой частицы в поперечном по отношению к направлению внутрикристаллического канала направлении, где m — релятивистская масса частицы, $F = -\partial U/\partial x$ есть классическая сила, действующая на частицу со стороны релятивистски выросшего кристаллического потенциала U , p — импульс поперечного движения частицы. Иными словами, при описании движущейся почти прямолинейно и почти равномерно быстрой частицы в кристалле влияние потенциала кристалла на движение такой частицы не может учитываться по теории возмущений, а требует учета бесконечного числа поправок, что и приводит в результате к эффектам излучения сверхжестких фотонов. Говоря совсем кратко, это означает, что влияние потенциала кристалла на пролет быстрой ориентированной частицы в кристалле никак не может полагаться слабым. Роль недипольных процессов в случае квантового описания КЧ исследовалась в [15]. В расчетах учитывались только матричные элементы первого рода $I^{(1)}$, вычисляемые в обкладках из волновых функций поперечного движения КЧ. В настоящей работе мы исследовали роль недипольных процессов в излучении жестких фотонов с учетом

как надбарьерных, так и подбарьерных переходов КЧ на равных основаниях. Уравнение для волновой функции релятивистской ориентированной относительно кристалла быстрой заряженной частицы, взаимодействующей с кристаллом, имеет следующий вид:

$$\left[E_{n,\mathbf{p}}^2/c^2 - 2eE_{n,\mathbf{p}}U(\mathbf{r})/c^2 + e^2U^2(\mathbf{r})/c^2 + \hbar^2\Delta_{\mathbf{r}} - m^2c^2 + ie\hbar\alpha\nabla_{\mathbf{r}}U(\mathbf{r})/c \right] \psi_{n,\mathbf{p}}(\mathbf{r}) = 0. \quad (1)$$

В этой формуле

$$\alpha = \gamma^0\gamma, \\ \gamma^\mu \quad (\mu = 1, 2, 3),$$

так что уравнение (1) для невозмущенной волновой функции

$$\psi_{n,\mathbf{p}}(\mathbf{r})$$

быстрой ориентированной или каналированной частицы в состоянии с квантовыми числами n, \mathbf{p} может быть переписано как

$$\left(\frac{\hbar^2}{2m}\Delta_{\mathbf{r}} + \frac{E_{n,\mathbf{p}}^2 - m^2c^4}{2mc^2} \right) \psi_{n,\mathbf{p}}(\mathbf{r}) = \left(\frac{eE_{n,\mathbf{p}}U(\mathbf{r})}{mc^2} \right) \psi_{n,\mathbf{p}}(\mathbf{r}). \quad (2)$$

Обозначим

$$E_{n,\mathbf{p}}/mc^2 = \gamma, \\ eU(x) = V(x).$$

Тогда уравнение для поперечной энергии каналированной частицы должно быть переписано в следующем виде:

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta_x + \gamma V(x) \right) \psi_{n,\kappa}(\mathbf{r}) = \varepsilon_{n,\kappa} \psi_{n,\kappa}(\mathbf{r}).$$

Как известно, если в точечной группе кристалла содержится инверсия, то соотношение $V_{-\mathbf{G}} = V_{\mathbf{G}}$ для потенциала кристалла оказывается верным. Для кристаллов, обладающих этим свойством, таких как кремний, германий, кристаллический потенциал следует записать в следующем виде:

$$V(x) = \sum_{G_x} V_{G_x} \exp(iG_x x) = V_0 + 2 \sum_{G_x > 0} V_{G_x} \cos(G_x x). \quad (3)$$

Здесь $G_x \equiv G$ — вектор обратной решетки в направлении, перпендикулярном плоскости каналирования. Возьмем потенциал решетки с приближенными параметрами, соответствующими плоскости

(110) кристалла кремния в направлении каналирования, в результате чего реализуются эквидистантные плоскости каналирования. Значительная часть пространственно-неоднородных членов в усредненном потенциале кристаллографических плоскостей (3) в таких кристаллах равна нулю, а остальные члены выражаются через компоненты Фурье $V_{4n,0,0}$ ($n = 1, 2, 3, \dots$) потенциала $V(\mathbf{r})$ пространственной решетки, так что

$$V(x) = V_0 + 2 \sum_{n=1,2} V_{4n,0,0} \cos(4Gx). \quad (4)$$

Другими словами, по соображениям симметрии кристаллического потенциала выбирается специфическое направление каналирования в кристалле кремния, при котором средний потенциал плоскостей кристалла представляет собой набор равноудаленных плоскостей в кристалле. Ограничиваясь первыми двумя наибольшими членами в (4), рассмотрим проблему излучения жестких фотонов электроном и позитроном при каналировании. Возьмем $V_0 = -2V_G$, чтобы выбрать нулевое значение потенциальной энергии. Выберем здесь безразмерные единицы. Пусть $2S = G_x x$, где G_x отвечает первому неисчезающему вкладу в потенциал. Переобозначим $\psi_{n,\kappa}(S) \equiv U(S)$. Получаем в результате переименования

$$\psi_{n,\kappa}(S) \equiv U(S),$$

$$V(S) = V_0 + 2V_{G_x} \cos(2S)$$

следующее уравнение:

$$\left(\Delta_S - \frac{8E_{n,\mathbf{p}}}{c^2 \hbar^2 G_x^2} V_0 + \frac{8m}{\hbar^2 G_x^2} \varepsilon_{n,\kappa} - \frac{8E_{n,\mathbf{p}}}{c^2 \hbar^2 G_x^2} 2V_{G_x} \cos(2S) \right) U(S) = 0. \quad (5)$$

Здесь $G_x = nG$ первый вектор обратной решетки, потенциал которого не равен нулю. Сравнивая (1) с известным уравнением Матье с безразмерными коэффициентами [16]

$$\frac{\partial^2 U}{\partial S^2} + (\tilde{a} - 2q \cos 2S) U(S) = 0,$$

получаем

$$\tilde{a} = \frac{8m\varepsilon_{n,\kappa}}{G_x^2 \hbar^2} - \frac{8EV_0}{\hbar^2 c^2 G_x^2}, \quad q = \frac{8EV_{G_x}}{\hbar^2 c^2 G_x^2}, \quad S = \frac{G_x x}{2},$$

$$G_x \equiv nG_{min} = nG = \frac{2n\pi}{d}, \quad E_{\perp} \equiv \varepsilon_{n,\kappa},$$

$$V_0 = -2V_{G_x}, \quad \tilde{a} = \frac{8m\varepsilon_{n,\kappa}}{n^2 G^2 \hbar^2} + \frac{16EV_{G_x}}{\hbar^2 n^2 c^2 G^2},$$

$$q = \frac{8EV_{G_x}}{\hbar^2 c^2 n^2 G^2}, \quad \tilde{a} = \frac{\varepsilon_{n,\kappa}}{12.5eV} \frac{16}{n^2} - 2.4\gamma \frac{16}{n^2},$$

$$q = 2.4\gamma \frac{8}{n^2}.$$

Для кремния Si

$$G_x \equiv 4G, \quad n = 4, \quad \tilde{a} = \frac{m\varepsilon_{n,\kappa}}{2G^2 \hbar^2} + \frac{EV_{G_x}}{\hbar^2 c^2 G^2},$$

$$q = \frac{EV_{G_x}}{2\hbar^2 c^2 G^2}.$$

Оценим следующие члены для электрона:

$$\frac{2\hbar^2 G^2}{m} = \frac{2 \cdot 10^{-68} 10^{-20}}{10^{-30}} = 2 \cdot 10^{-18} \text{ Дж} = 12.5 \text{ эВ},$$

$$\frac{EV_G}{\hbar^2 c^2 G^2} = 2\gamma V_G \left(\frac{2\hbar^2 G^2}{m} \right)^{-1} \approx \approx \gamma 30 \text{ эВ} / 12.5 \text{ эВ} \approx 2.4\gamma.$$

Окончательно для кремния Si

$$\varepsilon_{n,\kappa} = \tilde{a} - 2.4\gamma, \quad q = 1.2\gamma,$$

где $\varepsilon_{n,\kappa}$ измеряется в единицах, равных 12.5 эВ. Подбарьерное состояние таково, что $\varepsilon_{n,\kappa} < 0$, так что полный потенциал кристалла с выбором нулевой энергии попал в область отрицательных значений. Для каналированных положительно заряженных частиц $q > 0$, так как V_0 и V_{400} являются величинами, большими нуля. Значение \tilde{a} может быть либо меньше, либо больше нуля, в зависимости от поперечной энергии каналированной частицы. Оценим значение q в уравнении (5). При энергии $E = 28 \text{ МэВ}$ $V_0 \approx 15 \text{ эВ}$ (т. е. глубина ямы равна 30 эВ, $G_x = 10^{10} \text{ м}^{-1}$) получаем $q \approx 11.2$, величина \tilde{a} меняется в зависимости от $E_{\perp}(P_x)$ и может быть как большой, так и малой. Решения уравнения (5) имеют характер блоховских зон. В то же время границы энергетических зон определяются хорошо известными в теории функций Матье [16] величинами $a_r - q$ и $b_{r+1} - q$, где $r = 0, 1, 2, \dots$. Разрешенные значения поперечной энергии КЧ $E_{\perp}(P_x)$ определяются условием $a_r - q < a < b_{r+1} - q$, где r – номер разрешенной зоны. Отнесение зон к дискретному или непрерывному спектру является условным и определяется исключительно шириной зоны КЧ. Волновые функции, представляющие решение уравнения (5), имеют блоховский вид:

$$u_{E_{\perp}}^{(n)}(x) = (N_x a_x)^{-0.5} \exp(i\nu_n(E_{\perp}) Gx) \times \times D_{E_{\perp}}^{(n)}(2Gx), \quad (6)$$

где модулятор волновой функции $D(2Gx)$ зоны периодичен по x с периодом $a_x/4$, равным одной четверти периода кристаллической решетки вдоль x направления (см. (4) для объяснения этого факта), N_x является числом кристаллографических плоскостей кристалла, $D(2Gx)$ подчиняется следующему соотношению:

$$D\left(2G\left(x + \frac{a_x}{4}\right)\right) = D(2Gx).$$

Безразмерные блоховские модуляторы подчиняются следующему условию нормировки:

$$\int_{-a_x/8}^{a_x/8} \frac{dx}{a_x} D_{E_{\perp}}^{(n)}(2Gx) D_{E_{\perp}}^{(n')}(2Gx) = \delta_{nn'}.$$

Функции (6) исследуются в теории функций Маттье, где они называются решениями уравнений Маттье в форме Флоке [16]. Когда квазиимпульсы КЧ соответствуют границам энергетических зон КЧ, т.е. $G_n = 2\pi n/a$ ($n = 0, 1, 2, \dots$), функции Флоке принимают вид хорошо изученных функций Маттье $Cl_r(S, q)$ и $Sl_r(S, q)$. Символом $Cl_r(S, q)$ обозначены четные волновые функции КЧ, соответствующие нижнему краю энергетической зоны, а $Sl_r(S, q)$ соответствуют нечетным волновым функциям КЧ, связанным с верхним краем соответствующей энергетической зоны поперечного движения КЧ.

2. СТРУКТУРА ЗОН И ВОЛНОВЫЕ ФУНКЦИИ БЫСТРОГО ОРИЕНТИРОВАННОГО ЭЛЕКТРОНА И ПОЗИТРОНА

Вычисление зонной структуры для реалистического потенциала $U(x)$, возникающего из усредненных потенциалов атомов, составляющих кристаллическую плоскость [1–7], является задачей численного расчета. На рис. 1 показаны результаты этого расчета для электрона с энергией 28 МэВ в канале, соответствующем кристаллографической плоскости (110) в кремнии Si. Зонная структура для 15 зон для электронов с энергиями, соответствующими значениям $-300 < q < -10$, показана на рис. 1. Плотность вероятности нахождения позитрона в канале показана на рис. 2. Пики плотности вероятности нахождения позитрона для высоких околорбарьерных зон смещаются к краям канала, т.е. к атомным плоскостям.

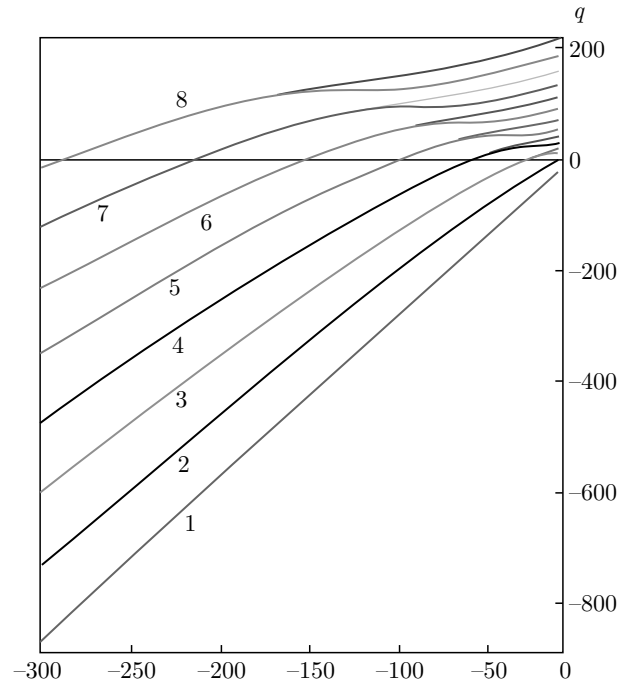


Рис. 1. Зонная структура для ориентированного электрона в кристалле кремния как функция параметра q . Зоны пронумерованы от отрицательного числа $n = -10$ до положительного числа $n = +5$. Некоторые линии зонного спектра сливаются с увеличением модуля q

3. ИСПУСКАНИЕ ЖЕСТКИХ ФОТОНОВ БЫСТРОЙ ЗАРЯЖЕННОЙ ЧАСТИЦЕЙ. ЗАКОНЫ СОХРАНЕНИЯ ЭНЕРГИИ И ИМПУЛЬСА

Будем описывать эмиссию фотонов каналированными частицами с помощью хорошо известного формализма [1–8]. Для дифференциальной вероятности излучения фотона следует записать следующее выражение (все обозначения являются стандартными):

$$\frac{d^2w}{d\omega d\Omega} = \frac{e^2\omega}{2\pi} \times \sum_f |M_{if}|^2 \delta\left(\omega - \omega_{if} - \left(E_p^{\parallel} - E_{p-k}^{\parallel}\right)\right). \quad (7)$$

В (7) были учтены матричные элементы квантового перехода КЧ как первого, так и второго рода [1–7]:

$$E_p^{\parallel} - E_{p-k}^{\parallel} = \omega - \frac{\omega}{2(E_i - \omega)} \times \left[(\theta^2 + E_i^{-2}) E_i - \omega\theta^2 \cos^2 \varphi \right]. \quad (8)$$

Обратимся к законам сохранения энергии и импульса. Тогда получаем

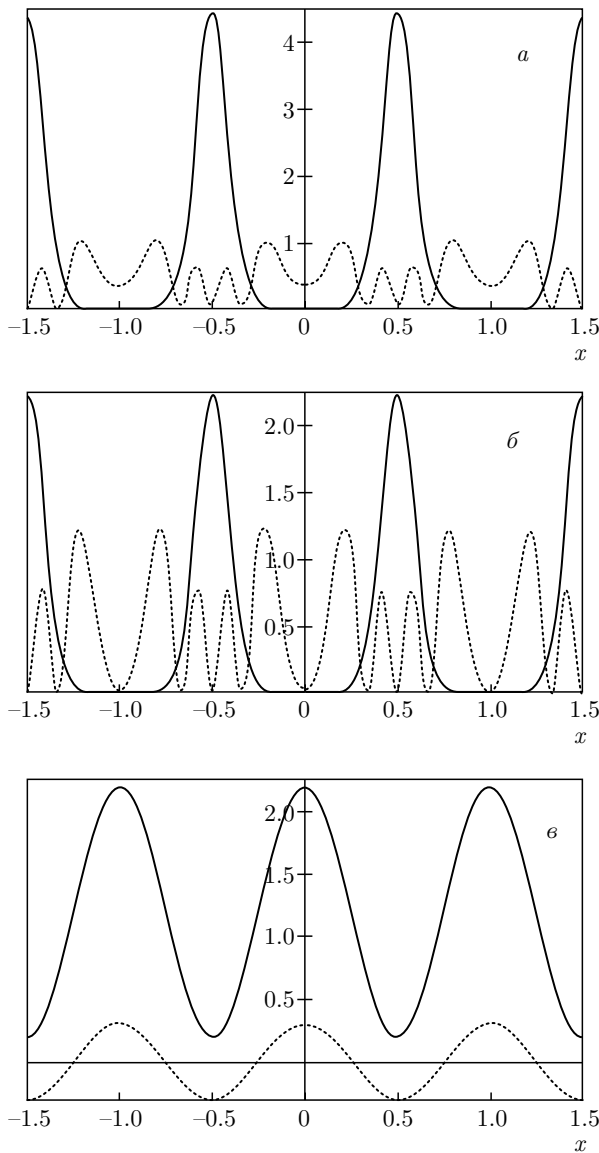


Рис. 2. Квадратичный модуль четных (а) и нечетных (б) волновых функций позитронов с энергией 28 МэВ в планарном канале (110) в периодическом потенциале с параметрами, соответствующими плоскости (110) в монокристалле кремния, координата x указана в безразмерных единицах как часть межплоскостного расстояния: а — $bd0$ (сплошные кривые) — первая глубокая подбарьерная зона, $bd1$ (пунктир) — третья околбарьерная зона, б — $bd1$ (сплошные кривые) — вторая зона, $bd2$ (пунктир) — четвертая (надбарьерная) полоса, в — графики показывают в том же масштабе вдоль оси x плоский потенциал U (сплошная линия) и полное распределение плотности положительных и отрицательных зарядов в кристалле (пунктир)

$$\delta \left(\omega - \omega_{if} - \left(E_p^{\parallel} - E_{p-k}^{\parallel} \right) \right) = \delta \left(\varepsilon_i - \varepsilon_f - \frac{\omega}{2(E - \omega)} \times \left[\left(\theta^2 + \frac{1}{\gamma^2} \right) E - \omega \theta^2 \cos^2(\varphi) \right] \right). \quad (9)$$

При $\theta = 0$ получаем

$$\delta \left(\varepsilon_i - \varepsilon_f - \frac{\omega}{2(E - \omega)} \left[\frac{1}{\gamma^2} E \right] \right) = \delta \left(A_i(E) - A_f(E - \omega) - 2q + 2q' - \frac{\omega}{2(E - \omega)} \left[\frac{1}{\gamma^2} E \right] \right),$$

$$q = \frac{8EVG_x}{\hbar^2 c^2 n^2 G^2}, \quad q' = \frac{2(E - \omega) V_0}{\hbar^2 c^2 G_x^2} = q \left(1 - \frac{\omega}{E} \right),$$

$$\frac{\omega}{E} = 1 - \frac{q'}{q}.$$

Введем обозначение $\omega/E = x$. Тогда

$$q' = q(1 - x), \quad \frac{\omega}{2(E - \omega)} = \frac{1}{2} \frac{x}{(1 - x)}.$$

Дельта-функцию можно переписать следующим образом:

$$\delta \left(12.5A_i(q) - 12.5A_f(q(1 - x)) - 25qx - 0.72 \frac{x}{1 - x} \frac{E}{q^2} \right). \quad (10)$$

В (10) под знаком дельта-функции помещаются значения, измеренные в электрон-вольтах, $\varepsilon_i(q) = A_i(q) - 2.4\gamma$, величина $A_i(q)$ представляет собой границу зон, измеренную от нулевого значения потенциала кристалла. Учитывая, что

$$0.72 \frac{E}{1.2\gamma} = 0.6 \frac{E}{\gamma} = 0.6 \cdot 0.5 \text{ МэВ} = 3 \cdot 10^5 \text{ эВ},$$

уравнение (10) можно переписать следующим образом:

$$\frac{1}{12.5} \delta \left(A_i(q) - A_f(q(1 - x)) - 2qx - \frac{x}{1 - x} \frac{24000}{q} \right), \quad (11)$$

где

$$q = \frac{2EV_0}{\hbar^2 c^2 G_x^2} \rightarrow \frac{1}{4^2} \frac{2EV_0}{\hbar^2 c^2 G^2} = \frac{1}{4^2} \frac{2mEV_0}{\hbar^2 mc^2 G^2} = \frac{1}{4^2} \gamma \frac{2mV_0}{\hbar^2 G^2} = \frac{1}{4^2} \gamma V_0 \left(\frac{\hbar^2 G^2}{2m_0} \right)^{-1} \approx \frac{8\gamma}{16} = \frac{\gamma}{2},$$

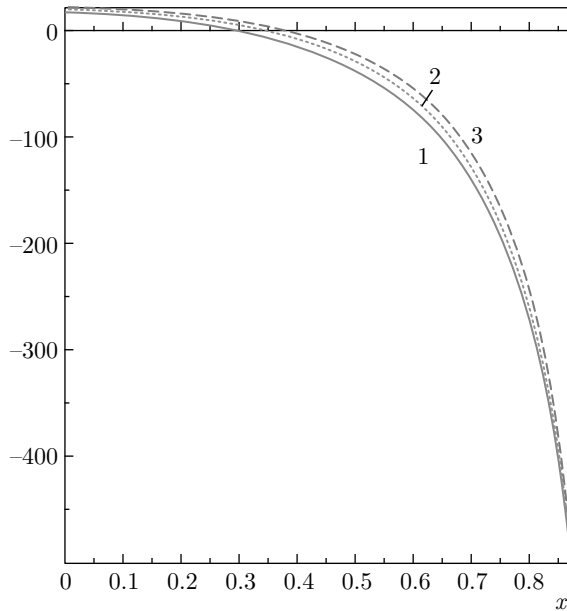


Рис. 3. Поведение аргумента дельта-функции в (13) в зависимости от энергии испускаемого фотона x для быстрой частицы с $q = 471$ для первых шести зон с увеличением номера зоны при квантовом переходе от начального состояния в конечное состояние на три значения. Кривые для различных зон практически сливаются

$$\tilde{a} = \frac{E_{\perp}^2}{4G^2 \hbar^2 c^2} - \frac{8EV_0}{2\hbar^2 c^2 G^2}, \quad q = \frac{EV_G}{2\hbar^2 c^2 G^2}, \quad S = G_x x,$$

$$G_x \equiv nG = nG_{min} = \frac{2n\pi}{d}.$$

Решим уравнение для численного определения спектра испущенных фотонов. Примем во внимание тот факт, что зонный энергетический спектр КЧ как до, так и после излучения фотона, соответствует различным базисам. На рис. 3 показано поведение безразмерного аргумента u дельта-функции (13) в зависимости от энергии испускаемого фотона, выраженной в виде безразмерной фракции x от падающей энергии быстрых частиц. Пересечение кривой с осью абсцисс на графике соответствует исчезновению аргумента дельта-функции, т. е. реализации законов сохранения энергии и импульса при испускании жесткого фотона быстрой ориентированной частицей. Энергия фотона x в процессе фотонного излучения может быть найдена как отрезок пересечения кривой с горизонтальной осью. Назовем это значение x возможной энергией излучаемого фотона. При испускании жестких фотонов спектры зон КЧ начального i и конечного f состояний могут иметь принципиально иной характер, несмотря на возможное совпадение нумерации зон. Возможность испускания фотонов высокой энергии в недиполь-

ных переходах между несмежными зонами с разной энергией надбарьерной частицы показана на рис. 3. Кривые для зон испускания практически совпадают. Начальный набор зон и конечный набор зон соответствуют разным энергиям. Кривые для первых шести надбарьерных зон (пронумерованных от нуля до шести) имеют почти одинаковый характер. Излучение фотонов высокой энергии в недипольных переходах между соседними (ближайшими) зонами надбарьерной частицы приводит к такому же выводу. Слабая зависимость энергии фотона от номера зоны хорошо видна на рис. 3.

4. ОРИЕНТАЦИОННАЯ ЗАВИСИМОСТЬ ВЕРОЯТНОСТИ ЗАСЕЛЕНИЯ ЗОН

На рис. 4 показаны коэффициенты заполнения для нечетных и четных зон для случая $E = 28$ МэВ, Si (110), в зависимости от угла падения позитрона в кристалле. Показана ориентационная зависимость вероятности заселенности нижней границы зоны для позитрона соответственно в четном и нечетном состояниях в зависимости от угла падения позитрона в кристалле относительно плоскости (110) в Si. Угол θ измеряется безразмерной величиной, равной количеству векторов обратной решетки, соответствующих проекции импульса каналированного позитрона на направление, перпендикулярное плоскостям, деленной на полный импульс позитрона. Уровни ориентированных частиц нумеруются индексом « bd ». На оси x волновой вектор задается в долях вектора обратной решетки. Четыре вектора обратной решетки при энергии 28 МэВ приблизительно соответствуют углу Линдхарда падения позитрона, так что величина аргумента вдоль оси x , которая приблизительно равна четырем, разделяет подбарьерные зоны и систему надбарьерных состояний. Максимальная заселенность околбарьерных зон может быть достигнута направлением влета пучка частиц под углом к кристаллографическим плоскостям порядка угла Линдхарда. На рис. 4 показано, что при нулевых углах падения в основном заполняются глубокие подбарьерные зоны, которые в этом случае обычно интерпретируются как уровни поперечного движения. При падении частиц под углами, равными углу Линдхарда, в основном заселяются состояния, близкие к барьеру, т. е. к нулю потенциала решетки.

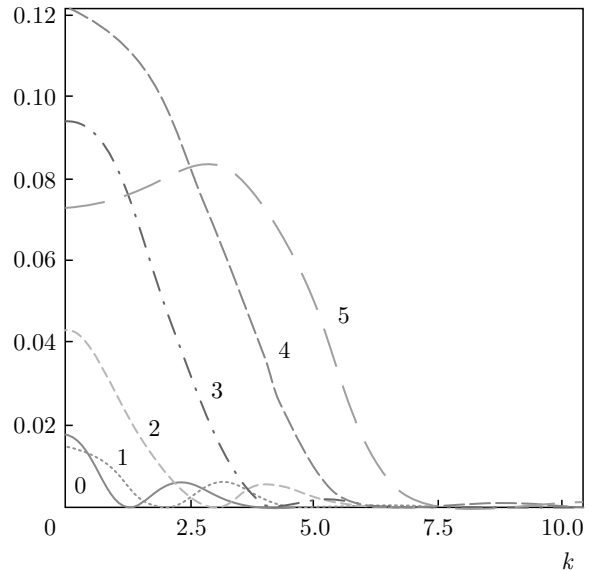
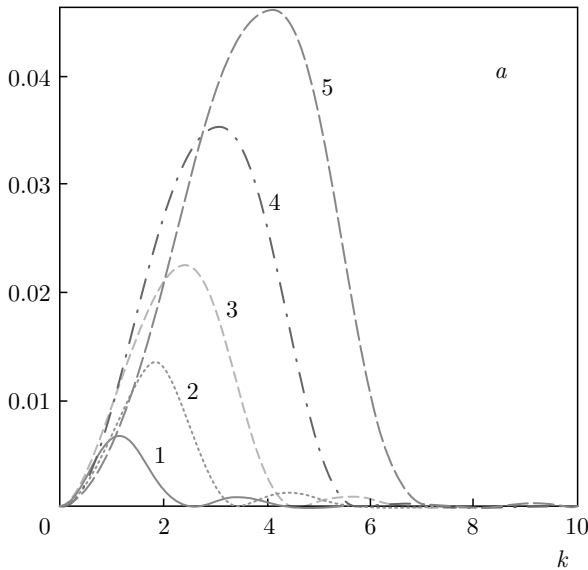


Рис. 5. Квадрат модуля недипольных матричных элементов второго типа для перехода позитрона с энергией, соответствующей $q = 71$, к энергии $q = 51$ между четными уровнями с изменением числа n нечетных зон поперечной энергии КЧ в зависимости от высоких значений угла падения позитрона на кристалл

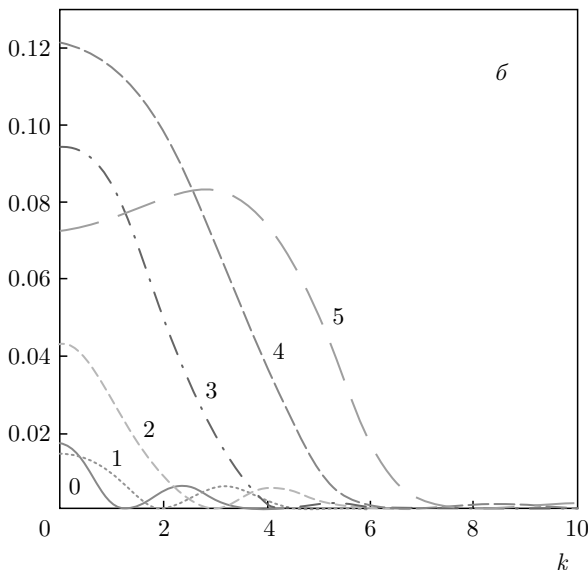


Рис. 4. Квадрат модуля матричного элемента перехода позитрона на четном (а) и нечетном (б) уровнях в зависимости от угла падения позитрона в кристалле. Угол θ измеряется в векторах обратной решетки

5. МАТРИЧНЫЕ ЭЛЕМЕНТЫ

Численный анализ показывает, что наивысшая вероятность квантового перехода КЧ получается из матричных элементов квантового перехода второго рода

$$I^{(2)} = \langle \psi_n \exp(ikx) \partial/\partial x \psi_{n'} \rangle$$

из (7). Квадраты модуля недипольных комплексных матричных элементов второго рода между состояниями, соответствующими разным энергиям КЧ, показаны на рис. 5. Вычисленные матричные элементы первого типа показаны на рис. 6. Сравнение рис. 5 и рис. 6 показывает, что в случае больших импульсов, передаваемых КЧ, матричные элементы второго рода вносят основной вклад в вероятность перехода КЧ.

6. ВЕРОЯТНОСТЬ НЕДИПОЛЬНОГО ИЗЛУЧЕНИЯ ФОТОНОВ

Вычислим спектрально-угловую плотность вероятности недипольного излучения жестких фотонов каналированной частицей высокой энергии с энергией, удовлетворяющей неравенству $U_0 E \geq 1$. Известно, что недипольные процессы излучения жестких фотонов не могут быть описаны при этих энергиях в квазиклассическом приближении [1–5]. Для неполяризованного излучения можно записать следующее выражение для такой плотности вероятности [4, 5]:

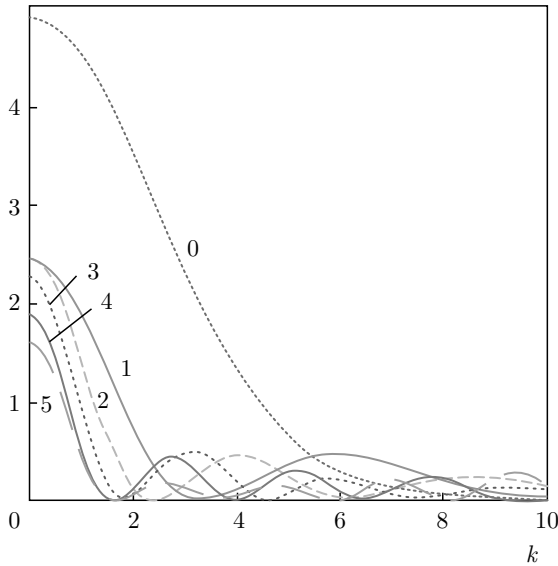


Рис. 6. Квадрат модуля недипольных матричных элементов первого типа для перехода позитрона с энергией, соответствующей $q = 71$, к энергии $q = 51$ между четными уровнями с изменением числа n четных зон поперечной энергии КЧ в зависимости от высоких значений угла падения позитрона на кристалл

$$\begin{aligned} \frac{d^2w(\omega, \theta)}{d\omega d\Omega} = & \frac{e^2\omega}{2\pi} \sum_f \left\{ \left(1 + u + \frac{u^2}{2} \right) \times \right. \\ & \times \left[\left| I_{if}^{(1)}(k_x) \right|^2 \theta^2 + \left| I_{if}^{(2)}(k_x) \right|^2 - \right. \\ & \left. \left. - 2 \operatorname{Re} \left(I_{if}^{(1)}(k_x) I_{if}^{(2)*}(k_x) \right) \theta \cos \varphi \right] + \right. \\ & \left. + \frac{u^2}{2E^2} \left| I_{if}^{(1)}(k_x) \right|^2 \right\} \delta \left\{ 2 \frac{\omega}{E - \omega} \times \right. \\ & \times \left[(\theta^2 + E^{-2}) E - \omega \theta^2 \cos^2 \varphi \right] - \\ & \left. - \varepsilon_i(E) + \varepsilon_f(E - \omega) \right\}. \quad (12) \end{aligned}$$

Как видно на рис. 6, матричные элементы первого рода квантового перехода каналированной частицы имеют значительные величины, когда безразмерная составляющая импульса каналированной частицы, направленная поперек плоскостей кристалла, значительно меньше единицы. Этот импульс в безразмерной форме измеряется в долях вектора обратной решетки K , равного $K = 2\pi/a = 2\pi \cdot 10^{10} \text{ м}^{-1}$ для случая кристалла кремния. В то же время волновой вектор фотона с энергией E , равной 10 ГэВ, равен $k_{phot} = \hbar E / c\hbar = 10^{17} \text{ м}^{-1}$. Таким образом, для того чтобы иметь для k_x значительно более низкие значения по сравнению с вектором обратной решетки $k_x \leq 0.1K$, угол $\theta = k_x / k_{phot}$ должен иметь значе-

ния, не превышающие $\theta \leq 2\pi \cdot 10^9 / 10^{17} \approx 6 \cdot 10^{-8}$. В то же время, угол φ может меняться в широком диапазоне, так что мы можем положить $\delta\varphi \sim 0.1$. Рассмотрим вероятность излучения фотона каналированной частицей с энергией $E = 10$ ГэВ в телесный угол

$$\begin{aligned} d\Omega = \sin \theta d\theta d\varphi & \approx \theta d\theta d\varphi \approx \\ & \approx 6 \cdot 10^{-8} \cdot 6 \cdot 10^{-8} \cdot 10^{-1} = 3.6 \cdot 10^{-16} \text{ ср.} \end{aligned}$$

Рассмотрим, например, четно-четные квантовые переходы каналированной частицы, когда

$$\left| I_{if}^{(2)}(k_x = 0) \right|^2 = 0.$$

Для неполяризованного излучения при малых углах наблюдения $\theta \ll 1$, $\varphi \ll 1$ ($k_x \ll 1$) и в пределе $\theta \ll 1/E$, $\theta \ll u/E$ выражение (14) при указанных ранее условиях сводится к следующему упрощенному выражению для вероятности излучения фотона с энергией $\omega \leq E$ каналированной частицей:

$$\begin{aligned} \frac{d^2w(\omega, \theta)}{d\omega d\Omega} = & \frac{e^2\omega}{2\pi} \sum_f \left(1 + u_{if} + \frac{u_{if}^2}{2} \right) \frac{u_{if}^2}{2E^2} \times \\ & \times \left| I_{if}^{(1)}(0) \right|^2 \delta \left(\varepsilon_i(E) - \varepsilon_f(E - \omega) - \frac{\omega}{E - \omega} \frac{2}{E} \right). \quad (13) \end{aligned}$$

Здесь $u_{if} = \omega_{if} / (E - \omega_{if})$ при условиях, определяемых недипольным излучением. Выделив только один наиболее важный член в (13), легко получить следующую вероятность излучения фотона с энергией фотона:

$$\omega_{if} = \frac{1}{2} E (E - \omega_{if}) [\varepsilon_i(E) - \varepsilon_f(E - \omega)],$$

$$\begin{aligned} \frac{dw_{if}(\theta)}{d\Omega} = & \int d\omega \frac{d^2w_{if}(\omega, \theta)}{d\omega d\Omega} = \\ = & \frac{e^2\omega_{if}}{\pi} \frac{u_{if}^2}{4E^2} \left(1 + u_{if} + \frac{u_{if}^2}{2} \right) \left| I_{if}^{(1)}(0) \right|^2. \quad (14) \end{aligned}$$

Рассмотрим случай, когда $\hbar\omega_{if} \approx 0.4E$, так что $u_{if} \sim 0.66$. В условиях недипольного излучения, указанных ранее, $\hbar\omega_{if} / \hbar = 0.4 \cdot 10^{10} \text{ эВ} / 0.66 \times 10^{-15} \text{ эВ} \cdot \text{с} = 0.6 \cdot 10^{25} \text{ с}^{-1}$. Обращаясь к размерным единицам и принимая во внимание тот факт, что

$$\left| I_{if}^{(1)}(k_x \approx 0) \right|^2 \approx 5$$

(рис. 5, 6), получаем следующую оценку вероятности перехода:

$$w_{if}(\omega_{if}) = dw_{if}(\omega_{if}) d\Omega = \frac{e^2}{\hbar c \pi} \frac{\hbar \omega_{if}}{\hbar} \frac{(\hbar \omega_{if})^2}{(E - \hbar \omega_{if})^2} \times \\ \times \frac{(mc^2)^2}{E^2} \left(1 + u_{if} + \frac{u_{if}^2}{2}\right) \left|I_{if}^{(1)}(k_x \approx 0)\right|^2 d\Omega = \\ = 2 \cdot 10^{-3} \cdot 0.6 \cdot 10^{25} \cdot (0.66)^2 \cdot (4 \cdot 10^4)^{-2} \times \\ \times 1.5 \cdot 5 \cdot 3.6 \cdot 10^{-16} \cdot 1/c \approx 0.2 \text{ с}^{-1}. \quad (15)$$

7. ВЫВОДЫ

Полученный в нашей работе вывод о существовании надбарьерного спектра зонных состояний быстрой заряженной частицы, каналированной в кристалле, не привязан к плоскостному или осевому характеру каналирования быстрой заряженной частицы, а носит общий характер. Именно из обнаруженного в настоящей работе надбарьерного спектра зонных состояний быстрой заряженной частицы как в осевом, так и в плоскостном случае будет следовать наличие квантовых переходов из надбарьерных квантовых зонных состояний в подбарьерные как в осевом, так и в плоскостном случаях. Из этого следует, что мы предсказали существование эффекта, аналогичного описанному в работе [17] для плоскостного случая каналирования, а также принципиально объяснили эффект, наблюдавшийся в работе [17] для осевого случая каналирования. Таким образом, в настоящей работе:

- 1) обнаружено существование надбарьерного спектра зонных состояний быстрой заряженной частицы, каналированной в кристалле;
- 2) учтены и вычислены матричные элементы перехода БЗЧ второго рода

$$I^{(2)} = \left\langle \psi_n \exp(ikx) \frac{\partial}{\partial x} \psi_{n'} \right\rangle$$

быстрой заряженной частицы в поле кристалла в дополнение к уже известным матричным элементам перехода БЗЧ первого рода $I^{(1)} = \langle \psi_n \exp(ikx) \psi_{n'} \rangle$;

- 3) вычислены без дипольных приближений матричные элементы перехода БЗЧ как первого, так и второго рода при всех значениях передаваемого импульса с применением волновых функций зонного спектра БЗЧ;

- 4) установлена значительная роль недипольных эффектов при сравнительно малых энергиях каналированной в кристалле БЗЧ. Такой вывод происходит из впервые выявленных нами в настоящей работе свойств матричных элементов перехода БЗЧ второго рода

$$I^{(2)} = \left\langle \psi_n \exp(ikx) \frac{\partial}{\partial x} \psi_{n'} \right\rangle$$

быстрой заряженной частицы в поле кристалла;

- 5) проведены расчеты эффектов излучения БЗЧ в кристалле в том случае, когда энергия испускаемого кванта соизмерима с энергией БЗЧ, а волновые функции начального и конечного состояний принадлежат различным базисам;

- 6) предсказано существование эффекта, аналогичного описанному в работе [17] для плоскостного случая каналирования, а также принципиально объяснен эффект, наблюдавшийся в работе [17] для осевого случая каналирования. Выполнен расчет квазиблоховского энергетического спектра ориентированной быстрой заряженной частицы, входящей в кристалл под углом, как большим, так и меньшим, чем угол Линдхарда. Показано, что зонная структура с наличием разрешенных и запрещенных зон сохраняется при прохождении быстрых заряженных частиц над кристаллическим потенциалом. Рассмотрены процессы генерации фотонов квантовой ориентированной относительно кристалла частицей, входящей в кристалл под углами, как большими, так и меньшими, чем угол Линдхарда. Вычисляется вероятность возбуждения фотона квантовой как надбарьерной, так и подбарьерной каналированной частицей. Показана значительная роль матричных элементов второго типа для перехода между квантовыми уровнями поперечного движения КЧ. Показано, что спектр излучения жестких фотонов состоит из набора хорошо наблюдаемых эмиссионных линий. Рассмотрены процессы испускания недипольных фотонов быстрыми заряженными ориентированными частицами. Надбарьерные и подбарьерные переходы, а также наличие квантовых зон надбарьерной и подбарьерной каналированной частицы рассматривались на равной основе. В полной мере учитывается параметрическая зависимость зонных свойств каналированной частицы от энергии частицы. Показано, что вероятность недипольного фотонного излучения каналированной частицы с энергией $E = 10 \text{ ГэВ}$ в телесный угол $3.6 \cdot 10^{-16} \text{ ср}$, ориентированной вдоль направления распространения каналированной частицы, равна $w_{if}(\omega_{if}) = 0.2 \text{ с}^{-1}$. При увеличении телесного угла, в пределах которого проводятся измерения, вероятность эмиссии фотона значительно возрастает. Такое увеличение вероятности связано с тем, что при больших углах наблюдения преобладающий вклад в вероятность излучения фотона будут вносить матричные элементы перехода второго типа

$$\left| I_{if}^{(2)}(k_x) \right|^2,$$

вклад которых сравним по величине с вкладом матричных элементов первого типа

$$\left| I_{if}^{(1)}(k_x) \right|^2$$

(рис. 5, 6). Показано, что недипольные процессы излучения жестких фотонов каналированными частицами хорошо наблюдаются экспериментально. В эксперименте [17] по излучению электронов и позитронов с энергиями $E > 100$ ГэВ в условиях надбарьерного движения в кристалле германия была получена высокая интегральная по частотам интенсивность излучения. При ориентации пучка электронов относительно оси $\langle 110 \rangle$ кристалла в работе [17] наблюдался также весьма узкий максимум в спектре излучения при частоте $\omega = 0.85E$. Высокая интегральная по частотам интенсивность излучения, наблюдавшаяся в работе [17], объясняется многократным процессом излучения фотона быстрой частицей [18]. Происхождение узкого максимума в спектре излучения при частоте $\omega = 0.85E$ естественным образом может объясняться рассмотренными в настоящей работе процессами излучения быстрой частицей с переходами с первого уровня надбарьерного движения в подбарьерные состояния. В сопутствующей системе координат лептон обладает энергией ε_{\perp} , зависящей от угла влета частицы в монокристалл по отношению к кристаллографической оси. При взаимодействии с усредненным потенциалом кристаллографических осей возможен радиационный переход на связанные каналированные состояния, т. е. процесс радиационной рекомбинации электрона с излучением фотона и переходом электрона в состояние с главным квантовым числом n (связанное состояние!). Из закона сохранения энергии в процессе фоторекомбинации имеем

$$\hbar\omega = (-\varepsilon_n) + \varepsilon_{\perp},$$

где

$$\varepsilon_n = -\varepsilon_0 \frac{1}{n^2}$$

— собственные значения поперечной энергии в двумерной задаче (причем $\varepsilon_0 \sim \gamma = E/mc^2$ для каналированного двумерного электрона). Таким образом, сечение рекомбинации электрона в двумерном потенциале с излучением фотона и переходом электрона в состояние с главным квантовым числом n можно записать в виде формулы Крамерса [19]. Предполагая, что энергия связанного электрона может быть выражена как

$$\varepsilon_n = -\varepsilon_0 \frac{1}{n^2},$$

где

$$\varepsilon_0 = \frac{mc^2 Z^2 e^4 R_{TF}^2 \gamma}{2\hbar^2 d^2}$$

[20], так что

$$\sigma_{rec} = \frac{8\pi\alpha (Z\alpha)^2}{3\sqrt{3}} \frac{s_0}{mc^3 n \hbar^2 \omega (\hbar\omega n^2 - s_0)}.$$

Сечение рекомбинации электрона в двумерном потенциале с излучением фотона и переходом электрона в любое связанное состояние получаем, если в последней формуле просуммировать по всем главным квантовым числам n , $1 \leq n < n_{max}$. Для получения сечения рекомбинации электрона с излучением фотона $\hbar\omega$ просуммируем по всем возможным квантовым числам n :

$$\sigma_{rec} = \sum_{n=1}^{n_{max}} \frac{8\pi\alpha (Z\alpha)^2}{3\sqrt{3}} \frac{s_0}{mc^3 n \hbar^2 \omega (\hbar\omega n^2 - s_0)},$$

где

$$n_{max} = \sqrt{\frac{m\lambda^2 Z^2 e^4 R_{TF}^2}{2\hbar^2 d^2 U}} - 0.5,$$

а λ — некоторый подгоночный параметр, который выбирается так, чтобы потенциал атомной цепочки был близок к потенциалу Линдхарда; Z — атомный номер кристалла.

Благодарности. Авторы благодарят Ю. Кагана, Ю. В. Кононца, И. Я. Полищука, В. Кона, Л. Б. Дубовского, А. С. Ольчака за обсуждение работы.

Финансирование работы. Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства образования и науки РФ в рамках Программы повышения конкурентоспособности Национального исследовательского университета «МИФИ» (2018). Использовано оборудование центра коллективного пользования «Комплекс моделирования и обработки данных исследовательских установок мега-класса» Национального исследовательского центра «Курчатовский институт» (субсидия Минобрнауки, идентификатор работ RFMEFI62117X0016), <http://ckp.nrcki.ru/>.

ЛИТЕРАТУРА

1. В. Г. Барышевский, *Каналирование, излучение и реакции в кристаллах при высоких энергиях*, Изд-во МГУ, Минск (1982).

2. M. A. Kumakhov and R. Weddel, *Radiation of Relativistic Light Particles During Interaction with Single Crystals*, Spectrum, Heidelberg (1991).
3. А. И. Ахиезер, Н. Ф. Шульга, *Электродинамика частиц высоких энергий в веществе*, Наука, Москва (1993) [A. I. Akhiezer and N. F. Shulga, *High-Energy Electrodynamics in Matter*, Gordon and Breach, Amsterdam, (1996)].
4. Ю. Каган, Ю. В. Кононец, ЖЭТФ **58**, 226 (1970); **64**, 1042 (1973); **66**, 1693 (1974).
5. Н. П. Калашников, *Когерентные взаимодействия заряженных частиц в монокристаллах*, Атомиздат, Москва (1981).
6. В. А. Базылев, Н. К. Жеваго, *Излучение быстрых частиц в веществе и во внешних полях*, Наука, Москва (1987).
7. Н. К. Жеваго, ЖЭТФ **75**, 1389 (1978).
8. E. A. Mazur, Nucl. Instrum. Meth. ser. B **355**, 57 (2015), doi:10.1016/j.nimb.2015.02.013.
9. V. N. Baier, V. M. Katkov, and V. M. Strakhovenko, Phys. Stat. Sol. (b) **133**, 211 (1986).
10. В. Н. Байер, В. М. Катков, В. М. Страховенко, *Электромагнитные процессы при высоких энергиях в ориентированных монокристаллах*, Наука, Новосибирск (1989) [V. N. Baier, V. M. Katkov, and V. M. Strakhovenko, *Electromagnetic Processes at High Energies in Oriented Single Crystals*, Singapore World Scientific (1998)].
11. Н. Ф. Шульга, Л. Е. Генденштейн, И. И. Мирошниченко, Е. В. Пегушин, С. П. Фомин, Р. О. Авакян, ЖЭТФ **82**, 50 (1982).
12. E. A. Mazur, Reported at: Charged and Neutral Particles Channeling Phenomena “Channeling 2016”, Desenzano del Garda, Italy, 23–28 September (2016), p. 84.
13. N. P. Kalashnikov and E. A. Mazur, Reported at: Charged and Neutral Particles Channeling Phenomena “Channeling 2018”, Ischea, Italy, 23–28 September (2018), p. 28.
14. Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц, *Квантовая механика*, Гостехиздат, Москва (1963).
15. B. Azadegan and W. Wagner, Nucl. Instrum. Methods. B **402**, 63 (2017).
16. *Handbook of Mathematical Functions*, ed. by M. Abramowitz and I. A. Stegun, National Bureau of Standards, Applied Mathematics Series, New York (1964).
17. A. Belkacem, G. Bologna, and M. Chevallier, Phys. Lett. B **177**, 211 (1980).
18. Ю. В. Кононец, В. А. Рябов, Письма в ЖЭТФ **48**, 303 (1988).
19. H. A. Kramers and W. Heisenberg, Zs. Phys. B **31**, 681 (1925).
20. N. P. Kalashnikov, *Coherent Interactions of Charged Particles in Single Crystals. Scattering and Radiative Processes in Single Crystals*, Harwood Academic Publishers, New York, London (1988).