

正切平方势与平面沟道系统的本征值和本征函数

罗诗裕[†] 邵明珠

(东莞理工学院, 东莞 523106)

(2004 年 5 月 17 日收到, 2005 年 1 月 28 日收到修改稿)

讨论和分析了常用的平面连续势, 引入了新的正切平方势描写粒子-晶体相互作用. 在量子力学框架内, 把系统的本征值和本征函数问题化为超几何方程的本征值和本征函数问题. 将低位能级之间的自发辐射同实验进行了比较, 结果表明理论和实验符合很好.

关键词: Schrödinger 方程, 超几何函数, 沟道辐射, 本征值, 本征函数

PACC: 2320L, 2930, 0300

1. 引 言

人们在考察带电粒子同物质相互作用时, 先后发现了沟道效应和沟道辐射. 我们也对此进行了比较多的研究. 注意到, 当带电粒子沿着晶体某些方向(特别是低晶面指数方向)入射时, 它就像进入一条通道一样很容易穿透到晶体内部, 这个现象称为沟道效应^[1-5]. 经典物理学证明, 在电磁场中运动的带电粒子, 只要它的加速度不为零, 就要自发地向外辐射电磁波. 在晶格场中运动的带电粒子也不例外, 强大的晶格场可以使辐射能量达到很高. 作沟道运动的带电粒子将不断向外辐射能量, 这种辐射称为沟道辐射^[6-9].

晶体沟道分为(平)面沟道和(晶)轴沟道两种. 带电粒子在沟道中的运动行为决定于粒子-晶体相互作用势. 为了模拟带电粒子的运动行为, 常常假设带正电的不连续晶面(因为正离子只占据不连续的格点位置), 与带(正)电粒子的相互作用势是平面的、连续的, 这就是所谓平面连续势假设. 在平面连续近似下, 正电子在面沟道中的运动行为就好像在两个带(正)电的平行平面之间运动一样, 其轨道总是在中心平面附近振荡. 常用的平面连续势有 Lindhard 势和 Moliere 势^[10, 11]. 我们也曾引入正弦平方势进行过描写^[5]. 研究表明, 在经典力学框架内, 粒子的运动方程是一个摆方程. 如果进一步考虑粒

子的运动阻尼和外场的周期调制, 粒子-晶体相互作用系统是一个具有混沌行为和全局分叉性质的典型动力学系统. 如果在量子力学框架内进行描述, 则粒子的波动方程就是熟知的 Mathieu 方程, 系统出现了能带结构.

注意到沟道粒子同晶体相互作用与自由电子同摆动场之间的作用十分类似. 于是, 人们自然想到了把它改造为 X 激光或 γ 激光^[10, 11]. 事实上, 作沟道运动的带电粒子将受到上百万高斯的晶格场作用, 而晶格间距又只有 0.1nm 的量级, 同自由电子激光相比, 沟道辐射能量高得多(一般都位于 X 能区或 γ 能区). 正是由于沟道辐射可望改造为 X 激光或 γ 激光, 引起了人们密切注意.

本文引入新的正切平方势, 把粒子的 Schrödinger 方程化为超几何方程, 用超几何函数和它的边界条件导出了系统的本征态和本征值, 并同实验进行了比较. 结果表明, 对于 56MeV 的正电子, 硅(110)面沟道辐射的能量为 40.5keV, 同实验值 37keV 比较, 二者符合很好.

2. 正切平方势

常用的粒子-晶体相互作用势有 Lindhard 势和 Moliere 势. 无量纲的 Lindhard 势具有如下形式:

$$V(X) = KW_L(X), \quad (1)$$

其中

[†]E-mail: luoshy@dgut.edu.cn

$$W_M(X) = [(1 + X)^2 + 12D^{-2}]^{1/2} + [(1 - X)^2 + 12D^{-2}]^{1/2} - 2[1 + 12D^{-2}Y]^2, \quad (2)$$

而无量纲的 Moliere 势则可表示为

$$V(X) = KW_M(X), \quad (3)$$

其中

$$W_M(X) = \frac{0.2}{3D} e^{-3D} [\text{ch}(3XD) - 1] + \frac{1.1}{0.6D} e^{0.6D} [\text{ch}(0.6XD) - 1] + \frac{0.7}{0.15D} e^{0.15D} [\text{ch}(0.15XD) - 1], \quad (4)$$

而

$$X = 2x/d_p, D = d_p/a_T, K = \pi Z_1 Z_2 e^2 Nd_p^2, \quad (5)$$

x 是粒子偏离沟道中心平面的距离, d_p 是晶面间距, a_T 是托马斯-费米屏蔽距离, Z_1, Z_2 是入射粒子和晶体的原子序数, e 是电子电荷, Nd_p^2 是晶体原子的面密度。(2)和(4)式表明, 粒子-晶体相互作用势只与粒子离开中心平面的距离 x 有关。

我们也曾引入正弦平方势进行描述^[6-9]。结果表明, 在经典力学框架内粒子的运动方程是一个摆方程; 在量子力学框架内, 粒子的波动方程是 Mathieu 方程。无量纲的正弦平方势可以表示为

$$V(X) = K\beta_0 \sin^2(\pi X/2), \quad (6)$$

其中 K, X 由(5)式给出, β_0 是势参数。

本文引入如下形式的正切平方势(图1):

$$V(x) = V_0 \text{tg}^2(\pi x/d_p), \quad (7)$$

其中 V_0 是势参数, 由实验确定或与 Lindhard 势或 Moliere 势拟合给出。(7)式表明, 当 $x = 0$ (坐标原点) 时, $V(0) = 0$; 当 $x = \pm d_p/2$ 时, $V(d_p/2) = \infty$ 。可见正切平方势是一个无限深势阱, 这是与实验不符合的。其实, Lindhard 势和 Moliere 势也有这个问题。为了回避这个问题, Lindhard 势和 Moliere 势引入托马斯-费米屏蔽距离 a_T 。换句话说, 人为规定粒子不能到达晶面, 而是只能到达离晶面 a_T 的地方。我们也作类似处理。注意到当 $x = d_p - a_T$ 时, 相互作用势切断在最大值 V_m (如图1所示)。于是, 由(7)式可得

$$V_0 = V_m / \text{ctg}^2(\pi a_T/d_p), \quad (8)$$

其中 V_m 是势阱深度。

3. Schrödinger 方程及系统的本征值和本征函数

将(7)式代入 Schrödinger 方程, 可得

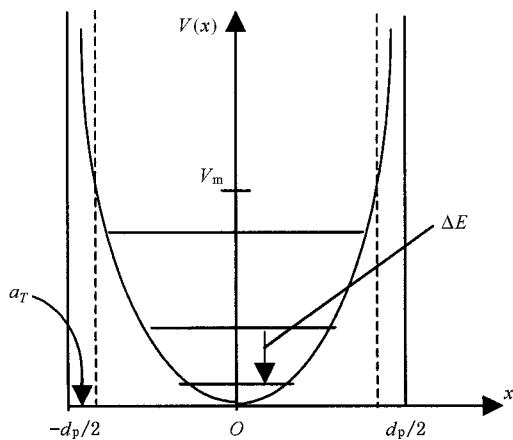


图1 正切平方势与能级跃迁(示意图) ($\Delta E = 40.5\text{keV}$)

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{d^2\psi}{dx^2} - (E - V_0 \text{tg}^2 \pi x/d_p) \psi = 0, \quad (9)$$

其中 μ 是粒子质量, E 是粒子能量。作如下代换:

$$\psi = (\cos \pi x/d_p)^{-2\lambda} u, \quad (10)$$

并令

$$\lambda = \frac{1}{4} \left(\sqrt{\frac{8\mu V_0 d_p^2}{\hbar^2 \pi^2} + 1} - 1 \right), \nu = \sqrt{\frac{\mu d_p^2}{2\pi^2 \hbar^2} (E + V_0)}, \quad (11)$$

可得到关于 u 的方程

$$\frac{d^2 u}{dx^2} + 4 \frac{\pi}{d_p} \lambda \text{tg} \frac{\pi x}{d_p} \frac{du}{dx} + \frac{4\pi^2}{d_p^2} (\nu^2 - \lambda^2) u = 0. \quad (12)$$

引入新的独立变量

$$z = \sin^2(\pi x/d_p). \quad (13)$$

方程(12)化为超几何方程

$$\alpha(1-z) \frac{d^2 u}{dz^2} + \left[\frac{1}{2} - (1-2\lambda)z \right] \frac{du}{dz} + (\nu^2 - \lambda^2) u = 0, \quad (14)$$

将这一方程与一般形式的超几何方程^[12]

$$\alpha(1-z) \frac{d^2 u}{dz^2} + [\gamma - (\alpha + \beta + 1)z] \frac{du}{dz} + \alpha\beta u = 0 \quad (15)$$

比较, 可求得参数

$$\gamma = \frac{1}{2}, \alpha = -\nu - \lambda, \beta = \nu - \lambda. \quad (16)$$

方程(14)的解可用超几何函数表示。根据超几何方程理论, 可知方程(14)有两个解, 其中一个解

$$u_1 = F\left(-\nu - \lambda, \nu - \lambda, \frac{1}{2}; z\right), \quad (17)$$

在 $z = 0$ (对应于 $x = 0$) 处不等于零, 但有限。另一

个解

$$u_2 = \sqrt{z} F\left(-\nu - \lambda + \frac{1}{2}, \nu - \lambda + \frac{1}{2}, \frac{3}{2}; iz\right), \quad (18)$$

在 $z=0$ 处趋于零. 为了确定在 $z=1$ (对应于 $x = \pm d_p/2$) 处解的行为, 我们利用关系式

$$F(\alpha, \beta, \gamma; iz) = (1-z)^{-\alpha} F\left(\alpha, \lambda - \beta, \gamma; \frac{z}{z-1}\right), \quad (19)$$

于是, 可求得 u_1 和 u_2 为

$$u_1 = (1-z)^{\nu+\lambda} F\left(-\nu - \lambda, -\nu + \lambda + \frac{1}{2}, \frac{1}{2}; \frac{z}{z-1}\right), \quad (20)$$

$$u_2 = \sqrt{z} (1-z)^{\nu+\lambda-1/2} F\left(-\nu - \lambda + \frac{1}{2}, -\nu + \lambda + 1, \frac{3}{2}; \frac{z}{z-1}\right). \quad (21)$$

要使波函数 ψ 在 $x = \pm d_p/2$ 处趋于零, 必须使 $\frac{z}{z-1}$ 的幂级数是一个多项式. 为此, 我们作如下讨论. 注意到, 若 $\nu + \lambda$ 或者 $\nu - \lambda - \frac{1}{2}$ 是非负整数, 则在 u_1 表达式(20)中的超几何级数就截断为多项式. 不过, 只有在第二种情形中, 即只有当, 而且仅当

$$\nu - \lambda - \frac{1}{2} = k \quad (k = 0, 1, 2, \dots) \quad (22)$$

时, 在 $x = \pm d_p/2$ 处, $\psi = 0$ 这个条件才能满足. 由此导出系统的能量本征值为

$$E_k = [(2k+1)^2 + 4(2k+1)\lambda - 2\lambda] \frac{\pi^2 \hbar^2}{2\mu d_p^2}. \quad (23)$$

对方程(21)作类似讨论也可看出, 能级必须满足下列条件:

$$\nu - \lambda = l \quad (l = 1, 2, 3, \dots), \quad (24)$$

将能级表达式(23)和(24)合并, 可将它们统一表示为

$$E_n = (n^2 + 4n\lambda - 2\lambda) \frac{\pi^2 \hbar^2}{2\mu d_p^2} \quad (n = 1, 2, 3, \dots). \quad (25)$$

当 n 为奇数时, 相应的本征函数为

$$\psi_n = c_n \left(\cos \frac{\pi x}{d_p}\right)^{-2\lambda} F\left(-\frac{n}{2} - 2\lambda, \frac{n}{2}, \frac{1}{2}; \sin^2 \frac{\pi x}{d_p}\right). \quad (26)$$

当 n 为偶数时, 相应的本征函数则为

$$\psi_n = c_n \left(\cos \frac{\pi x}{d_p}\right)^{-2\lambda} \sin \frac{\pi x}{d_p} \cdot F\left(-\frac{n}{2} - 2\lambda$$

$$+ \frac{1}{2}, \frac{n}{2} + \frac{1}{2}, \frac{3}{2}; \sin^2 \frac{\pi x}{d_p}\right). \quad (27)$$

令 $n=1$, 可得归一化的基态波函数

$$\psi = \sqrt{\frac{\pi \Gamma(2\lambda + 1)}{d_p \Gamma\left(\frac{1}{2}\right) \Gamma\left(2\lambda + \frac{3}{2}\right)}} \left(\cos \frac{\pi x}{d_p}\right)^{2\lambda+1}, \quad (28)$$

其中 $\Gamma\left(\frac{1}{2}\right) = \sqrt{\pi}$.

考虑两种特殊情形:

1) $\lambda \rightarrow 0$ 的情形. 由(11)式可以看出, 当 λ 趋于零时, V_0 也趋于零. 粒子行为化为无限深势阱中的运动问题. 于是, 由(25)式可得

$$E_n = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2\mu d_p^2} \cdot n^2. \quad (29)$$

2) $\lambda \gg 1$ 的情形. 由(11)式可以看出, 当 $\lambda \gg 1$ 时, V_0 也很大. 粒子行为化为抛物线势阱中的运动问题. 对于低位态 ($n \ll \lambda$), 由(25)式, 可求得低位能级

$$E_n = \hbar \omega \left(n + \frac{1}{2}\right) \quad (n = 1, 2, \dots), \quad (30)$$

式中

$$\omega = \frac{\pi}{d_p} \sqrt{\frac{2V_0}{\mu}}. \quad (31)$$

事实上, 只需将正切平方势在 $x=0$ 附近展开, 且保留到二次项, 就可以得到这个结果.

4. 结果和讨论

4.1. 相对论效应和 Doppler 效应

方程(25)给出了静止(惯性)坐标系中的能量本征值. 在实验室坐标中, 还必须进一步考虑质量的相对论效应和运动的 Doppler 效应.

考虑到质量的相对论效应(25)式中的正电子质量可以表示为

$$\mu = \mu_0 \gamma, \quad (32)$$

其中 μ_0 是静止质量, γ 是相对论因子.

考虑到 Doppler 效应, 实验室坐标系的频率可以表示为^[8,9]

$$\omega_{nl} = \frac{n\omega_0}{1 - \boldsymbol{\beta} \cdot \mathbf{k}}, \quad (33)$$

其中 \mathbf{k} 是辐射方向单位矢量, ω_0 是惯性系中的辐射频率, 且

$$E_n = \hbar\omega_0,$$

其中 E_n 由(25)式给出,注意到,辐射主要集中在粒子运动方向,张角近似为 $\theta \leq \gamma^{-1}$ 的范围内,则(33)式可进一步化为

$$\omega_{nl} = \frac{n\omega_0}{1 - \beta\cos\theta} \approx 2n\omega_0\gamma^2, \quad (34)$$

其中 θ 是辐射方向(k 矢量)与电子纵向运动方向之间的夹角.注意到(25)式是惯性系中的正电子跃迁能量,在实验室坐标中,可由(32)和(34)式,将(25)式改写为

$$E_{nl} = (n^2 + 4n\lambda - 2\lambda) \frac{\pi^2 \hbar^2}{2\mu_0 d_p^2} \gamma, \quad (n = 1, 2, 3, \dots), \quad (35)$$

4.2. 辐射能量

注意到正电子在任意两条能级之间的跃迁就是系统的辐射能量.差(微)分式(35)可得

$$\Delta E_{nl} = \frac{\pi^2 \hbar^2}{\mu_0 d_p^2} (n + 2\lambda) \gamma \Delta n, \quad n = 1, 2, 3, \dots, \quad (36)$$

其中 Δn 原则上可以取任意值.事实上,根据选择定则,只有相邻能级(即 $\Delta n = 1$)之间的跃迁才是允许的(或概率最大).当 $\Delta n = 1$ 时(36)式化为

$$\Delta E_{nl} = \frac{\pi^2 \hbar^2}{\mu_0 d_p^2} (n + 2\lambda) \gamma, \quad (n = 1, 2, 3, \dots), \quad (37)$$

上式表明,随着 n 的增加,相邻能级之间的距离越来越大,这正是无限深势阱所具有的能级特征.当 $n = 1$ 时(37)式给出了第二条能级向基态能级的跃迁

$$\Delta E_l = \frac{\pi^2 \hbar^2}{\mu_0 d_p^2} (1 + 2\lambda) \gamma. \quad (38)$$

实验表明,能量为 56MeV 的正电子在 Si(110) 面沟道中的自发辐射,其能量中心位于 37keV,线宽 20% 左右.我们考察正电子的 Si(110) 面沟道辐射.选择与晶体有关的参数 $d_p = 0.192\text{nm}$, $V_m = 27.0\text{eV}$, $a_T = 0.017\text{nm}$;与入射粒子有关的参数 $E = 56\text{MeV}$ ($\gamma \approx 112$), $\mu_0 \approx 0.51\text{MeV}$.根据(38)(8)和(11)式,可求得 $\Delta E_l = 40.5\text{keV}$,即实验室中正电子辐射能量(如图 1 所示).高位态相邻能级之间跃迁对辐射谱的贡献仅在高能一侧使谱线展宽.同实验比较可以发现二者符合很好^[13]

4.3. 辐射谱分布

更详细分析应当进一步计算辐射谱分布^[8]

$$\frac{dI}{d\Omega} = \frac{\hbar\alpha}{2\pi c^2} \sum_{m,n} \omega_{mn}^4 x_{mn}^2 P_n \times \left[\frac{(1 - \beta\cos\theta)^2 - (1 - \beta^2)\sin^2\theta\cos^2\varphi}{(1 - \beta\cos\theta)^3} \right], \quad (39)$$

其中 $\alpha = 1/137$ 是精细结构常数, $\beta = v/c$ 是正电子无量纲运动速度, ω_{mn} 是正电子从 m 态到 n 态的跃迁频率, x_{mn} 是从 m 态到 n 态的跃迁矩阵元, P_n 是正电子占据第 n 个能态的占据概率. φ 是 k 矢量在 (x, y) 平面内的投影与 x 轴之间的夹角.要得到好的实验结果,需要好的束流品质,束流冷却技术可以为实验提供品质好的束流^[14-16].关于这个问题我们将在另外的文章中讨论.

[1] Luo S Y, Shao M Z, Tang J N and Liu Z R 1988 *Acta Phys. Sin.* **37** 1394 (in Chinese) [罗诗裕、邵明珠、唐建宁、刘曾荣 1988 物理学报 **37** 1394]

[2] Luo S Y and Shao M Z 1988 *Acta Phys. Sin.* **37** 1278 (in Chinese) [罗诗裕、邵明珠 1988 物理学报 **37** 1278]

[3] Luo S Y 2003 *Nucl. Phys. Rev.* **20** 55 (in Chinese) [罗诗裕 2003 原子核物理评论 **20** 55]

[4] Luo S Y, Shao M Z and 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]

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

[6] Shao M Z 1993 *Chin. J. Semiconductors* **14** 353 (in Chinese) [邵明珠 1993 半导体学报 **14** 353]

[7] Shao M Z 1992 *Acta Phys. Sin.* **41** 1825 (in Chinese) [邵明珠 1992 物理学报 **41** 1825]

[8] Luo S Y 2004 *Acta Phys. Sin.* **53** 1157 (in Chinese) [罗诗裕 2004 物理学报 **53** 1157]

[9] Luo S Y 1984 *Chin Phys (USA)* **4** 670

[10] Korol A, Solovoy A V and Greiner W 1998 *J Phys G* **24** L45

[11] Luo S Y 2004 *Acta Phys. Sin.* **53** 1940 (in Chinese) [罗诗裕 2004 物理学报 **53** 1940]

[12] Wang Z X and Guo D R 2000 *Introduction of Speasial Function* (Beijing: Beijing University Press) p258 (in Chinese) [王竹溪、郭敦仁 2000 特殊函数概论(北京大学出版社)第 258 页]

- [13] Korol A , Solovyov A V and Greiner W 1999 *Int. J. Mod. Phys. E* **8** 49 (in Chinese) 邵明珠、罗诗裕、Hofmann I 1990 物理学报 **39** 1200]
- [14] Shao M Z , Luo S Y and Hofmann I 1990 *Acta Phys. Sin.* **39** 1189 (in Chinese) 邵明珠、罗诗裕、Hofmann I 1990 物理学报 **39** 1189]
- [15] Shao M Z , Luo S Y and Hofmann I 1990 *Acta Phys. Sin.* **39** 1200 [16] Shao M Z , Luo S Y and Hofmann I 1990 *Acta Phys. Sin.* **39** 1207 (in Chinese) 邵明珠、罗诗裕、Hofmann I 1990 物理学报 **39** 1207]

The $\tan^2 x$ potential and the eigenvalue and eigenfunction for planar channelling radiation

Luo Shi-Yu Shao Ming-Zhu

(Dongguan University of Technology , Dongguan 523106 ,China)

(Received 17 May 2004 ; revised manuscript received 28 January 2005)

Abstract

The $\tan^2 x$ potential is introduced to describe the interaction between a particle and a crystal. In the frame of quantum mechanics , Schrödinger equation is reduced to the hypergeometric equation. The eigenvalues are calculated also. It is shown that the conformity between the theory and the experiment is good.

Keywords : Schrödinger equation , hypergeometric function , channelling radiation , eigenvalue , eigenfunction

PACC : 2320L , 2930 , 0300