第 56 卷 第 6 期 2007 年 6 月
1000-3290/2007/56(06)/3407-04

物 理 学 报
ACTA PHYSICA SINICA

Vol.56, No.6, June, 2007

正弦平方势与带电粒子沟道效应的能带结构

邵明珠 罗诗裕†

(东莞理工学院,东莞 523106)

(2006 年 8 月 21 日收到;2006 年 9 月 5 日收到修改稿)

在量子力学的框架内描述了带电粒子与晶体相互作用,利用正弦平方势把沟道粒子的 Schrödinger 方程化为 Mathieu 方程,根据 Bloch 定理讨论了系统能量分布,并用摄动法求解了方程的低阶不稳定区及其禁带宽度,系统自动呈现出了能带结构,再现了粒子束同晶体相互作用的周期性特征.而这一点正是其他相互作用势不曾有的.

关键词:沟道效应,能带结构,正弦平方势,摄动法

PACC:6180M

1. 引 言

人们在研究带电粒子的沟道效应和沟道辐射时,常常假设带电粒子同晶体之间的相互作用势是平面连续势,而且还假设粒子运动无阻尼.于是,在经典力学框架内,粒子运动方程可化为无量纲的二阶非线性微分方程

$$\frac{\mathrm{d}^2 X}{\mathrm{d}s^2} + \frac{\varepsilon^2}{2}\frac{\partial W(X)}{\partial X} = 0, \tag{1}$$

其中

$$X = \frac{2x}{d_\mathrm{p}},\ s = \frac{2v}{d_\mathrm{p}}t,\ \varepsilon^2 = K/E,$$

$$E = m_0 c^2,\ m = m_0\gamma,\ K = \pi Z_1 Z_2 e^2 N d_\mathrm{p}^2, \tag{2}$$

x 是粒子偏离沟道中心平面的距离,d_p 是相邻晶面之间的距离,Z_1,Z_2 分别是带电粒子和晶体原子的电荷数,e 是电子电荷,Nd_p^2 是晶体的原子面密度,v 是粒子纵向速度,c 是光速,γ 是相对论因子,m_0 是粒子静止质量,$W(X)$是无量纲的粒子-晶体相互作用势.常用的粒子-晶体相互作用势有 Lindhard 势和 Moliere 势[1,2].利用这两种势可以较好的描述沟道效应和沟道辐射,但不能再现沟道辐射的精细结构,也不能反映粒子-晶体相互作用的周期性特征.为此,引入正弦平方势.无量纲的正弦平方势可表示为[3]

$$W(X) = \beta\sin^2\alpha X, \tag{3}$$

其中 α,β 是势参数,且 $\alpha = \pi/2$.将(3)式代入方程(1),粒子运动方程化为标准的摆方程.当引入运动阻尼和外场的周期调制时,粒子运动方程是一个典型的动力学方程.对这个系统的全局分叉和混沌行为作过比较仔细的分析[4—6].现在,试图在量子力学框架内,利用正弦平方势,把沟道粒子的 Schrödinger 方程化为 Mathieu 方程,根据 Bloch 定理讨论了系统能量分布,并用摄动法求解了方程的低阶不稳定区和禁带宽度.结果表明,对于一阶和二阶不稳定区,禁带宽度分别为 $\Delta E_1 = \dfrac{K\beta}{2}$ 和 $\Delta E_2 = \dfrac{md_\mathrm{p}^2(K\beta)^2}{16\pi^2\hbar^2}$,系统自动呈现出了能带结构,再现了粒子束同晶体相互作用的周期性特征.而这一点正是其他相互作用势(比如 Lindhard 势和 Moliere 势)不曾有的.再考虑到,由于不稳定区的宽度 ΔE_n 与入射粒子参数、晶体参数或粒子-晶体相互作用势参数有关,只需适当选择这些参数,就可以将不稳定性对沟道粒子运动的影响减至最小,从而使沟道效应和沟道辐射得到有效地增强,为沟道效应和沟道辐射的应用提供了更多的可能性.

2. Schrödinger 方程

在经典力学的框架内,利用正弦平方势描述了粒子的沟道效应和沟道辐射.现在从 Schrodinger 方程出发,对带电粒子的沟道现象作一量子力学描述.

† 通讯联系人.E-mail:bgluoshy@dgut.edu.cn

假设 $V(x)$ 是粒子-晶体相互作用势，则粒子的定态 Schrodinger 方程可表示为

$$\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi}{dx^2} + (E - V(x))\psi = 0, \tag{4}$$

其中

$$V(x) = KW(x), \quad x = d_p X/2, \tag{5}$$

鉴于 Lindhard 势和 Moliere 势都比较复杂，无论是牛顿方程还是 Schrödinger 方程都只能数值求解. 为此，引入正弦平方势，使得带电粒子沟道问题的处理变得简单、解析. 在量子力学框架下描述粒子运动时，利用正弦平方势可把 Schrödinger 方程化为 Mathieu 方程.

将(3)式代入(5)式，可将正弦平势表示为[7—9]

$$V(x) = K\beta\sin^2(\pi x/d_p), \tag{6}$$

其中 K 由(2)式给出.

将(6)式代入(4)式，可得

$$\frac{d^2\psi}{d\xi^2} + (\delta + 2\varepsilon\cos 2\xi)\psi = 0, \tag{7}$$

其中

$$\xi = \pi x/d_p \tag{8a}$$

$$\delta = \frac{2md_p^2}{\pi^2\hbar^2}(E - K\beta/2), \tag{8b}$$

$$\varepsilon = \frac{mK\beta d_p^2}{2\pi^2\hbar^2}. \tag{8c}$$

方程(7)是一个标准的 Mathieu 方程[5]. 一次项的系数是 ξ 的周期函数. 根据 Floquet 定理，方程(7)的解 $\psi(\xi)$ 可以表示为

$$\psi(\xi) = e^{ik\xi}\phi_k(\xi), \tag{9}$$

上式表明，$\psi(\xi)$ 和 $\phi_k(\xi)$ 只差一个模为 1 的相因子. Bloch 进一步证明上式中的 $\phi_k(\xi)$ 也是周期函数，其周期与外场的周期相同. 设外场周期为 T，根据 Bloch 有

$$\phi_k(\xi + T) = \phi_k(\xi). \tag{10}$$

具有这种性质的波函数称为 Bloch 波函数. 这就是所谓 Bloch 定理. 根据 Bloch 定理，粒子在周期场中运动时，它的能量将分裂成带.

事实上，系统的稳定性与参数 δ，ε 的分布有关，在参数(δ，ε)平面上，出现了一系列稳定和不稳定区. 对方程(7)进行了数值计算，结果如图 1 所示. 从图 1 可以看出，当 $|\varepsilon|\to 0$ 时，如果 $\delta > 0$，系统是稳定的. 但是对于 $\delta < 0$，系统则是不稳定的. 不过，随着 $|\varepsilon|$ 的绝对值增加，即使 $\delta < 0$，系统也可能是稳定的. 由于方程(7)包含振动部分 $\cos 2\xi$，在 $\delta > 0$ 的右半平面内出现了一系列稳定和不稳定区. 当

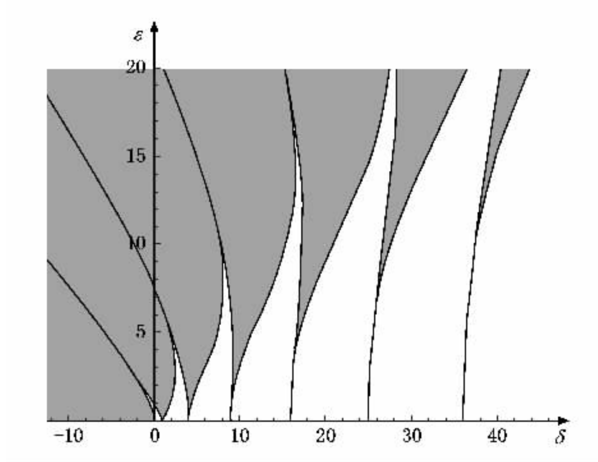

图 1 Mathieu 方程的稳定区(非阴影区域)与不稳定区(阴影区域)

$|\varepsilon|\to 0$ 时，这些不稳定区退化为一点，且全都落在 $\varepsilon = 0$ 的横轴上，这些点由方程

$$\delta = k^2, \quad k = 1,2,3,\cdots$$

给出，其中 $k = 1,2,3,\cdots$ 并分别称为一阶、二阶、三阶等不稳定区. 一般说来，在参数(δ，ε)平面上，这种稳定和不稳定区有无限多个. 实际上，对于具体情况只有一个或少数几个稳定和不稳定区起作用[10].

3. Mathieu 方程的低阶不稳定区及其禁带宽度

考虑到数值计算的复杂性和工程的合理性，下面用摄动法对方程(7)近似求解[11—13]. 为此，注意到方程(7)中的 ε 是小参数，不妨将 $\psi(\xi)$ 和 δ 按 ε 展开如下：

$$\psi(\xi,\varepsilon) = \psi_0(\xi) + \varepsilon\psi_1(\xi) + \varepsilon^2\psi_2(\xi) + \cdots\cdots, \tag{11}$$

$$\delta = n^2 + \varepsilon\delta_1 + \varepsilon^2\delta_2 + \cdots\cdots, \tag{12}$$

其中 $n = 0,1,2,\cdots$，是参数激励的共振阶数. 将(11)和(12)式代入方程(7)，并比较方程两边 ε 的同次幂系数，可得

$$\ddot{\psi}_0 + n^2\psi_0 = 0, \tag{13}$$

$$\ddot{\psi}_1 + n^2\psi_1 = -\delta_1\psi_0 - 2\psi_0\cos 2\xi, \tag{14}$$

$$\ddot{\psi}_2 + n^2\psi_2 = -\delta_1\psi_1 - \delta_2\psi_0 - 2\psi_1\cos 2\xi, \tag{15}$$

方程(13)的解可表示为

$$\psi_0 = a\cos n\xi + b\sin n\xi, \tag{16}$$

上式表明，当 n 为偶数时，ψ_0 是周期为 π 的周期函数，当 n 为奇数时，ψ_0 是周期为 2π 的周期函数. 以

$n = 1$ 为例,求禁带的边界方程和相应的解.

将(16)式代入方程(14),且令 $n = 1$ 可得

$$\ddot{\psi}_1 + \psi_1 = -(\delta_1 + 1)a\cos\xi - (\delta_1 - 1)b\sin\xi - a\cos3\xi - b\sin3\xi, \tag{17}$$

消去方程中的久期项,要求

$$(\delta_1 + 1)a = 0, \tag{18}$$

$$(\delta_1 - 1)b = 0, \tag{19}$$

于是方程(17)化为

$$\ddot{\psi}_1 + \psi_1 = -a\cos3\xi - b\sin3\xi, \tag{20}$$

由(18)和(19)式可知

$$\delta_1 = -1, \ b = 0, \tag{21}$$

$$\delta_1 = 1, \ a = 0, \tag{22}$$

于是,方程(20)的解可表示为

$$\psi_1 = \frac{1}{8}a\cos3\xi, \tag{23}$$

或

$$\psi_1 = \frac{1}{8}b\sin3\xi, \tag{24}$$

类似地,将(21),(23)式代入方程(15),可得

$$\ddot{\psi}_2 + \psi_2 = -\left(\delta_2 + \frac{1}{8}\right)a\mathrm{con}\xi + \frac{1}{8}a\cos3\xi - \frac{1}{8}b\sin5\xi, \tag{25}$$

消去久期项,要求

$$\delta_2 = -\frac{1}{8} \tag{26}$$

精确到二次近似,一阶不稳定区的一条边界曲线和这条边界曲线上的解可表示为

$$\delta = 1 - \varepsilon - \frac{1}{8}\varepsilon^2 + \cdots, \tag{27}$$

$$\psi = a\cos\xi + \frac{1}{8}\varepsilon a\cos3\xi + \cdots, \tag{28}$$

同样,将(22),(24)式代入方程(15),并用类似的方法,可求得一阶不稳定区的另一条边界曲线和这条边界曲线上的解.

$$\delta = 1 + \varepsilon - \frac{1}{8}\varepsilon^2 + \cdots\cdots, \tag{29}$$

$$\psi = b\sin\xi + \frac{1}{8}\varepsilon b\sin3\xi + \cdots\cdots, \tag{30}$$

由(27)和(29)式,可求得一阶不稳定区的禁带宽度

$$\Delta\delta = 2\varepsilon, \tag{31}$$

用类似的方法,可求得零阶不稳定区的边界曲线和这条边界曲线上的解为

$$\delta = -\frac{1}{2}\varepsilon^2 + \cdots\cdots, \tag{32}$$

$$\psi = a + \frac{1}{2}\varepsilon a\cos2\xi + \cdots\cdots, \tag{33}$$

结果表明,零阶不稳定区只有一条边界曲线.同样,用类似的方法,还可求得二阶不稳定区的边界曲线和这条边界曲线上的解.其中一条边界曲线和边界曲线上的解为

$$\delta = 4 + \frac{5}{12}\varepsilon^2 + \cdots\cdots, \tag{34}$$

$$\psi = a\cos2\xi - \frac{1}{4}\varepsilon a\left(1 - \frac{1}{3}\cos4\xi\right) + \cdots\cdots, \tag{35}$$

另一条边界曲线和边界曲线上的解为

$$\delta = 4 - \frac{1}{12}\varepsilon^2 + \cdots\cdots, \tag{36}$$

$$\psi = b\sin2\xi + \frac{1}{12}\varepsilon b\sin4\xi + \cdots\cdots, \tag{37}$$

由(34)和(36)式,可求得二阶不稳定区的禁带宽度

$$\Delta\delta = \frac{1}{2}\varepsilon^2, \tag{38}$$

其他不稳定区的宽度可以用类似方法求出.

4. 结果和讨论

微分(8)式,将(31)式代入,并注意到(8c)式,可得一阶不稳定区(禁带)的宽度

$$\Delta E_1 = K\beta/2, \tag{39}$$

微分(8)式,将(38)式代入,并注意到(8c)式,可得二阶不稳定区的宽度

$$\Delta E_2 = \frac{md_{\mathrm{p}}^2(K\beta)^2}{16\pi^2\hbar^2}, \tag{40}$$

(39)和(40)式表明,不稳定区的宽度 $\Delta E_{1,2}$ 与入射粒子参数(质量 m)、晶体参数(晶格常数 d_{p})或粒子-晶体相互作用势参数(相互作用强度 $K\beta$)有关.适当选择这些参数,可以有效地加强沟道效应和沟道辐射,为沟道效应和沟道辐射的更广泛应用提供理论根据.

我们在量子力学框架内,利用正弦平方势,描述了沟道粒子的运动行为,把 Schrodinger 方程化为 Mathieu 方程,能量分布自动呈现出了带结构,再现了粒子与晶体相互作用的周期性特征.而这一点正是 Lindhard 势和 Moliere 势本身不曾有的.

[1] Korol A, Solovyov A V, Greiner W 1999 *Int. J. Mod. Phys.* E **8** 49

[2] Robin N, Heiland W, Jensen J 2001 *Phys. Rev.* A **64** 052901

[3] Luo S Y, Shao M Z 1984 *Chin. Phys.* (USA) **4** 670

[4] Luo S Y, Shao M Z 2005 *Acta Phys. Sin.* **54** 4092 (in Chinese) [罗诗裕、邵明珠 2005 物理学报 **54** 4092]

[5] Luo S Y, Shao M Z, Zhou X F 2003 *Chin. J. of Semiconductors* **24** 513 (in Chinese) [罗诗裕、邵明珠、周小方 2003 半导体学报 **24** 513]

[6] Luo S Y, Shao M Z, Wei L X 2004 *Acta Phys. Sin.* **53** 1940 (in Chinese) [罗诗裕、邵明珠、韦洛霞 2004 物理学报 **53** 1940]

[7] Luo S Y, Shao M Z, Hu X D 2004 *HEP&NP* **28** 96 (in Chinese) [罗诗裕、邵明珠、胡西多 2004 高能物理与核物理 **28** 96]

[8] Luo S Y, Shao M Z 2006 *Acta Phys. Sin.* **55** 1336 (in Chinese) [罗诗裕、邵明珠 2006 物理学报 **55** 1336]

[9] Luo S Y, Tan Y M, Shao M Z 2004 *Acta Phys. Sin.* **53** 1157 (in Chinese) [罗诗裕、谭永明、邵明珠 2004 物理学报 **53** 1157]

[10] Hayashi C 1964 *Nonlinear oscillation in physical systems* (New York: McGraw-Hill Book Company) 185

[11] Nayfeh A H 1981 *Introduction to Perturbation Techniques* (John Wiley & Sons) 312

[12] Wang G Q, Wang Y N 2003 *Acta Phys. Sin.* **52** 939 (in Chinese) [王桂秋、王友年 2003 物理学报 **52** 939]

[13] Sun Y M, Zhu Z Y, Wang Z G 2005 *Acta Phys. Sin.* **54** 1707 (in Chinese) [孙友梅、朱智勇、王志光 2005 物理学报 **54** 1707]

The sine-squared potential and the band structure for channelling effects

Shao Ming-Zhu Luo Shi-Yu†

(*Dongguan University of Technology*, *Dongguan* 523106, *China*)

(Received 21 August 2006; revised manuscript received 5 September 2006)

Abstract

The interaction between the charged particle and the crystal is described by quantum mechanics. The schrödinger equation describing a paticle moving in the channel is reduced to Mathieu equation by using a sine-squared potential. The band structure of this system is discussed based on Bloch theorem. The instability zone and the stop-band width are found by the perturbation techniques. It is shown that the width of the 1-st order and 2-nd order instability zones are $\Delta E_1 = \frac{K\beta}{2}$ and $\Delta E_2 = \frac{md_p^2(K\beta)^2}{16\pi^2\hbar^2}$, respectively, and this system presents automatical the band structure, which is not present in Lindhard potential and Moliere potentials.

Keywords: channeling effect, band constraction, sine-squared potential, perturbation techniques

PACC: 6180M

† Corresponding author. E-mail: bgluoshy@dgut.edu.cn