ПОВЕРХНОСТЬ. РЕНТГЕНОВСКИЕ, СИНХРОТРОННЫЕ И НЕЙТРОННЫЕ ИССЛЕДОВАНИЯ, 2022, № 5, с. 84–93

УДК 539.17:535.44

О СИЛЬНОМ УВЕЛИЧЕНИИ АМПЛИТУДЫ ВОЛНОВОЙ ФУНКЦИИ МАССИВНОЙ НЕРЕЛЯТИВИСТСКОЙ ЧАСТИЦЫ, ПАДАЮЩЕЙ НА КРИСТАЛЛ (ОДНОМЕРНОЕ ПРИБЛИЖЕНИЕ)

А. А. Крайский[a], А. В. Крайский[b], *

[a]*Институт общей физики им. А.М. Прохорова РАН, Москва, 119991 Россия*
[b]*Физический институт им. П.Н. Лебедева РАН, Москва, 119991 Россия*
**e-mail: kraiski@sci.lebedev.ru*

Поступила в редакцию 18.02.2021 г.
После доработки 04.06.2021 г.
Принята к публикации 11.06.2021 г.

Исследовано увеличение амплитуды волновой функции массивной нерелятивистской частицы, падающей на одномерный кристалл. Аналогично случаю распространения света в одномерной периодической среде построена теория возмущений при малых отклонениях энергии падающей частицы от границы запрещенной зоны. Выведены формулы для волновой функции частицы в кристалле, коэффициентов отражения и пропускания. Детально проанализированы общие черты и различия между исходными уравнениями, полученными характеристиками для массивной частицы и свойствами светового поля. Обнаружено, что основные свойства волновой функции имеют те же особенности, что и свойства светового поля. Приведены численные оценки увеличения амплитуды волновой функции частицы внутри одномерной периодической среды с периодом, равным постоянной решетки палладия. Показано, что при уменьшении энергии падающей частицы значительно увеличивается амплитуда волновой функции, что коррелирует с наблюдаемым в экспериментах увеличением выхода реакций D–D для частиц с низкой энергией по сравнению со значениями, получаемыми экстраполяцией данных из области высоких энергий.

Ключевые слова: ядерные реакции, кристаллы, увеличение выхода, дейтроны, одномерный периодический потенциал, запрещенная зона, окна прозрачности.

DOI: 10.31857/S1028096022030128

ВВЕДЕНИЕ

Значительный интерес представляет измерение сечений реакций ядерного синтеза при низких энергиях – меньше 100 кэВ [1, 2], но их прямое измерение в таком диапазоне энергии затруднено. Поэтому эти сечения вычисляют с помощью экстраполяции измеренных на ускорителях сечений реакций в области высоких энергий. Однако при использовании в экспериментах на ускорителях твердотельных мишеней с имплантированным в них дейтерием, бомбардируемых ускоренными дейтронами с низкими энергиями (менее 100 кэВ), наблюдается значительное увеличение выхода D–D-реакции по сравнению со значениями, полученными экстраполяцией из области высоких энергий (далее будем называть этот эффект и его численную характеристику “увеличением выхода реакции”, подразумевая, что это есть увеличение выхода по отношению к значению, полученному экстраполяцией). Этот эффект обнаружен в большинстве исследованных металлов (в [3, 4] исследовано свыше 70 элементов периодической системы). В [1, 2] энергия ионов составляла от 10 до 25 кэВ. При меньшей энергии ионов (0.8–2.5 кэВ) наблюдается еще большее увеличение выхода этой реакции [5, 6]. Различные аспекты D–D-реакций в кристаллических структурах при воздействии ускоренных частиц, включая ионы и электроны, продолжают привлекать внимание исследователей [7–12].

В [13, 14] предположили, что возможной причиной такого увеличения выхода ядерных D–D-реакций в кристаллах может быть увеличение амплитуды волновой функции налетающих частиц внутри кристалла по сравнению с амплитудой в отсутствие кристалла. Это предположение основывалось на аналогии уравнения Шредингера движения частицы в периодическом одномерном потенциале и уравнения распространения светового поля в периодической слоистой структуре. Как и в случае света, это происходит на отдельных участках энергетического спектра падающих частиц – в так называемых окнах прозрачности.

Целью настоящей работы было исследовать увеличение в окне прозрачности амплитуды волновой функции, падающей на кристалл нерелятивистской частицы с энергией, близкой к краю запрещенной зоны, а также получить аналитические формулы, выражающие эту функцию, положение и ширину окна прозрачности через решения уравнения Шредингера на краю запрещенной зоны и параметры кристалла, и оценить увеличение выхода реакции. Вопросы ядерных реакций в работе не затронуты.

ОСОБЕННОСТИ ДВИЖЕНИЯ МАССИВНОЙ ЧАСТИЦЫ ВБЛИЗИ КРАЯ ЗАПРЕЩЕННОЙ ЗОНЫ

Для решения поставленной задачи будем следовать методу, разработанному в [15] для световой волны. При нормальном падении частицы с энергией E на одномерный кристалл толщиной H волновая функция в нем будет описываться суммой двух волн Блоха (не будем учитывать спиновые взаимодействия) с квазиимпульсами $q_1^{(\mathrm{in})}$ и $q_2^{(\mathrm{in})}$ ($E(q_1^{(\mathrm{in})}) = E(q_2^{(\mathrm{in})}) = E$). В случае достаточно толстого кристалла окна прозрачности будут лежать близко к краю разрешенной зоны (E_0, q_0) – волновой вектор q_0 соответствует границе разрешенной зоны, так что отклонение Δq волновых векторов $q_1^{(\mathrm{in})}$ и $q_2^{(\mathrm{in})}$ от границы зоны будет мало ($\sim 1/H$). Гамильтониан частицы разделится на невозмущенный гамильтониан H_0, не зависящий от Δq (формулы (6)–(8)), и член, пропорциональный Δq, который обозначим $V(x)$. Из-за того, что величина Δq будет порядка $1/H$, $V(x)$ можно считать малой поправкой. Построим теорию возмущений, рассматривая $V(x)$ как возмущение и следуя [16]. В результате получим выражение для волновой функции $\Psi_{j,q}(x)$ (j – номер разрешенной зоны для частицы, отсчет снизу) в окрестности края разрешенной зоны через функции $\Psi_{j,q_0}(x)$, являющиеся решениями в точке q_0 задачи на собственные значения с гамильтонианом H_0. Так будет получено решение поставленной задачи через неизвестный (при необходимости можно найти в каждом конкретном случае) набор собственных функций $\Psi_{j,q_0}(x)$, соответствующий границе зоны. Заметим, что, конечно, значения E_0 и q_0 и соответствующий им один набор собственных функций волн Блоха $\Psi_{j,q_0}(x)$ зависят от параметров структуры: периода, толщины слоя и конкретного вида потенциала $U(x)$, в котором движется частица в кристалле.

У представленного метода есть несколько плюсов: во-первых, не надо искать решение при каждом значении энергии падающей частицы, а только на краю разрешенной зоны; во-вторых, можно проанализировать зависимости увеличения амплитуды волновой функции и параметров окон прозрачности от толщины кристалла и номера окна, не конкретизируя вид потенциала, в котором движется частица. Также плюсом является то, что ошибка метода становится малой в случае достаточно толстого кристалла, в отличие от метода связанных волн. И метод, вероятно, можно перенести на случай двух- и трехмерного потенциала.

Движение частицы массой M в одномерном кристалле описывается уравнением Шредингера:

$$-\frac{\hbar^2}{2M}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\Psi(x) + U(x)\Psi(x) = E\Psi(x) \qquad (1)$$

($\hbar$ – постоянная Планка). В случае периодического потенциала с периодом a волновая функция в неограниченном одномерном кристалле по теореме Блоха имеет вид:

$$\Psi_{j,q}(x) = \exp(iqx)\psi_{j,q}(x), \qquad (2)$$

где $\psi_{j,q}(x+a) = \psi_{j,q}(x)$. Подставляя (2) в (1), имеем:

$$\frac{\hbar^2}{2M}\left[q - i\frac{\partial}{\partial x}\right]^2\psi_{j,q}(x) + U(x)\psi_{j,q}(x) = E\psi_{j,q}(x). \qquad (3)$$

Рассмотрим частицы, движущиеся с энергией E вблизи края разрешенной зоны (E_0, q_0). Отклонение их волновых чисел от волнового числа, соответствующего решению на границе разрешенной зоны q_0, есть Δq. Тогда

$$\begin{gathered}\frac{\hbar^2}{2M}\left[q_0 + \Delta q - i\frac{\partial}{\partial x}\right]^2\psi_{j,q_0+\Delta q}(x) + \\ + U(x)\psi_{j,q_0+\Delta q}(x) = E\psi_{j,q_0+\Delta q}(x).\end{gathered} \qquad (4)$$

Выделим члены с Δq:

$$\begin{gathered}\left\{\frac{\hbar^2}{2M}\left[q_0 - i\frac{\partial}{\partial x}\right]^2 + U(x)\right\}\psi_{j,q_0+\Delta q}(x) + \\ + 2\frac{\hbar^2}{2M}\Delta q\left[q_0 - i\frac{\partial}{\partial x}\right]\psi_{j,q_0+\Delta q}(x) = \\ = \left[E - \frac{\hbar^2}{2M}\Delta q^2\right]\psi_{j,q_0+\Delta q}(x).\end{gathered} \qquad (5)$$

Разделив это уравнение на $\hbar^2 q_0^2/(2M)$, получаем выражение в удобном виде:

$$\begin{gathered}\left\{\left[1 - i\frac{\partial}{q_0\partial x}\right]^2 + \frac{2M}{\hbar^2 q_0^2}U(x)\right\}\psi_{j,q_0+\Delta q}(x) + \\ + 2\frac{\Delta q}{q_0}\left[1 - i\frac{\partial}{q_0\partial x}\right]\psi_{j,q_0+\Delta q}(x) = \\ = \left[\frac{2M}{\hbar^2 q_0^2}E - \frac{\Delta q^2}{q_0^2}\right]\psi_{j,q_0+\Delta q}(x).\end{gathered} \qquad (6)$$

Будем рассматривать выражение в фигурных скобках уравнения (6):

$$H_0 = \left[1 - i\frac{\partial}{q_0\partial x}\right]^2 + \frac{2M}{\hbar^2 q_0^2}U(x), \quad (7)$$

как невозмущенный гамильтониан, а выражение

$$V(x) = 2\frac{\Delta q}{q_0}\left[1 - i\frac{\partial}{q_0\partial x}\right], \quad (8)$$

как возмущение. Выделив невозмущенную (не зависящую от Δq) часть гамильтониана H_0 и возмущение $V(x)$, имеем:

$$H_0\psi_{j,q_0+\Delta q}(x) + V(x)\psi_{j,q_0+\Delta q}(x) = \tilde{E}\psi_{j,q_0+\Delta q}(x), \quad (9)$$

где

$$\tilde{E} = \frac{2M}{\hbar^2 q_0^2}E - \frac{\Delta q^2}{q_0^2}. \quad (10)$$

Сравним с распространением света [15]. В случае нормального падения плоской монохроматической световой волны на плоский одномерный фотонный кристалл с границами, перпендикулярными оси x, вдоль которой распространяется свет, а диэлектрическая проницаемость зависит только от координаты x, поле $u(x)$ в каждой из двух мод, различающихся поляризацией, будет описываться уравнением:

$$\frac{\partial^2}{\partial x^2}u(x) = \frac{\omega^2}{c^2}\varepsilon(x)u(x),$$

где ω – частота, $\varepsilon(x)$ – диэлектрическая проницаемость, c – скорость света. Поле в периодической среде по теореме Блоха:

$$u_{j,q}(x) = \exp(iqx)\psi_{j,q}(x),$$

где $\psi_{j,\,q}(x + a) = \psi_{j,\,q}(x)$.

Задача на собственные значения будет иметь вид:

$$\begin{gathered} H_0^{(l)}\psi_{q_0+\Delta q}(x) + V^{(l)}(x)\psi_{q_0+\Delta q}(x) = \\ = \tilde{E}^{(l)}\frac{\varepsilon(x)}{\varepsilon_0}\psi_{q_0+\Delta q}(x), \end{gathered} \quad (11)$$

$$H_0^{(l)} = \left[1 - i\frac{\partial}{q_0\partial x}\right]^2, \quad \tilde{E}^{(l)} = \frac{\omega^2}{c^2 q_0^2}\varepsilon_0 - \left(\frac{\Delta q}{q_0}\right)^2, \quad (12)$$

$\varepsilon(x)$ – диэлектрическая проницаемость, ε_0 – ее среднее значение, ω – частота излучения, c – скорость света. Она отличается от (9) отсутствием в $H_0^{(l)}$ потенциальной энергии $U(x)$, наличием в правой части диэлектрической проницаемости $\varepsilon(x)$ и другим видом оператора возмущения $V^{(l)}(x)$:

$$\begin{gathered} V^{(l)}(x) = \frac{\Delta q}{q_0}V_1(x) + \left(\frac{\Delta q}{q_0}\right)^2 V_2(x), \\ V_1(x) = 2\left[1 - i\frac{\partial}{q_0\partial x}\right], \\ V_2(x) = 1 - \frac{\varepsilon(x)}{\varepsilon_0}, \end{gathered} \quad (13)$$

а именно отсутствием в $V(x)$ оператора $V_2(x)$, в то время как $V_1(x)$ сохраняет свой вид при переходе от света к массивной частице ((8) и (13)). Сравнивая далее выражения для собственных значений (10) и (12), видим, что в отличие от случая распространения света, когда частота входит в квадрате в выражение (12) для собственного значения, энергия массивной частицы E входит в соответствующее выражение (10) для собственного значения линейно. Отметим, что в оба выражения входит член $\Delta q^2 / q_0^2$.

Построим, следуя [16], теорию возмущений по $V(x)$ задачи (9). Нулевое приближение (невозмущенное решение):

$$\psi^{(0)}_{i,q_0\pm\Delta q}(x) = \psi_{i,q_0}(x).$$

Первая поправка будет:

$$\begin{gathered} \psi^{(1)}_{i,q_0\pm\Delta q}(x) = \sum_{j\neq i}\frac{\langle\psi_{j,q_0}|V(x)|\psi_{i,q_0}\rangle}{[\tilde{E}_i(q_0) - \tilde{E}_j(q_0)]}\psi_{j,q_0} = \\ = \pm\frac{\Delta q}{q_0}\sum_{j\neq i}\frac{\left\langle\psi_{j,q_0}\left|2\left[1 - i\frac{\partial}{q_0\partial x}\right]\right|\psi_{i,q_0}\right\rangle}{[\tilde{E}_i(q_0) - \tilde{E}_j(q_0)]}\psi_{j,q_0}. \end{gathered}$$

Таким образом, с точностью до членов первого порядка малости по $\Delta q/q_0$ для периодических функций ψ в блоховских волнах (2) имеем:

$$\begin{gathered} \psi_{i,q_0\pm\Delta q}(x) = \\ = \psi_{i,q_0} \pm \frac{\Delta q}{q_0}\sum_{j\neq i}\frac{\left\langle\psi_{j,q_0}\left|2\left[1 - i\frac{\partial}{q_0\partial x}\right]\right|\psi_{i,q_0}\right\rangle}{[\tilde{E}_i(q_0) - \tilde{E}_j(q_0)]}\psi_{j,q_0} + \\ + O\left((\Delta q)^2\right), \end{gathered} \quad (14)$$

где i, j – номера разрешенных зон кристалла. Поскольку в [15] рассматривали поле до первого порядка малости по Δq, а отличие оператора возмущения для массивной частицы начинается со второго порядка по Δq, выражение (14) в первом порядке малости не будет отличаться от соответствующего выражения для света. Однако заметим, что невозмущенный гамильтониан, а, соответственно, и невозмущенные собственные функции, а также и выражения для невозмущенных собственных значений в случае массивных частиц будут коренным образом отличаться от случая распространения света из-за кардинально другой формулировки невозмущенной задачи (9), в которой положено $V = 0$ по сравнению со случаем распространения света (11) с $V = 0$. Для массивной частицы в кристалле блоховские волны состояний с отклонением Δq от границы зоны q_0 будут иметь вид:

$$\Psi_{i,q_0\pm\Delta q}(x) = \exp[i(q_0 \pm \Delta q)x]\psi_{i,q_0\pm\Delta q}(x) = \\ = \exp[\pm i\Delta qx]\times \\ \times\left[\Psi_{i,q_0}(x) \pm i\frac{\Delta q}{q_0}M_i(x) + O\left((\Delta q)^2\right)\right], \tag{15}$$

где $\Psi_{i,q_0}(x)$ – решение на краю зоны,

$$M_i(x) = -2\sum_{j\neq i}\frac{\left\langle\Psi_{j,q_0}\left|\frac{\partial}{q_0\partial x}\right|\Psi_{i,q_0}\right\rangle}{[E_i(q_0) - E_j(q_0)]\frac{2M}{(\hbar^2 q_0^2)}}\Psi_{j,q_0}(x) = \\ = -\frac{2}{E_{\text{gap},i}}\sum_{j\neq i}m_{ji}E_{ij}\Psi_{j,q_0}(x), \tag{16}$$

$$m_{ji} = \left\langle\Psi_{j,q_0}\left|\frac{\partial}{q_0\partial x}\right|\Psi_{i,q_0}\right\rangle. \tag{17}$$

Для удобства анализа в (16) введены безразмерные величины: ширина запрещенной зоны нормирована на энергию свободной частицы с импульсом, соответствующим краю запрещенной зоны:

$$E_{\text{gap},i} = \frac{E_i(q_0) - E_{i-g}(q_0)}{\frac{\hbar^2 q_0^2}{2M}} \tag{18}$$

и

$$E_{ij} = \frac{E_i(q_0) - E_{i-g}(q_0)}{E_i(q_0) - E_j(q_0)}, \tag{19}$$

где $i - g$ – номер разрешенной зоны, лежащей с другой стороны запрещенной зоны, вблизи края которой в i-й зоне происходит рассмотрение (g принимает значения $+1$, если уровень ниже рассматриваемой зоны, и -1, если выше).

Оценим, что означает условие применимости теории возмущений

$$|V_{mn}| \ll \left|\tilde{E}_n^{(0)}(q_0) - \tilde{E}_m^{(0)}(q_0)\right|, \tag{20}$$

V_{mn} – матричный элемент оператора V. Для состояний, соответствующих противоположным краям запрещенной зоны, m_{ji} будет порядка единицы, в остальных случаях эта величина также не превосходит единицу. Из этого следует, что условие (20) приводит к условию

$$2\frac{|\Delta q|}{q_0} \ll |E_{\text{gap},i}| = \frac{|\Delta E_{fz}|}{\frac{\hbar^2 q_0^2}{2M}}. \tag{21}$$

То есть условием применимости предложенного метода является малость отношения отклонения волнового числа частицы от границы разрешенной зоны к ее волновому числу по сравнению с отношением ширины запрещенной зоны (ΔE_{fz}) к энергии частицы на краю зоны.

Волновая функция падающей слева на кристалл частицы имеет вид: $\Psi_0 = \Psi\exp(-iE_1t/\hbar + iq_1x)$. Энергия частицы E_1 близка к границе i-й разрешенной зоны (E_0, q_0). Поле в кристалле $\Psi_{E_1}(x)$ будет складываться из двух волн Блоха с квазиимпульсами $q_1^{(\text{in})} = q_0 - \Delta q$ и $q_2^{(\text{in})} = -q_0 + \Delta q$, соответствующих энергии E_1, $\Psi_{q_0-\Delta q}$ и $\Psi_{-q_0+\Delta q}$ ($E(q_0 - \Delta q) = E(-q_0 + \Delta q) = E_1$), описанных в (2):

$$\Psi_{E_1}(x) = C_1\Psi_{q_0-\Delta q}(x) + C_2\Psi_{-q_0+\Delta q}(x). \tag{22}$$

Из слоя выходят отраженная частица с волновой функцией $\Psi_{\text{ref}} = \Psi_1\exp(-iE_1t/\hbar - iq_1x)$ и прошедшая частица с волновой функцией $\Psi_{\text{tr}} = \Psi_2\exp(-iE_1t/\hbar + iq_1x)$. Условия сшивки на границах ($x = x_0$, $x = x_0 + H$) имеют тот же вид, что и в случае распространения света – непрерывность волновой функции и ее производной на границах кристалла. В результате сшивки получается система четырех уравнений с четырьмя неизвестными – коэффициентами C_1, C_2, с которыми волны Блоха входят в линейную комбинацию (22), и амплитудами волновых функций прошедшей (Ψ_2) и отраженной (Ψ_1) частиц – имеет тот же вид, что и в случае распространения света [15]. Однако отличия будут заключаться в других собственных функциях $\Psi_{j,q_0}(x)$ – из-за иной формулировки задачи на собственные значения в случае массивной частицы (9). Решение ее аналогично решению в случае распространения света [15]. Отметим, что границы кристалла считаются резкими. Амплитуда волновой функции отраженной частицы:

$$\Psi_1 = (1/Z)i\sin(\Delta qH)\times \\ \times\left[\left(\Psi_{i,q_0}(x_0) + (i/q_1)\Psi'_{i,q_0}(x_0)\right)^2 + O\left((\Delta q)^2\right)\right], \tag{23}$$

$$
\begin{gathered}
Z = i\sin(\Delta qH)\times \\
\times\left[\Psi_{i,q_0}^2(x_0) + (\Psi'_{i,q_0}(x_0)/q_1)^2 + O\left((\Delta q)^2\right)\right] - \\
- 2(\Delta q/q_1)\cos(\Delta qH)\times \\
\times\left[\Psi_{i,q_0}^2(x_0) + \Psi_{i,q_0}(x_0)\frac{\partial}{q_0\partial x}M_i(x_0) - \right. \\
\left. - M_i(x_0)\frac{\partial}{q_0\partial x}\Psi_{i,q_0}(x_0) + O\left((\Delta q)^2\right)\right].
\end{gathered} \tag{24}
$$

Амплитуда волновой функции прошедшей частицы Ψ_2 имеет вид:

$$
\begin{gathered}
\Psi_2 = -2(\Psi/Z)\exp(iq_0H)(\Delta q/q_1)\times \\
\times\left[\Psi_{i,q_0}^2(x_0) + \Psi_{i,q_0}(x_0)\frac{\partial}{q_0\partial x}M_i(x_0) - \right. \\
\left. - M_i(x_0)\frac{\partial}{q_0\partial x}\Psi_{i,q_0}(x_0) + O\left((\Delta q)^2\right)\right].
\end{gathered} \tag{25}
$$

Пространственное распределение волновой функции $\Psi_{E_1}(x)$ внутри кристалла:

$$
\begin{gathered}
\Psi_{E_1}(x) = \left(\frac{\Psi}{Z}\right)\left\{2i\sin(\Delta q(H-x))\times\right. \\
\times\left[\left(\Psi_{i,q_0}(x_0) + \left(\frac{i}{q_1}\right)\Psi'_{i,q_0}(x_0)\right)\times\right. \\
\left.\times\Psi_{i,q_0}(x) + O\left((\Delta q)^2\right)\right] - \\
- 2\left(\frac{\Delta q}{q_1}\right)\cos(\Delta q(H-x))\times \\
\times\left[\Psi_{i,q_0}(x_0)\Psi_{i,q_0}(x) + \right. \\
+ \Psi_{i,q_0}(x)\frac{\partial}{q_0\partial x}M_i(x_0) - M_i(x)\frac{\partial}{q_0\partial x}\times \\
\times\Psi_{i,q_0}(x_0) + i\frac{q_1}{q_0}(\Psi_{i,q_0}(x_0)M_i(x) - \\
\left.\left. - \Psi_{i,q_0}(x)M_i(x_0)) + O\left((\Delta q)^2\right)\right]\right\}.
\end{gathered} \tag{26}
$$

Поскольку выражения для функций Блоха (15) и условия сшивки совпадают с соответствующими уравнениями для поля в случае распространения света, выражения для волновой функции через волновую функцию на границе зоны такие же. Однако надо помнить, что различия случаев массивной частицы и света в выражениях (23)–(26) скрыты в решениях Ψ_{i,q_0} соответствующего невозмущенного уравнения (замечания после уравнения (14)). Таким образом, общая форма зависимостей (23)–(26) от функций Ψ_{i,q_0}, как и было предсказано в [14], оказалась той же, что и для света.

Так же, как и в случае распространения света, при $\Delta q \approx \pi n/H$ (n – номер окна прозрачности) $\sin(\Delta qH) \approx 0$ и в (26) знаменатель Z (24) становится очень малой величиной – порядка Δq. Поэтому за счет первого слагаемого числителя в выражении (26) амплитуда волновой функции сильно возрастает внутри кристалла в точках $x_{\max} \approx (l + 1/2)H/n$ (l – целое число, меньше номера окна n), т.е. действительно происходит значительное увеличение амплитуды волновой функции в толще кристалла, как было предсказано в [14]. Отражение (Ψ_1) отсутствует, а пропускание (Ψ_2) становится равным единице. Таким образом, как и в случае распространения света, формируются окна прозрачности вблизи края запрещенной зоны. При некоторой энергии амплитуда волновой функции внутри слоя достигает максимума:

$$
\begin{gathered}
\left|\Psi_{E_1}\right|_{\max} = \\
= \left(\frac{|\Psi|}{|Z|}\right)2\left|\Psi_{i,q_0}(x_0) + (i/q_1)\Psi'_{i,q_0}(x_0)\right|\left|\Psi_{i,q_0}(x)\right|_{\max}.
\end{gathered} \tag{27}
$$

Это выражение получено в результате отбрасывания в числителе (26) второго слагаемого вследствие малого члена с Δq и замены в первом слагаемом sin на единицу. При попадании энергии частицы в окно прозрачности поле в толще кристалла сильно возрастает – в максимуме окна с номером n максимальная амплитуда волновой функции описывается выражением:

$$
\begin{gathered}
\left|\Psi_{E_1}\right|_{\max} \approx |\Psi|\frac{Hq_1}{\pi n}\frac{\left|\Psi_{i,q_0}(x_0) + (i/q_1)\Psi'_{i,q_0}(x_0)\right|\left|\Psi_0(x)\right|_{\max}}{\left|\Psi_{i,q_0}^2(x_0) + \Psi_{i,q_0}(x_0)\frac{\partial}{q_0\partial x}M_i(x_0) - M_i(x_0)\frac{\partial}{q_0\partial x}\Psi_{i,q_0}(x_0)\right|} = \\
= \frac{Hq_1\left|E_{\mathrm{gap},i}\right|}{2\pi n}\frac{\left|\Psi_{i,q_0}(x_0) + (i/q_1)\Psi'_{i,q_0}(x_0)\right|\left|\Psi_0(x)\right|_{\max}}{\left|\sum_{j\neq i}m_{ji}E_{ij}\left[\Psi_{i,q_0}(x_0)\frac{\partial}{q_0\partial x}\Psi_{j,q_0}(x_0) - \Psi_{j,q_0}(x_0)\frac{\partial}{q_0\partial x}\Psi_{i,q_0}(x_0)\right] - \frac{E_{\mathrm{gap},i}\Psi_{i,q_0}^2(x_0)}{2}\right|}.
\end{gathered} \tag{28}
$$

Таким образом, получено, что, как и в случае распространения света, волновая функция частицы, падающей на кристалл, возрастает в окне прозрачности, причем максимальная амплитуда волновой функции, как и поля в случае распространения света, пропорциональна толщине кристалла и обратно пропорциональна номеру окна. Заметим, что полученные пропорциональности не зависят от конкретного вида потенциала $U(x)$ на периоде кристалла.

НЕКОТОРЫЕ СВОЙСТВА ОКОН ПРОЗРАЧНОСТИ ВБЛИЗИ КРАЯ ЗАПРЕЩЕННОЙ ЗОНЫ

Рассмотрим теперь некоторые свойства окон прозрачности. Вблизи края разрешенной зоны зависимость энергии от квазиимпульса частицы квадратична:

$$E(q) = E_0(q_0) + \frac{\hbar^2 q_0^2}{2M} a_i \left(\frac{\Delta q}{q_0}\right)^2 + o\left(\left(\frac{\Delta q}{q_0}\right)^2\right) \quad (29)$$

(линейный по Δq член на краю зоны обращается в ноль). Коэффициент a_i определим, находя поправки второго порядка для собственных значений $\tilde{E}$ (10) задачи (9) (заметим, что поправка n-го порядка пропорциональна $\Delta q/q_0$ в n-й степени в отличие от случая распространения света, когда оператор возмущения кроме линейного по $\Delta q/q_0$ члена содержит еще и квадратичный). Выражение для поправки второго порядка для задачи на собственные значения по теории возмущений (подробнее в [16]) имеет вид:

$$\tilde{E}_i^{(2)} = \sum_{j\neq i} \frac{\left|\langle \psi_{j,q_0} | V(x) | \psi_{i,q_0}\rangle\right|^2}{[\tilde{E}_i(q_0) - E_j(q_0)]} = 4\left(\frac{\Delta q}{q_0}\right)^2 \sum_{j\neq i} \frac{\left|\left\langle \psi_{j,q_0} \left| \frac{\partial}{q_0 \partial x} \right| \psi_{i,q_0} \right\rangle\right|^2}{[\tilde{E}_i(q_0) - E_j(q_0)] \frac{2M}{(\hbar^2 q_0^2)}}. \quad (30)$$

Из (10) имеем:

$$E = \frac{\hbar^2 q_0^2}{2M}\left(\tilde{E} + \frac{\Delta q^2}{q_0^2}\right). \quad (31)$$

Из (29)–(31) с учетом (16)–(19) получаем, что

$$a_i = 4\sum_{j\neq i} \frac{\left|\left\langle \Psi_{j,q_0} \left| \frac{\partial}{q_0 \partial x} \right| \Psi_{i,q_0} \right\rangle\right|^2}{[E_i(q_0) - E_j(q_0)] \frac{2M}{(\hbar^2 q_0^2)}} + 1 = \frac{4}{E_{\mathrm{gap},i}} \sum_{j\neq i} |m_{ji}|^2 E_{ij} + 1. \quad (32)$$

Подставив значения Δq, соответствующие максимумам окон прозрачности, в (29), получим для их энергии:

$$E_n = E_0 + \frac{\hbar^2}{2M} a_i \left(\frac{\pi n}{H}\right)^2 + o\left(\left(\frac{\pi n}{H}\right)^2\right). \quad (33)$$

Определим ширину окна прозрачности. Решение проведем так же, как делали в случае распространения света [15]. Амплитуда волновой функции прошедшей частицы имеет вид:

$$\Psi_2 = \Psi \frac{\exp[iq_0 H]}{\cos(\Delta q(E) H) - iA\sin(\Delta q(E) H)}, \quad (34)$$

где

$$A = \frac{q_1}{2\Delta q(E)} \frac{\left[\Psi_{i,q_0}^2(x_0) + \left(\Psi'_{i,q_0}(x_0)/q_1\right)^2 + O\left((\Delta q)^2\right)\right]}{\left[\Psi_{i,q_0}^2(x_0) + \Psi_{i,q_0}(x_0)\frac{\partial}{q_0\partial x} M_i(x_0) - M_i(x_0)\frac{\partial}{q_0 \partial x}\Psi_{i,q_0}(x_0) + O\left((\Delta q)^2\right)\right]}. \quad (35)$$

– большая величина. Соответственно, половина ширины области, соответствующей окну прозрачности, – dq_w – будет малой величиной. Следовательно, подставляя эту величину в (34), заменяя $\cos(dq_w H/2)$ на единицу, $\sin(dq_w H/2)$ на $dq_w H/2$, из условия $|\Psi|^2 = |\Psi_{\max}|^2/2$ имеем:

$$\frac{dq_w}{2} = \frac{1}{|A| H} \ll \Delta q_n = \frac{\pi n}{H}. \quad (36)$$

Отсюда ширина окна прозрачности (если взять дифференциалы от обеих частей уравнения (29)):

$$dE = \frac{\hbar^2}{M}|a_i|\Delta q dq_w = 32\frac{\hbar^2}{M}\frac{\pi^2 n^2}{q_1 H^3 E^2_{\text{gap},i}}\times$$
$$\times\frac{\left|\sum_{j\neq i}|m_{ji}|^2 E_{ij} + \frac{E_{\text{gap},i}}{4}\right|}{\left[\left(\Psi_{i,q_0}(x_0)\right)^2 + \left(\frac{1}{q_1}\frac{\partial\Psi_{i,q_0}(x_0)}{\partial x}\right)^2\right]}\times$$
$$\times\left|\sum_{j\neq i} m_{ji}E_{ij}\left(\frac{\partial\Psi_{i,q_0}(x_0)}{q_0\partial x}\Psi_{j,q_0}(x_0) - \right.\right. \tag{37}$$
$$\left. - \frac{\partial\Psi_{j,q_0}(x_0)}{q_0\partial x}\Psi_{i,q_0}(x_0)\right) +$$
$$\left. + 0.5E_{\text{gap},i}\left(\Psi_{i,q_0}(x_0)\right)^2\right|.$$

Таким образом, ширина окна прозрачности пропорциональна квадрату номера окна (n^2) и обратно пропорциональна кубу толщины кристалла (H^3), как и в случае распространения световой волны в фотонном кристалле конечного размера. Эта пропорциональность также не зависит от вида потенциала.

Напомним выражения для зависимости $\omega(q)$ вблизи края зоны фотонного кристалла при прохождении света [15]:

$$\frac{\omega_i^2(q)}{c^2 q_0^2}\varepsilon_0 = \frac{\omega_i^2(q_0)}{c^2 q_0^2}\varepsilon_0 + a_i\left(\frac{\Delta q}{q_0}\right)^2 + o\left(\left(\frac{\Delta q}{q_0}\right)^2\right), \tag{38}$$

$$a_i = 4\sum_{j\neq i}\frac{\left|\left\langle u_{j,q_0}\left|\frac{\partial}{\partial x}\right|u_{i,q_0}\right\rangle\right|^2}{\left[\omega_i^2(q_0) - \omega_j^2(q_0)\right]\frac{\varepsilon_0}{c^2}} + \langle u_{i,q_0}||u_{i,q_0}\rangle =$$
$$= \frac{4}{\varepsilon_{\text{gap},i}}\sum_{j\neq i}|m_{ji}|^2\varepsilon_{ij} + \langle u_{i,q_0}||u_{i,q_0}\rangle, \tag{39}$$

положений максимумов окон прозрачности:

$$\omega_n = \omega(q_0) + \frac{1}{2}\frac{c^2}{\omega(q_0)\varepsilon_0}a_i\left(\frac{\pi n}{H}\right)^2 + o\left(\left(\frac{\pi n}{H}\right)^2\right) \tag{40}$$

и их ширин [15]:

$$d\omega_n = 4c|a_i|\frac{\pi^2 n^2}{k_1^2 H^3}\left|\frac{u_{i,q_0}^2(x_0) + (i/k_1)\left(u'_{i,q_0}(x_0)M_i^{(l)}(x_0) - u_{i,q_0}(x_0)M_i^{(l)\prime}(x_0)\right)}{u_{i,q_0}^2(x_0) + \left(u'_{i,q_0}(x_0)/k_1\right)^2}\right| =$$
$$= 32\frac{c}{\sqrt{\varepsilon_0}}\frac{1}{\frac{\omega}{c}\sqrt{\varepsilon_0}}\frac{\pi^2 n^2}{k_1 H^3\varepsilon^2_{\text{gap},i}}\frac{\left|\sum_{j\neq i}|m_{ji}|^2\varepsilon_{ij} + 0.25\varepsilon_{\text{gap},i}\langle u_{i,q_0}||u_{i,q_0}\rangle\right|}{\left[\left(u_{i,q_0}(x_0)\right)^2 + \left(\frac{q_0}{k_1}\frac{\partial u_{i,q_0}(x_0)}{q_0\partial x}\right)^2\right]}\times \tag{41}$$
$$\times\left|\sum_{j\neq i}m_{ji}\varepsilon_{ij}\left(\frac{\partial u_{i,q_0}(x_0)}{q_0\partial x}u_{j,q_0}(x_0) - \frac{\partial u_{j,q_0}(x_0)}{q_0\partial x}u_{i,q_0}(x_0)\right) + 0.5\varepsilon_{\text{gap},i}\left(u_{i,q_0}(x_0)\right)^2\right|.$$

$$M_i^{(l)}(x) =$$
$$= -\sum_{j\neq i}\frac{2\left\langle u_{j,q_0}\left|\frac{\partial}{\partial x}\right|u_{i,q_0}\right\rangle}{\left\langle u_{j,q_0}\left|\frac{\varepsilon(x)}{\varepsilon_0}\right|u_{j,q_0}\right\rangle\left[\omega_i^2(q_0) - \omega_j^2(q_0)\right]\frac{\varepsilon_0}{c^2}}u_{j,q_0}(x), \tag{42}$$

$$\varepsilon_{\text{gap},i} = \frac{\omega_i^2(q_0) - \omega_{i-g}^2(q_0)}{c^2 q_0^2}\varepsilon_0,$$

$$\varepsilon_{ij} = \frac{\omega_i^2(q_0) - \omega_{i-g}^2(q_0)}{\omega_i^2(q_0) - \omega_j^2(q_0)}, \tag{43}$$

где k_1 – волновое число света вне фотонного кристалла, $u_{j,q_0} = \exp[iq_0 x]\psi_{j,q_0}$, ψ_{j,q_0} – решения невозмущенной задачи на собственные значения ((11) с $V = 0$)). Сопоставление этого комплекта выражений с выражениями для массивной частицы (32), (33), (37), (18), (19) показывает, что с формальной точки зрения они в значительной степени похожи. Основное отличие случая массивной частицы, рассматриваемого в настоящей работе, от случая распространения света в конечном фотонном кристалле заключается в других собственных функциях Ψ_{j,q_0}, получаемых при кардинально другой формулировке задачи на собственные значения (сравним (9) для массивных частиц и (11) для света). Также энергия частицы входит в (18), (19) в первой степени, тогда как частота света стоит в (42), (43) в квадрате. Несколько другой вид приобретает коэффициент a_i, поскольку для частицы $\langle u_{i,q_0}||u_{i,q_0}\rangle = 1$, а для света собственные функции обобщенной задачи на собственные значения (11) нормированы условиями $\langle\psi_{i,q_0}|\varepsilon(x)/\varepsilon_0|\psi_{i,q_0}\rangle = 1$ и $\langle u_{i,q_0}|\varepsilon(x)/\varepsilon_0|u_{i,q_0}\rangle = 1$. И, конечно, будет другой коэффициент перед всеми выражениями в формулах (29), (33), (37) из-за другой связи E и Δq, нежели связи ω с Δq в случае распространения света.

Оценим увеличение амплитуды волновой функции частицы в кристалле при попадании энергии частицы в центр окна прозрачности. Для достаточно точной численной оценки эффекта необходимо рассматривать трехмерную задачу. Однако для первой грубой оценки можно поступить следующим способом. Пренебрежем зависимостью потенциала $U(r)$, в котором движется частица в кристалле, от поперечных компонент (y, z) и рассмотрим для нахождения волновой функции частицы на границе запрещенной зоны Ψ_{i,q_0} двухволновое приближение, т.е. будем считать, что распространяются только две связанные гармонические волны – прямая и отраженная (обратная). Тогда для амплитуд этих волн A_{q_0} и A_{-q_0} имеем систему уравнений:

$$\left[\frac{\hbar^2 q_0^2}{2M} - E\right] A_{q_0} + u(-2q_0) A_{-q_0} = 0,$$
$$u(2q_0) A_{q_0} + \left[\frac{\hbar^2 (-q_0)^2}{2M} - E\right] A_{-q_0} = 0.$$

Отсюда получаем ширину запрещенной зоны:

$$E_{\text{gap}} = 2|u(2q_0)|. \tag{44}$$

Проведем оценку для частицы с энергией E_1 = = 10 кэВ, распространяющейся в кристалле с параметрами, близкими к кристаллу палладия толщиной 1000 мкм (у палладия кубическая решетка с постоянной a = 0.389 нм). Такая энергия соответствует запрещенной зоне с номером m (в одномерном случае):

$$m = \frac{\sqrt{2E_1 M}}{\hbar} \frac{1}{\frac{G_0}{2}} \approx 3843,$$

где $G_0 = 2\pi/a$ – вектор обратной решетки. Как видно, интерес представляют большие значения q_0. Характерный размер изменения волновых функций электронов будет много больше $2\pi/q_0$ – следовательно, вклад электронов в $u(2q_0)$ будет мал. Таким образом, пренебрежем электронами при нахождении $u(2q_0)$. Для простоты будем считать, что в одной ячейке находится одно ядро, и, соответственно, потенциал, в котором движется дейтрон, в случае одной ячейки будет:

$$U_{\text{nuc}}(\mathbf{r}) = \frac{Ze^2}{|\mathbf{r}|}. \tag{45}$$

Его фурье-образ:

$$u_{\text{nuc}}(\mathbf{k}) = \frac{1}{(2\pi)^3}\int U_{\text{nuc}}(\mathbf{r}) \exp[-i\mathbf{kr}]\, dr^3 = = \frac{4\pi}{(2\pi)^3}\frac{Ze^2}{k^2}. \tag{46}$$

Фурье-преобразование определено так, что

$$U(\mathbf{r}) = \int u(\mathbf{k}) \exp[i\mathbf{kr}]\, dk^3.$$

Переходя от одной ячейки к решетке и считая, что ядра экранированы в пределах одной ячейки, для векторов обратной решетки $\mathbf{G}$ можем записать:

$$(2\pi)^3 u_{\text{cell}}(\mathbf{G}) = = \int U_{\text{cell}}(\mathbf{r}) \exp[-i\mathbf{Gr}]\, dr^3 = V_{\text{cell}} u_{\text{lat}}(\mathbf{G}), \tag{47}$$

где V_{cell} – объем ячейки, $u_{\text{cell}}(\mathbf{G})$ и $U_{\text{cell}}(\mathbf{r})$ – потенциал, создаваемый зарядами одной ячейки, а $u_{\text{lat}}(\mathbf{G})$ – потенциал всей решетки. Приравнивание (47) возможно, поскольку ядра экранированы в пределах одной ячейки и интеграл в (47) можно рассматривать как интеграл только по ячейке (для правого равенства), так и по пространству (для левого равенства). При учете этого оба равенства (47) следуют из определения фурье-преобразования. Переход от трехмерного равенства (47) к одномерному (44) осуществим, положив в (47) $k_y = k_z = 0$ (т.е. остальными компонентами пренебрежем). Таким образом, имеем для (44):

$$E_{\text{gap}} = 2\frac{(2\pi)^3}{V_{\text{cell}}}|u_{\text{cell}}(2q_0)|. \tag{48}$$

Как уже говорилось, при больших q_0 можно заменить $u_{\text{cell}}(q_0)$ на $u_{\text{nuc}}(q_0)$, и, соответственно:

$$E_{\text{gap}} = 2\frac{(2\pi)^3}{V_{\text{cell}}}|u_{\text{cell}}(2q_0)| = = 2\frac{(2\pi)^3}{V_{\text{cell}}}|u_{\text{nuc}}(2q_0, q_y = q_z = 0)| = = \frac{8\pi}{V_{\text{cell}}}\frac{Ze^2}{4q_0^2} = \frac{2\pi Ze^2}{V_{\text{cell}} q_0^2}, \tag{49}$$

с учетом (18)

$$|E_{\text{gap},i}| = \frac{E_{\text{gap}}}{\frac{\hbar^2 q_0^2}{(2M)}} = \frac{4\pi Ze^2 M}{V_{\text{cell}} \hbar^2 q_0^4}. \tag{50}$$

В рассматриваемом двухволновом приближении Ψ_{i,q_0} будет равно $A\cos(q_0 x)$ или $A\sin(q_0 x)$. Учитывая, что q_1 близко к q_0, из (28) получаем ($V_{\text{cell}} = a^3$):

$$\frac{|\Psi_{E_1}|_{\max}}{|\Psi|} \approx \frac{Hq_1}{2\pi n}\frac{4\pi Ze^2 M}{a^3 \hbar^2 q_0^4} \approx 2\frac{Ze^2 M}{\hbar^2 a^3 q_1^3}\frac{H}{n}. \tag{51}$$

Для энергии $E_1 = 10$ кэВ эта величина будет приближенно равна $36.4(H/n)$ (H выражена в сантиметрах, n – номер окна прозрачности).

Увеличение выхода реакции, как говорилось в [14], определяется левой частью выражения

$$\frac{\left|\Psi_{E_1}\right|^2_{\max}}{\left|\Psi\right|^2} \approx 4\frac{Z^2e^4M^4}{\hbar^4a^6q_1^6}\frac{H^2}{n^2}, \qquad (52)$$

что в случае попадания энергии частицы в первое окно прозрачности при толщине кристалла 1000 мкм составляет около 13 раз. При уменьшении энергии увеличение реакции выхода растет как $E^{-3}(q_0^{-6})$ и для $E_1 = 1$ кэВ составляет примерно 13000 раз (номер зоны 1215). Для $E_1 = 0.5$ кэВ возрастает еще в восемь раз и составляет около 10^5 (номер зоны 859). Для более тонкого кристалла (100 мкм) увеличение выхода реакции будет в 100 раз меньше: 130 раз для энергии падающей частицы 1 кэВ (также 1215 зона) и для энергии 0.5 кэВ увеличение выхода составит около 1000 раз. Отношение относительного отклонения волнового числа частицы от границы разрешенной зоны к ее волновому числу по сравнению с отношением ширины запрещенной зоны к энергии частицы на краю зоны, которая характеризует условие применимости теории возмущений (21), составляло менее 0.14 для энергии 10 кэВ и кристалла толщиной 1000 мкм. Для частиц с более низкой энергией оно было менее 0.05 в случае тонкого кристалла (100 мкм) и менее 0.005 в случае толстого кристалла (1000 мкм). Таким образом, отмеченный в литературе рост увеличения выхода реакции при уменьшении энергии падающей частицы в приведенных расчетах действительно коррелирует с увеличением амплитуды волновой функции частицы.

Вышеприведенное рассмотрение справедливо для достаточно толстых кристаллов, толщина которых H должна удовлетворять критерию:

$$H \gg 2a\frac{n}{m}\frac{\frac{\hbar^2q_0^2}{2M}}{\left|\Delta E_{fz}\right|}, \qquad (53)$$

где a – период, среды, n – номер окна прозрачности, m – номер зоны, соответствующей энергии частицы, ΔE_{fz} – ширина запрещенной зоны, в числителе последнего сомножителя – энергия рассматриваемого края зоны. Это выражение удобно преобразовать к критерию, накладывающему условия на число периодов кристалла N:

$$N = \frac{H}{a} \gg 2\frac{n}{m}\frac{\frac{\hbar^2q_0^2}{2M}}{\left|\Delta E_{fz}\right|}. \qquad (54)$$

В рассмотренных выше примерах получаются следующие значения в правых частях неравенств (53) и (54): для энергии частицы 10 кэВ – 275 мкм (706000 периодов), 1 кэВ – 8.68 мкм (22300 периодов), 0.5 кэВ – 3 мкм (7886 периодов).

Таким образом, особенности движения массивной частицы с энергией, близкой к запрещенной зоне, очень похожи на особенности распространения света через фотонный кристалл конечной толщины с частотами вблизи края запрещенной зоны. Также формируются окна прозрачности, при движении в которых амплитуда волновой функции частицы резко возрастает, наблюдаются такие же зависимости положения окон прозрачности и их ширин от номера окна и толщины слоя среды. Однако есть и ряд особенностей. Первая – при анализе полученных формул необходимо учитывать кардинально другую формулировку задачи на собственные значения (9), вытекающей из уравнения движения частицы, что приводит к другим функциям невозмущенного движения Ψ_{j,q_0}, которые входят во все формулы. Второе отличие – отсутствие в операторе возмущения члена – квадратичного по отклонению $\Delta q/q_0$ от границы зоны q_0, что приводит к другому виду поправок по параметру малости $\Delta q/q_0$ во втором и высших порядках. И наконец, энергия частицы E иначе входит в выражение собственного значения (10), чем ω в случае распространения света (12). Полагаем, что подобный подход к расчету увеличения амплитуды волновой функции частицы в кристалле возможен с минимальными доработками и в двумерном, и в трехмерном случае.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В работе в одномерном случае рассмотрено прохождение массивной нерелятивистской частицы через кристалл. Аналогично случаю распространения света в одномерной периодической среде построена теория возмущений при малых отклонениях энергии падающей частицы от границы запрещенной зоны. Детально проанализированы общие черты и различия краевых задач для волновой функции частиц, распространяющихся в периодическом одномерном поле, и для светового поля, распространяющегося в одномерной периодической среде. Особенности движения массивной частицы с энергией, близкой к запрещенной зоне, очень похожи на особенности распространения света через фотонный кристалл конечной толщины с частотами вблизи края запрещенной зоны. Получены формулы для волновой функции частицы в кристалле, амплитуды отражения и пропускания. Как и в случае распространения света в одномерном фотонном кристалле, наблюдается сильное увеличение амплитуды волновой функции в отдельных областях энергетического спектра – окнах прозрачности. Частица с энергией, соответствующей максимуму окна прозрачности, проходит сквозь среду с вероятностью, равной единице, и для нее отсутствует отражение.

В случае массивной частицы, как и в случае света, увеличение амплитуды волновой функции в окне прозрачности пропорционально толщине кристалла и обратно пропорционально номеру окна, отсчитанному от запрещенной зоны, причем такая зависимость наблюдается при любой зависимости одномерного периодического потенциала от глубины. Отклонение энергии окон прозрачности от края запрещенной зоны пропорционально номеру окна в квадрате и обратно пропорционально толщине кристалла в квадрате. Ширина окна прозрачности пропорциональна номеру окна в квадрате и обратно пропорциональна толщине кристалла в кубе.

На основании приведенных в настоящей работе расчетов установлено, что отмеченный в литературе значительный рост увеличения выхода реакции при уменьшении энергии падающей частицы действительно коррелирует с увеличением амплитуды волновой функции.

Таким образом, увеличение амплитуды волновой функции частицы в кристалле в отдельных областях энергетического спектра может быть весьма значительным, что, как указано в [14], необходимо учитывать при рассмотрении ядерных реакций в кристаллах.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Багуля А.В., Далькаров О.Д., Негодаев М.А. и др.* // Краткие сообщения по физике ФИАН. 2012. Т. 39. № 9. С. 3.
2. *Багуля А.В., Далькаров О.Д., Негодаев М.А. и др.* // Краткие сообщения по физике ФИАН. 2012. Т. 39. № 12. С. 3.
3. *Raiola F., Migliardi P., Gyurky G. et al.* // Eur. Phys. J. A. 2002. V. 13. P. 377.
4. *Raiola F., Migliardi P., Gang L. et al.* // Phys. Lett. B. 2002. V. 547. P. 193.
5. *Липсон А.Г., Русецкий А.С., Карабут А.Б., Майли Дж.* // ЖЭТФ. 2005. Т. 127. № 6. С. 1334.
6. *Bosch H.S., Halle G.M.* // Nucl. Fusion. 1994. V. 32. P. 611.
7. *Czerski K., Huke A., Biller A., Heide P., Hoeft M., Ruprecht G.* // Europhys. Lett. 2001. V. 54. P. 449.
8. *Yuki H., Kasagi J., Lipson A.G., Ohtsuki T., Baba T., Noda T., Lyakhov B.F., Asami N.* // JETP Lett. 1998. V. 68. P. 823.
9. *Dalkarov O.D., Negodaev M.A., Rusetskii A.S., Tsechosh V.I., Lyakhov B.F., Saunin E.I., Bolotokov A.A., Kudryashov I A.* // J. Surf. Invest.: X-ray, Synchrotron Neutron Tech. 2019. V. 13. № 2. P. 272. https://doi.org/10.1134/S1027451019020241
10. *Steinetz B.M., Benyo T.L., Chait A. et al.* // Phys. Rev. C. 2020. V. 101. P. 044610.
11. *Далькаров О.Д., Негодаев М.А., Русецкий А.С. и др.* // Поверхность. Рентген., синхротр. и нейтрон. исслед. 2020. № 3. С. 9. https://doi.org/10.31857/S1028096020030073
12. *Багуля А.В., Далькаров О.Д., Негодаев М.А.и др.* // Поверхность. Рентген., синхротр. и нейтрон. исслед. 2017. № 1. С. 36. https://doi.org/10.7868/S020735281701005X
13. *Крайский А.А., Крайский А.В.* О возможном механизме повышения выхода низкоэнергетических ядерных реакций в кристаллических структурах // VI Международная конференция по фотонике и информационной оптике: Сб. научных трудов. М.: НИЯУ МИФИ, 2017. С. 55.
14. *Крайский А.А., Крайский А.В.* // Поверхность. Рентген., синхротр. и нейтрон. исслед. 2020. № 2. С. 20. https://doi.org/10.31857/S1028096020020107
15. *Крайский А.А., Крайский А.В.* // Краткие сообщения по физике ФИАН. 2018. № 2. С. 37.
16. *Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М.* Квантовая механика. М.: Наука, 1974. 752 с.

On a Strong Increase in the Amplitude of the Wave Function of a Massive Non-Relativistic Particle Falling on a Crystal (One-Dimensional Approximation)

A. A. Kraiski[1], A. V. Kraiski[2, *]

[1]Prokhorov General Physics Institute RAS, Moscow, 119333 Russia

[2]Lebedev Physical Institute RAS, Moscow, 119333 Russia

**e-mail: kraiski@sci.lebedev.ru*

An increase in the amplitude of the wave function of a massive nonrelativistic particle incident on a one-dimensional crystal is investigated. Similarly to the case of light propagation in a one-dimensional periodic medium, a perturbation theory is constructed for small deviations of the energy of the incident particle from the boundary of the forbidden zone. Formulae are derived for the wave function of a particle in a crystal, reflection and transmission coefficients. The general similarities and differences between the initial equations, the obtained characteristics for a massive particle and the properties of the light field are analyzed in detail. The obtained characteristics for a massive particle and the properties of the light field are compared. It is found that the main properties of the wave function have the same features as the properties of the light field. Numerical estimates are given for the increase in the amplitude of the wave function of a particle inside a one-dimensional periodic medium with a period equal to the lattice constant of palladium. It is shown that with a decrease in the energy of the incident particle, the amplitude of the wave function increases significantly, which correlates with the experimentally observed increase in the yield of D–D reactions for low-energy particles compared to the values obtained by extrapolating data from the high-energy region.

Keywords: nuclear reactions, crystals, increase yield, deuterons, one-dimensional periodic potential, band gap, transparency windows.