

УДК 537.8

ВЛИЯНИЕ КВАНТОВОГО ТУННЕЛИРОВАНИЯ НА СПЕКТР ЭНЕРГИИ ПОПЕРЕЧНОГО ДВИЖЕНИЯ КАНАЛИРОВАННЫХ ПОЗИТРОНОВ В КРИСТАЛЛЕ КРЕМНИЯ

© 2023 г. В. В. Сыщенко^{а, *}, А. И. Тарновский^а, В. И. Дроник^а, А. Ю. Исупов^б

^аБелгородский государственный национальный исследовательский университет,
Белгород, 308015 Россия

^бЛаборатория физики высоких энергий ОИЯИ,
Дубна, 141980 Россия

*e-mail: syshch@yandex.ru

Поступила в редакцию 22.09.2022 г.

После доработки 24.11.2022 г.

Принята к публикации 24.11.2022 г.

Движение заряженных частиц в кристалле может быть как регулярным, так и хаотическим. На квантовом уровне хаотичность проявляется в статистических свойствах массива уровней энергии. Особый интерес представляют системы, в которых области регулярного движения разделены в фазовом пространстве областью динамического хаоса. На статистику уровней энергии таких систем существенно влияет возможность туннелирования между динамически изолированными друг от друга областями фазового пространства. Учет этого эффекта приводит к функции распределения Подольского–Нариманова. В настоящей статье выполнена оценка матричных элементов таких туннельных переходов в задаче о поперечном движении позитронов с энергиями 20 и 40 ГэВ в режиме аксиального каналирования в направлении [100] кристалла кремния. На основе этой оценки найден параметр распределения Подольского–Нариманова и показано, что последнее действительно описывает статистику расстояний между соседними уровнями энергии поперечного движения.

Ключевые слова: регулярная динамика, хаотическая динамика, квантовый хаос, каналирование, квазиклассическое приближение, статистика межуровневых расстояний, распределение Берри–Робника, динамическое туннелирование, туннелирование сопровождаемое хаосом, распределение Подольского–Нариманова.

DOI: 10.31857/S1028096023060158, EDN: DKNZVA

ВВЕДЕНИЕ

Статистические свойства массива уровней энергии квантовой системы, хаотической в классическом пределе, резко отличаются от таких же для интегрируемой системы, обладающей регулярной динамикой [1–4]. Эти различия обусловлены тем обстоятельством, что уровни энергии интегрируемой системы не взаимодействуют друг с другом, в то время как между уровнями энергии неинтегрируемой (хаотической в классическом пределе) системы имеет место взаимодействие уровней, приводящее к их взаимному отталкиванию. Как следствие, расстояния s между соседними уровнями энергии системы в последнем случае описываются функцией распределения Вигнера:

$$P_W(s) = (\pi s/2) \exp(-\pi s^2/4), \quad (1)$$

где среднее межуровневое расстояние в массиве предполагается нормированным на единицу, в то

время как в случае интегрируемой системы функция распределения будет иметь экспоненциальный вид, характерный для пуассоновского потока событий:

$$P_P(s) = \exp(-s). \quad (2)$$

Проявления динамического хаоса в каналировании электронов [5, 6] исследовали в работах [7–11] для случая движения вблизи направления [110] кристалла кремния. В этом случае пары соседних атомных цепочек создают двухъямный потенциал, выше седловой точки которого движение электронов оказывается почти полностью хаотическим. Было установлено, что статистические свойства уровней в этой области хорошо описываются распределением Вигнера (1).

Более сложным является тот случай, когда классическая динамика частицы оказывается при заданной энергии регулярной для одних начальных условий и хаотической для других, при этом области регулярного движения разделены в фазо-

вом пространстве областью динамического хаоса (такая ситуация реализуется, например, при движении электрона вблизи направления [100] кристалла кремния [12, 13]). В работе [14] предполагалось, что регулярные и хаотические области порождают две независимые друг от друга последовательности уровней (с относительными плотностями уровней ρ_1 и ρ_2 , $\rho_1 + \rho_2 = 1$), что приводит к распределению Берри–Робника:

$$P_{BR}(s) = \exp(-\rho_1 s) \times \left\{ \rho_1^2 \operatorname{erfc}\left(\frac{\sqrt{\pi}}{2} \rho_2 s\right) + \left(2\rho_1 \rho_2 + \frac{\pi}{2} \rho_2^3 s\right) \exp\left(-\frac{\pi}{4} \rho_2^2 s^2\right) \right\}, \quad (3)$$

где

$$\operatorname{erfc}(x) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_x^{\infty} \exp(-t^2) dt = 1 - \operatorname{erf}(x). \quad (4)$$

Однако туннелирование между динамически изолированными друг от друга областями фазового пространства будет приводить к взаимодействию уровней энергии, порождаемых локализованными в таких областях состояниями. При этом туннелирование между двумя регулярными областями может происходить двояким образом, см., например, в [15, 16]. Прямое туннелирование представляет собой маловероятный процесс первого порядка, описываемый безразмерной (как и s) амплитудой с характерным значением $V_{RR} \ll 1$. Наряду с этим возможен процесс второго порядка, называемый туннелированием, сопровождаемым хаосом (chaos-assisted tunneling, CAT), когда частица туннелирует сначала лишь за пределы “своей” регулярной области, и этот процесс описывается константой V_{RC} . Подхваченная хаотическим потоком частица может оказаться вблизи границы другой регулярной области, где она с амплитудой V_{RC} туннелирует внутрь. Таким образом, это будет процесс второго порядка, результирующая амплитуда которого составит $V_{RC}^2 \sim V_{RR} \ll 1$ [17].

Теория, учитывающая влияния туннельных переходов на статистику уровней, была предложена в [17], она приводит к распределению Подольского–Нариманова:

$$P_{PN}(s) = \exp(-\rho_1 s) \left\{ \rho_1^2 \operatorname{erfc}\left(\frac{\sqrt{\pi}}{2} \rho_2 s\right) F\left(\frac{s}{V_{RC}}\right) + \left(2\rho_1 \rho_2 F\left(\frac{s}{V_{RC}}\right) + \pi s \rho_2^3 / 2\right) \exp\left(-\frac{\pi}{4} \rho_2^2 s^2\right) \right\}, \quad (5)$$

где

$$F(x) = 1 - (1 - \sqrt{\pi/2x}) / (\exp(x) - x). \quad (6)$$

Методика оценки матричных элементов таких переходов (из значений которых извлекается параметр V_{RC}) была описана в [18]. В настоящей работе исследована статистика межуровневых рас-

стояний энергии поперечного движения позитронов высокой энергии (20 и 40 ГэВ) для случая каналирования в направлении [100] кристалла кремния. Установлено, что распределение Подольского–Нариманова (5) хорошо описывает распределение межуровневых расстояний, причем параметр в этом распределении соответствует найденному нами среднему значению матричных элементов туннельных переходов.

МЕТОДИКА

Движение релятивистской частицы в кристалле под малым углом к плотно упакованной атомами кристаллографической оси может быть описано как двумерное движение в поперечной (по отношению к этой оси) плоскости под воздействием непрерывных потенциалов, усредненных вдоль атомных цепочек, перпендикулярных этой плоскости, с сохранением продольной компоненты импульса частицы p_{\parallel} . В плоскости (100) кристалла кремния такие цепочки образуют квадратную решетку с периодом $a \approx 1.92 \text{ \AA}$. Для позитрона непрерывный потенциал цепочки является отталкивающим, и вблизи центра квадрата, в вершинах которого находятся четыре ближайших друг к другу цепочки, возникает небольшая потенциальная ямка (рис. 1), в которой возможно финитное движение позитрона в поперечной плоскости, называемое аксиальным каналированием [5, 6]. Потенциальная энергия позитрона с учетом вкладов этих четырех цепочек будет описываться следующей суммой:

$$U(x, y) = U_1(x - a/2, y - a/2) + U_1(x - a/2, y + a/2) + U_1(x + a/2, y - a/2) + U_1(x + a/2, y + a/2) - 7.96 \text{ эВ}, \quad (7)$$

где константа добавлена для того, чтобы сделать потенциал равным нулю в центре ячейки. Непрерывный потенциал отдельной атомной цепочки при этом аппроксимирован формулой [5]:

$$U_1(x, y) = U_0 \ln\left(1 + \frac{\beta R^2}{x^2 + y^2 + \alpha R^2}\right), \quad (8)$$

где для цепочки [100] кристалла кремния $U_0 = 66.6 \text{ эВ}$, $\alpha = 0.48$, $\beta = 1.5$, $R = 0.194 \text{ \AA}$ (радиус Томаса–Ферми). Квантовое описание аксиального каналирования дается двумерным уравнением Шредингера, в котором величина E_{\parallel}/c^2 играет роль массы частицы, а $E_{\parallel} = (m^2 c^4 + p_{\parallel}^2 c^2)^{1/2}$ – энергия продольного движения [5].

В настоящей работе рассмотрено каналирование позитронов с энергиями $E_{\parallel} = 20$ и 40 ГэВ. Собственные значения (уровни энергии канали-

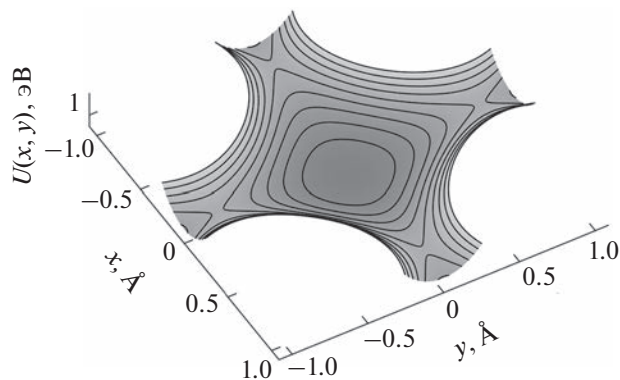


Рис. 1. Потенциальная энергия (7) позитрона, движущегося вблизи направления [100] кристалла кремния.

рованных позитронов) и собственные функции гамильтониана были найдены численно с помощью так называемого спектрального метода [19], детали которого применительно к задаче каналирования описаны в работах [7–10].

Методика оценки относительного вклада областей регулярной динамики ρ_1 в среднюю квазиклассическую плотность уровней энергии описана в [12, 13]. Для анализа был выбран участок

$$1.2 \leq E_{\perp} \leq 1.43 \text{ эВ}, \quad (9)$$

на котором величина ρ_1 приблизительно постоянна (рис. 2), что требуется для применимости распределений (3) и (5). Для позитронов с $E_{\parallel} = 20$ ГэВ эта величина составляет приблизительно 0.313, а с энергией 40 ГэВ – приблизительно 0.285, среднее взвешенное значение на этом участке составляет

$$\rho_1 = 0.294_{-0.013}^{+0.021}. \quad (10)$$

Неопределенность оценки обусловлена сложностью учета вклада малых областей регулярной динамики в фазовом пространстве каналированной частицы.

Поскольку потенциал (7) обладает симметрией квадрата, все доступные состояния поперечного движения можно классифицировать по неприводимым представлениям группы D_4 (или изоморфной ей C_{4v} , см., например, [20]) в зависимости от типа симметрии волновой функции. Эта группа имеет четыре одномерных неприводимых представления, обозначаемых A_1, A_2, B_1, B_2 , соответствующих невырожденным уровням энергии, и одно двумерное, обозначаемое E , соответствующее двукратно вырожденным уровням. В дальнейшем мы будем исследовать только невырожденные уровни. Подчеркнем, что межуровневые расстояния следует выделять для состояний каждого из четырех типов симметрии независимо [3], нормировать их на единичное среднее межуров-

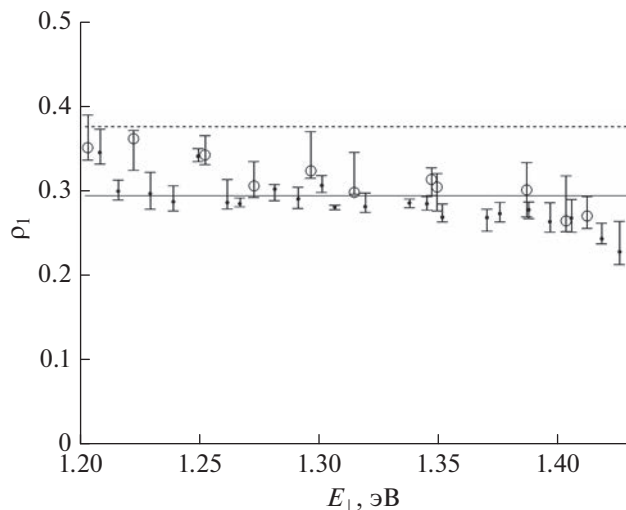


Рис. 2. Относительный вклад областей регулярной динамики в квазиклассическую плотность уровней на интервале (9) для позитронов с энергией $E_{\parallel} = 20$ ГэВ (кружки) и 40 ГэВ (точки). Сплошной горизонтальной линией отмечено среднее взвешенное значение этой величины (10), а штриховой – значение (13), удовлетворяющее критерию максимального правдоподобия.

невое расстояние, и лишь затем объединять данные для статистического анализа.

Подчеркнем также, что теория квантового хаоса описывает флуктуации распределения уровней относительно плавно изменяющейся с изменением E_{\perp} средней плотности состояний [2]. С целью выделения этих флуктуаций исходная последовательность уровней энергии подвергается процедуре разворачивания (unfolding) [2, 4], в результате которой получается новая последовательность уровней, автоматически обладающая единичным средним межуровневым расстоянием. Именно для таких последовательностей и сформулированы распределения (1)–(3) и (5). Однако, в пределах малого интервала (9) средняя плотность состояний практически неизменна, что позволяет обойтись без процедуры разворачивания. Вместо этого мы лишь нормируем каждую из исходных последовательностей уровней на среднее значение межуровневого расстояния D в ней (табл. 1).

Методика оценки амплитуд туннельных переходов V_{ij} описана в [18]. Найденные амплитуды также нужно нормировать на среднее межуровневое расстояние. Однако, поскольку туннельные переходы, как было показано в [18], осуществляются между суперпозициями состояний с определенным типом симметрии (A_1, A_2, B_1, B_2), для нормировки следует использовать среднее взвешенное от всех четырех D_k для данного значения E_{\parallel} .

Таблица 1. Число состояний, относящихся к различным типам симметрии, и среднее расстояние между уровнями энергии на интервале (9)

Тип симметрии	N_k	D_k , эВ
$E_{ } = 20$ ГэВ		
A_1	24	0.009312
A_2	23	0.010102
B_1	22	0.010483
B_2	24	0.0099168
$E_{ } = 40$ ГэВ		
A_1	47	0.0048609
A_2	46	0.0050508
B_1	44	0.0052105
B_2	48	0.0048027

Эта величина составляет $D = 0.0099$ для $E_{||} = 20$ ГэВ и $D = 0.0050$ для $E_{||} = 40$ ГэВ. В соответствии со сказанным выше, параметр V_{RC} в распределении Подольского–Нариманова (5) следует положить равным квадратному корню из среднего от абсолютного значения найденных амплитуд, нормированных на единичное межуровневое расстояние:

$$V_{RC} = \sqrt{\langle |V_{ij}|/D \rangle}. \quad (11)$$

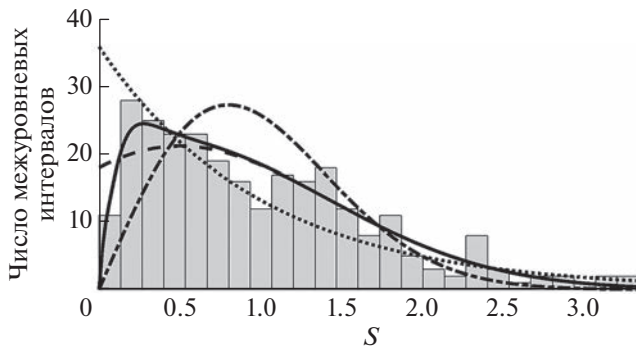


Рис. 3. Распределение межуровневых расстояний на участке (9) для позитронов с энергиями $E_{||} = 20$ и 40 ГэВ (гистограмма) и теоретические кривые, соответствующие распределениям Вигнера (1) (штрихпунктирная линия; $\chi^2 = 242.1434$, $p = 0$), Пуассона (2) (пунктирная линия; $\chi^2 = 47.4105$, $p = 0.00298$), Берри–Робника (3) (штриховая линия; $\chi^2 = 30.171$, $p = 0.17915$) и Подольского–Нариманова (5) (сплошная линия; $\chi^2 = 24.0133$, $p = 0.46083$).

Для совокупности массивов уровней энергии поперечного движения в интервале (9) эта величина составила

$$V_{RC} = 0.1548. \quad (12)$$

РЕЗУЛЬТАТЫ И ИХ ОБСУЖДЕНИЕ

Распределение межуровневых расстояний на интервале энергий поперечного движения (9) для позитронов с энергиями $E_{||} = 20$ ГэВ и 40 ГэВ, нормированных на единичное среднее описанное выше образом, представлено в виде гистограммы на рис. 3. На гистограмму наложены кривые, соответствующие предсказаниям (1)–(3) и (5), причем в распределении Берри–Робника (3) подставлено значение относительного вклада областей регулярной динамики в локальную среднюю квазиклассическую плотность уровней (10). В распределении Подольского–Нариманова (5), помимо этого значения параметра ρ_1 подставлено значение (12) параметра V_{RC} . Там же для этих четырех распределений указаны значения величины χ^2 и соответствующие им p -значения для 24 степеней свободы. Мы видим, что распределение межуровневых расстояний демонстрирует хорошее согласие с предсказанием теории Подольского–Нариманова [17].

Интересно также построить распределения (3) и (5) со свободными параметрами, подобранными по критерию максимального правдоподобия. Соответствующие графики изображены на рис. 4 тонкими линиями. Для распределения Берри–Робника результат фита оказывается равным:

$$(\rho_1)_{BR}^{fit} = 0.376. \quad (13)$$

Величина χ^2 и соответствующее p -значения для 23 степеней свободы (что учитывает наличие одного параметра фитирования) составляют в этом случае

$$\chi^2 = 26.1299, \quad p = 0.2948.$$

Для распределения Подольского–Нариманова результаты фита равны:

$$(\rho_1)_{PN}^{fit} = 0.389, \quad (V_{RC})_{PN}^{fit} = 0.188. \quad (14)$$

Величина χ^2 и соответствующее p -значения для 22 степеней свободы (что учитывает наличие двух параметров фитирования) составляют в этом случае

$$\chi^2 = 19.2549, \quad p = 0.6295.$$

Близость кривых, соответствующих фактическим значениям параметров системы, и кривых, найденных по критерию максимального правдоподобия, также свидетельствует о хорошем согласии

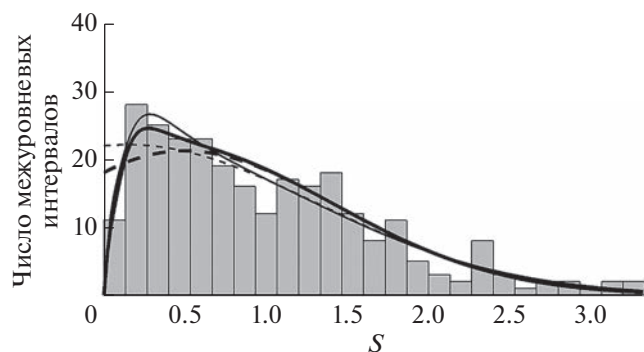


Рис. 4. Распределения Берри–Робника и Подольско–Нариманова с параметрами (10) и (12), как на предыдущем рисунке (жирные линии), и с параметрами (13) и (14), соответственно, найденными по критерию максимального правдоподобия (тонкие линии).

распределения межуровневых расстояний в рассмотренной системе с предсказаниями теории квантового хаоса.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В работе рассмотрено каналирование позитронов с энергиями 20 и 40 ГэВ вблизи направления [100] кристалла кремния. Численными методами найдены все уровни энергии поперечного движения позитронов и соответствующие им волновые функции на участке (9) вблизи верхнего края потенциальной ямы. С помощью разработанных ранее методов [12, 13, 18] найдены относительный вклад областей регулярного движения в квазиклассическую среднюю плотность уровней энергии, а также вероятность туннельных переходов между такими областями. Согласно предсказанию [17], наличие таких переходов приводит к взаимному отталкиванию соседних уровней энергии, что модифицирует распределение межуровневых расстояний.

Статистический анализ массива межуровневых расстояний, выполненный в настоящей работе, показывает, что распределение Подольско–Нариманова [17] значительно лучше описывает характерные особенности данного массива по сравнению с распределением Берри–Робника [14], не учитывающим эффект туннелирования, сопровождаемого хаосом (chaos-assisted tunneling). О хорошем согласии фактического распределения с предсказаниями теории [17] свидетельствует также близость значений параметров распределения, извлекаемых из анализа динамики рассматриваемой системы, и значений, подбираемых по критерию максимального правдоподобия.

Конфликт интересов: Авторы заявляют, что у них нет конфликта интересов.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Berry M.V.* // Proceedings of the Royal Society A. 1987. V. 413. P. 183. <https://doi.org/10.1098/rspa.1987.0109>
2. *Bohigas O., Giannoni M.-J.* Chaotic Motion and Random Matrix Theories // Lecture Notes in Physics. 1984. V. 209. P. 1–99. https://doi.org/10.1007/3-540-13392-5_1
3. *Штокман Х.-Ю.* Квантовый хаос. М.: ФИЗМАТЛИТ, 2004. 376 с.
4. *Райхл Л.Е.* Переход к хаосу в консервативных классических и квантовых системах. М.—Ижевск: РХД, 2008. 756 с.
5. *Ахиезер А.И., Шульга Н.Ф.* Электродинамика высоких энергий в веществе. М.: Наука, 1993. 344 с.
6. *Ахиезер А.И., Шульга Н.Ф., Трутень В.И., Гриненко А.А., Сыщенко В.В.* // УФН. 1995. Т. 165. № 10. С. 1165. <https://doi.org/10.3367/UFN.0165.199510c.1165>
7. *Шульга, Н.Ф., Сыщенко В.В., Нерябова В.С.* // Поверхность. Рентген., синхротр. и нейтрон. исслед. 2013. № 3. С. 91. <https://doi.org/10.1134/S1027451013020183>
8. *Шульга Н.Ф., Сыщенко В.В., Тарновский А.И., Исупов А.Ю.* // Поверхность. Рентген., синхротр. и нейтрон. исслед. 2015. № 7. С. 72. <https://doi.org/10.7868/S0207352815070197>
9. *Shul'ga N.F., Syshchenko V.V., Tarnovsky A.I., Isupov A.Yu.* // Nucl. Instrum. Methods B. 2016. V. 370. P. 1. <https://doi.org/10.1016/j.nimb.2015.12.040>
10. *Shul'ga N.F., Syshchenko V.V., Tarnovsky A.I., Isupov A.Yu.* // J. Physics: Conference Series. 2016. V. 732. P. 012028. <https://doi.org/10.1088/1742-6596/732/1/012028>
11. *Сыщенко В.В., Тарновский А.И.* // Поверхность. Рентген., синхротр. и нейтрон. исслед. 2021. № 7. С. 84. <https://doi.org/10.31857/S1028096021070207>
12. *Сыщенко В.В., Тарновский А.И., Исупов А.Ю., Соловьев И.И.* // Поверхность. Рентген., синхротр. и нейтрон. исслед. 2020. № 3. С. 103. <https://doi.org/10.31857/S1028096020030188>
13. *Shul'ga N.F., Syshchenko V.V., Tarnovsky A.I., Dronik V.I., Isupov A.Yu.* // J. Instrumentation. 2019. V. 14. P. C12022. <https://doi.org/10.1088/1748-0221/14/12/C12022>
14. *Berry M.V., Robnik M.* // J. Phys. A.: Math. Gen. 1984. 17. P. 2413. <https://doi.org/10.1088/0305-4470/17/12/013>
15. *Tureci H., Schwefel H., Stone A.D., Narimanov E.E.* // Optics express. 2002. V. 10. Issue 16. P. 752. <https://doi.org/10.1364/OE.10.000752>
16. *Bolotin Y., Tur A., Yanovsky V.* Chaos: Concepts, Control and Constructive Use. Springer International Publishing Switzerland, 2017. 281 p. <https://doi.org/10.1007/978-3-319-42496-5>
17. *Podolskiy V.A., Narimanov E.E.* // Phys. Lett. A. 2007. V. 362. P. 412. <https://doi.org/10.1016/j.physleta.2006.10.065>
18. *Сыщенко В.В., Тарновский А.И., Дроник В.И., Исупов А.Ю.* // Поверхность. Рентген., синхротр. и нейтрон. исслед. 2022. № 3. С. 79. <https://doi.org/10.31857/S1028096022030207>

19. Feit M.D., Fleck J.A., Jr., Steiger A. // J. Computational Physics. 1982. V. 47. P. 412. [https://doi.org/10.1016/0021-9991\(82\)90091-2](https://doi.org/10.1016/0021-9991(82)90091-2)
20. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Теоретическая физика. В 10 томах. Том 3. Квантовая механика. Нерелятивистская теория. М.: ФИЗМАТЛИТ, 2016. 800 с.

Quantum Tunneling Effect on the Transverse Motion Energy Spectrum for the Channeling Positrons in the Silicon Crystal

V. V. Syshchenko^{1, *}, A. I. Tarnovsky², V. I. Dronik¹, A. Yu. Isupov²

¹*Belgorod State University, Belgorod, 308015 Russia*

²*Laboratory of High Energy Physics, Joint Institute for Nuclear Research, Dubna, 141980 Russia*

**e-mail: syshch@yandex.ru*

The charged particles motion in the crystal could be either regular or chaotic. In the quantum picture the chaos manifests itself in the statistical properties of the energy levels set. The systems with regular motion domains in the phase space separated by the chaotic one are of a particular interest. The possibility to tunnel between dynamically isolated domains of the phase space influences essentially on the energy levels statistics. This effect account leads to Podolskiy–Narimanov distribution function. The tunneling matrix elements for the transversal motion of 20 and 40 GeV positrons axially channeled in [100] direction of Si crystal are estimated in the present paper. The parameter of the Podolskiy–Narimanov distribution is derived from this estimation. It is demonstrated that this distribution successfully describes the level spacing statistics for the energy levels set of the positron transversal motion.

Keywords: regular dynamics, chaotic dynamics, quantum chaos, channeling, semiclassical approximation, level spacing statistics, Berry–Robnik distribution, dynamical tunneling, chaos-assisted tunneling, Podolskiy–Narimanov distribution.