

УДК 537.8

ВОЛНОВЫЕ ФУНКЦИИ ПОЗИТРОНОВ ПРИ КАНАЛИРОВАНИИ В НАПРАВЛЕНИИ [111] КРИСТАЛЛА КРЕМНИЯ

© 2025 г. В. В. Сыщенко^{а,*}, А. И. Тарновский^а, А. С. Парахин^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 29.06.2024 г.

После доработки 25.08.2024 г.

Принято к публикации 25.08.2024 г.

Для положительно заряженной частицы отталкивающие непрерывные потенциалы трех соседних цепочек [111] кристалла кремния создают небольшую потенциальную яму, обладающую симметрией равностороннего треугольника, описываемой группой C_{3v} . Движение квантовой частицы в такой яме представляет интерес в плане проявлений квантового хаоса. Разработанная ранее процедура численного нахождения уровней энергии и волновых функций стационарных состояний, учитывающая симметрию данной задачи, использована для исследования поперечного движения каналированных позитронов с энергией 5, 6 и 20 ГэВ. Дана классификация стационарных состояний поперечного движения позитрона на основе теории представлений групп. Найдены также волновые функции стационарных состояний в аксиально-симметричной потенциальной яме и показано, каким образом происходит модификация этих функций под влиянием возмущения, обладающего симметрией равностороннего треугольника. В верхней части треугольной потенциальной ямы классическое движение является хаотическим для подавляющей части начальных условий. Структура найденных волновых функций в этой области обладает характерными чертами, предсказываемыми теорией квантового хаоса.

Ключевые слова: каналирование, кремний, численное моделирование, спектральный метод, гексагональная сетка, треугольная симметрия, квантовый хаос.

DOI: 10.31857/S1028096025010173, EDN: CNAQTA

ВВЕДЕНИЕ

Быстрая заряженная частица, движущаяся в кристалле под малым углом к направлению плотно упакованной атомной цепочки, может захватываться в потенциальную яму, образованную одной или несколькими такими цепочками, совершая финитное движение в поперечной плоскости, называемое аксиальным каналированием [1–4]. В этом случае движение частицы с хорошей точностью описывается в приближении непрерывного потенциала атомной цепочки, усредненного вдоль ее оси [5]. В поле такого потенциала сохраняется продольная компонента импульса частицы p_{\parallel} , и задача о движении частицы сводится к двумерной задаче о движении в поперечной плоскости.

Известно (например, [1]), что при каналировании быстрых частиц в кристаллах могут проявляться квантовые эффекты. В серии предыдущих работ [6–10] эти эффекты исследовали в случае каналирования электронов в направлении [110] кристалла кремния, а в [11–14] развитый подход был распространен на каналирование электронов и позитронов в направлении [100] кристалла кремния. Последний случай интересен тем, что в фазовом пространстве каналированных частиц сосуществуют области регулярной и хаотической динамики. Симметрия потенциала, в котором происходит поперечное движение, описывается в этих двух случаях группами C_{2v} и C_{4v} (симметрия прямоугольника и симметрия квадрата) [15] соответственно. В этих работах было получено под-

тверждение предсказаний теории квантового хаоса [16–19], касающихся как статистических свойств массивов уровней энергии, так и характера индивидуальных квантовых состояний в случае, когда движение каналированной частицы в классическом пределе носит хаотический характер. Отдельный интерес, однако, представляет случай движения частицы в поле потенциала, обладающего симметрией равностороннего треугольника (группа C_{3v}). Именно таков, в частности, модельный потенциал Хенона–Хейлса, рассмотренный в одном из пионерских исследований динамического хаоса [20]. Кроме того, одно из пионерских исследований туннелирования, сопровождаемого хаосом (chaos-assisted tunneling) [21], также было выполнено для потенциала, обладающего симметрией треугольника.

В настоящей работе с помощью развитого в [22] численного метода найдены наборы уровней энергии поперечного движения и соответствующих им волновых функций стационарных состояний позитронов, каналированных в направлении [111] кристалла кремния. В этом случае отталкивающие потенциалы соседних атомных цепочек создают небольшую потенциальную яму, обладающую симметрией C_{3v} . Обсуждаются качественные особенности найденных волновых функций, дана их классификация в соответствии с неприводимыми представлениями группы C_{3v} . Прослежена связь найденных волновых функций с волновыми функциями частицы в двумерной аксиально-симметричной потенциальной яме, параметры которой подобраны таким образом, чтобы обеспечить ту же среднюю квазиклассическую плотность уровней энергии, что и в рассматриваемой яме в кристалле кремния.

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 (111) кристалла кремния такие цепочки образуют гексагональную решетку со стороной примитивной ячейки $a = a_z / \sqrt{6} \approx 2.217 \text{ \AA}$, где a_z — период решетки кремния. Для позитрона непрерывный потенциал цепочки является отталкивающим, и вблизи центра треугольника, в вершинах которого находятся три ближайшие друг к другу це-

почки, возникает небольшая потенциальная яма (рис. 1), в которой возможно финитное движение позитрона в поперечной плоскости — аксиальное каналирование. Потенциальная энергия позитрона с учетом вкладов этих трех цепочек будет описываться следующей суммой:

$$U(x, y) = U_1 \left(x, y - \frac{a}{\sqrt{3}} \right) + U_1 \left(x + \frac{a}{2}, y + \frac{a}{2\sqrt{3}} \right) + U_1 \left(x - \frac{a}{2}, y + \frac{a}{2\sqrt{3}} \right) - 7.8571 \text{ эВ}, \quad (1)$$

где константа выбрана таким образом, чтобы сделать потенциал равным нулю в центре треугольника. Непрерывный потенциал отдельной атомной цепочки аппроксимирован формулой [1]:

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

где для цепочки [111] кристалла кремния $U_0 = 58.8 \text{ эВ}$, $\alpha = 0.37$, $\beta = 2.0$, $R = 0.194 \text{ \AA}$ (радиус Тома-са–Ферми). Состояния поперечного движения позитрона описываются гамильтонианом:

$$\hat{H} = -\frac{c^2 \hbar^2}{2E_{\parallel}} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right) + U(x, y), \quad (3)$$

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 [1].

Нахождение собственных функций и собственных значений гамильтониана (3) с потенциалом (1) возможно только численно. В основе

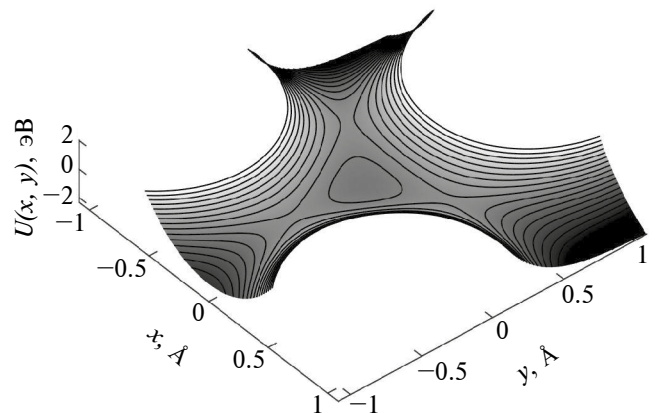


Рис. 1. Потенциальная энергия (1) позитрона, движущегося вблизи направления [111] кристалла кремния.

представляемого подхода лежит так называемый спектральный метод нахождения собственных значений и собственных функций гамильтониана [23] (детали которого применительно к задаче каналирования описаны в [6–9, 24, 25]), включающий в себя численное моделирование временной эволюции волнового пакета, описываемой нестационарным уравнением Шредингера. Специфической численной задачи с потенциалом (1) является необходимость задания волновой функции на гексагональной дискретной сетке: в [22] было показано, что использование квадратной сетки приводит к возникновению нефизических артефактов. Там же была описана учитывающая симметрию задачи процедура, использующая гексагональную сетку, и продемонстрировано отсутствие артефактов. Данная процедура использована в настоящей работе.

Для исследования спектра гамильтониана (3) его собственные состояния необходимо классифицировать в соответствии со свойствами симметрии потенциала (1). Поскольку потенциал (1) обладает симметрией равностороннего треугольника, все доступные состояния поперечного движения можно классифицировать по неприводимым представлениям группы C_{3v} (или изоморфной ей группы D_3), (например, [15]) в зависимости от типа симметрии волновой функции. Элементы группы включают в себя тождественное преобразование I , повороты на углы $2\pi/3$ и $4\pi/3$, обозначаемые R и R^2 , отражение в “вертикальной” плоскости P и комбинации PR и PR^2 . Эта группа имеет два одномерных неприводимых представления, обозначаемых A_1 и A_2 , соответствующих невырожденным уровням энергии, и одно двумерное, обозначаемое E , соответствующее двукратно вырожденным уровням. Функция, неизменная при всех преобразованиях, образует базис одномерного неприводимого представления A_1 . Начальный волновой пакет, удовлетворяющий этому требованию, легко построить из результатов действия на несимметричный волновой пакет гауссова вида ψ_0 всех операторов группы, суммированных с одинаковыми весами:

$$\psi^{(A_1)} = \psi_0 + R\psi_0 + R^2\psi_0 + P\psi_0 + PR\psi_0 + PR^2\psi_0. \quad (4)$$

Функция, меняющая знак при отражении,

$$\psi^{(A_2)} = \psi_0 + R\psi_0 + R^2\psi_0 - P\psi_0 - PR\psi_0 - PR^2\psi_0, \quad (5)$$

образует базис представления A_2 .

Поскольку полный набор собственных функций вещественного гамильтониана всегда можно выбрать вещественным (например, [19]), в качестве двух линейно независимых волновых пакетов, содержащих только двукратно вырожденные состояния, удобно выбрать линейные комбинации вида:

$$\begin{aligned} \psi^{(E_R)} &= \psi_0 - \frac{1}{2}R\psi_0 - \frac{1}{2}R^2\psi_0 + \\ &+ P\psi_0 - \frac{1}{2}PR\psi_0 - \frac{1}{2}PR^2\psi_0, \end{aligned} \quad (6)$$

$$\begin{aligned} \psi^{(E_I)} &= \frac{\sqrt{3}}{2}R\psi_0 - \frac{\sqrt{3}}{2}R^2\psi_0 - \\ &- \frac{\sqrt{3}}{2}PR\psi_0 + \frac{\sqrt{3}}{2}PR^2\psi_0. \end{aligned} \quad (7)$$

Первая из этих функций сохраняет знак при отражении P , вторая — меняет его, а при операциях поворотов графики этих функций поворачиваются на соответствующий угол. На первый взгляд, такое поведение соответствует приводимому представлению группы, однако из функций (6) и (7) можно построить базис двумерного неприводимого представления E , если рассматривать их как вещественную и мнимую части комплексных базисных функций. Действительно, функции

$$\psi_1^{(E)} = \psi^{(E_R)} + i\psi^{(E_I)}, \quad \psi_2^{(E)} = \psi^{(E_R)} - i\psi^{(E_I)}$$

переходят друг в друга при отражениях, а при поворотах приобретают фазовый множитель.

РЕЗУЛЬТАТЫ И ИХ ОБСУЖДЕНИЕ

В работе численно найдены волновые функции стационарных состояний поперечного движения в потенциальной яме (1) позитронов с энергией $E_{\parallel} = 5, 6$ и 20 ГэВ. Из квазиклассических аргументов следует (например, [1]), что число связанных состояний в яме возрастает с ростом E_{\parallel} . Оказывается, что для энергии 5 ГэВ связанные состояния, относящиеся к типу симметрии A_2 , еще отсутствуют, а при энергии 6 ГэВ первое такое состояние появляется вблизи верхнего края потенциальной ямы (ее глубина составляет 0.3278 эВ). Такое поведение неудивительно, если характер симметрии волновых функций данного типа предполагает наличие не менее трех линий узлов в азимутальном направлении, что соответствует сравнительно высокому значению средней кинетической энергии состояния. Графики всех волновых функций связанных стационарных состояний для случая $E_{\parallel} = 6$ ГэВ приведены на рис. 2

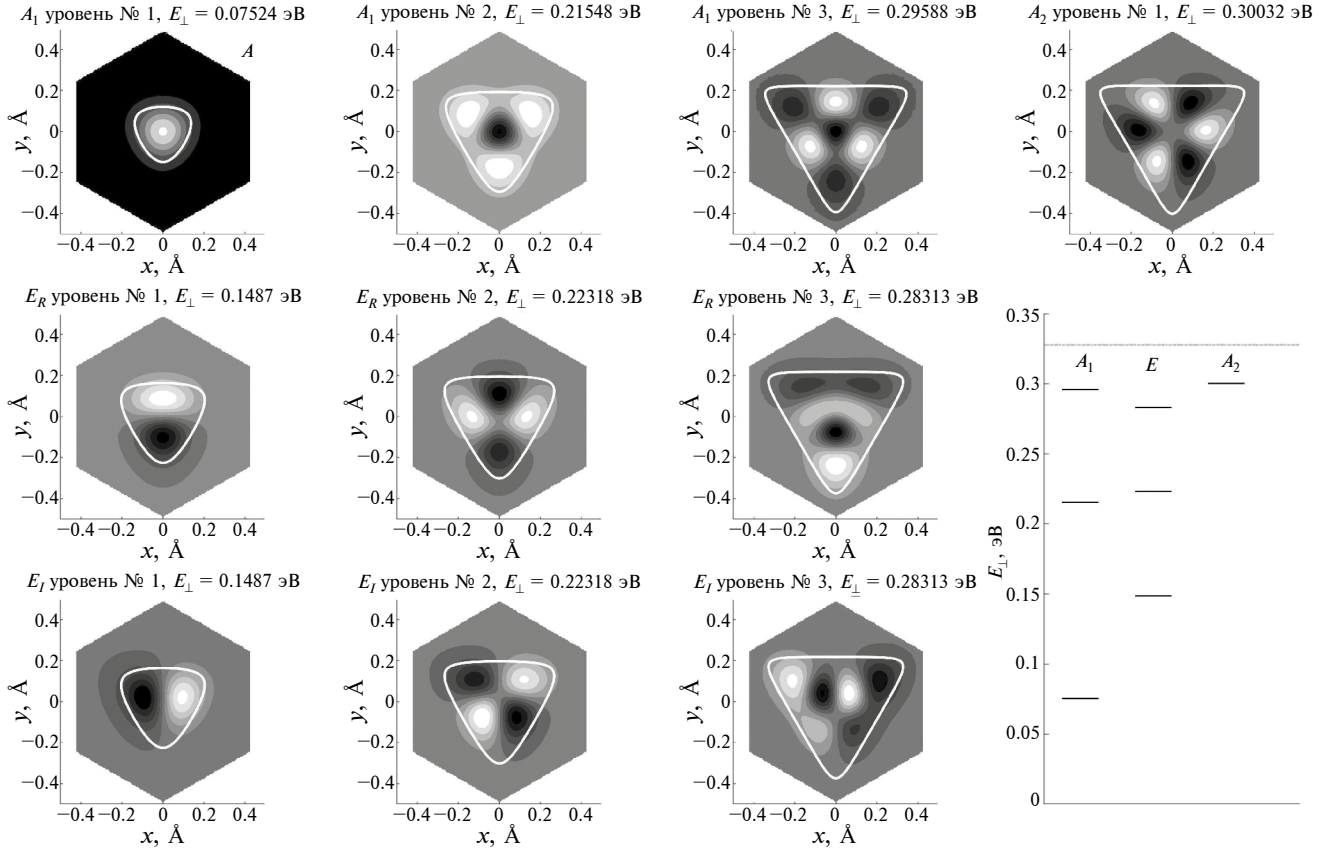


Рис. 2. Графики собственных функций дискретного спектра поперечного движения позитронов с энергией $E_{\parallel} = 6$ ГэВ в потенциальной яме (1), линиями отмечены классические границы движения $U(x, y) = E_{\perp}$. Также изображена схема уровней энергии поперечного движения позитронов, горизонтальным пунктиром отмечена высота седловой точки потенциала (1) $U = 0.3278$ эВ.

вместе со схемой уровней энергии поперечного движения E_{\perp} .

Интересно сравнить волновые функции стационарных состояний в потенциальной яме (1) с аналогичными волновыми функциями в аксиально-симметричной потенциальной яме. Для такого сравнения была выбрана потенциальная яма в виде степенной функции

$$U(x, y) = \gamma r^{\delta}, r = \sqrt{x^2 + y^2}, \quad (8)$$

где коэффициенты γ и δ подбирали таким образом, чтобы доступный для движения с энергией, меньшей или равной заданному значению E_{\perp} , фазовый объем:

$$\int_{H(x, y, p_x, p_y) \leq E_{\perp}} dx dy dp_x dp_y, \quad (9)$$

где $H(x, y, p_x, p_y)$ — классический гамильтониан системы) был одинаков для потенциалов (1) и (8). Для позитронов с энергией $E_{\parallel} = 6$ ГэВ такой

подбор дал значения коэффициентов $\gamma = 3.1807$, $\delta = 1.85$ при условии, что расстояние до оси потенциальной ямы подставляется в (8) в ангстремах, а потенциальная энергия выражается в электронвольтах.

В поле аксиально-симметричного потенциала наряду с энергией поперечного движения E_{\perp} , сохраняется проекция орбитального момента частицы m на ось потенциальной ямы. Наличие двух этих интегралов движения делает двумерную систему интегрируемой. Стационарные состояния в этом случае характеризуются двумя квантовыми числами: радиальным n_r (соответствующим числу нулей радиальной части волновой функции, за исключением обращения в нуль при $r = 0$ и на бесконечности) и орбитальным m (например, задача 4.7 в [26], а также [7–9]), состояния с $m = 0$ невырожденные, а состояния с $m \neq 0$ двукратно вырожденные по знаку m (т.е. по направлению проекции орбитального момента частицы на ось потенциальной ямы). В последнем случае пару волновых функций, соответствующих такому дву-

кратно вырожденному уровню энергии, удобно выбрать чисто вещественными в виде

$$\rho_{n_r,|m|}(r)\sin|m|\phi, \rho_{n_r,|m|}(r)\cos|m|\phi. \quad (10)$$

Определить значения этих квантовых чисел для конкретного состояния можно путем подсчета линий узлов на графике волновой функции. Для удобства такого подсчета области положи-

тельных значений функции закрашивают белым, а отрицательных — черным, как на рис. 3–6, где в правых колонках приведены примеры волновых функций вида (10) стационарных состояний в потенциальной яме (8).

Теория групп предсказывает (например, [27]), что возмущение поля аксиально-симметричного потенциала, обладающего симметрией C_{3v} (как в случае потенциала (1)), будет приводить к сня-

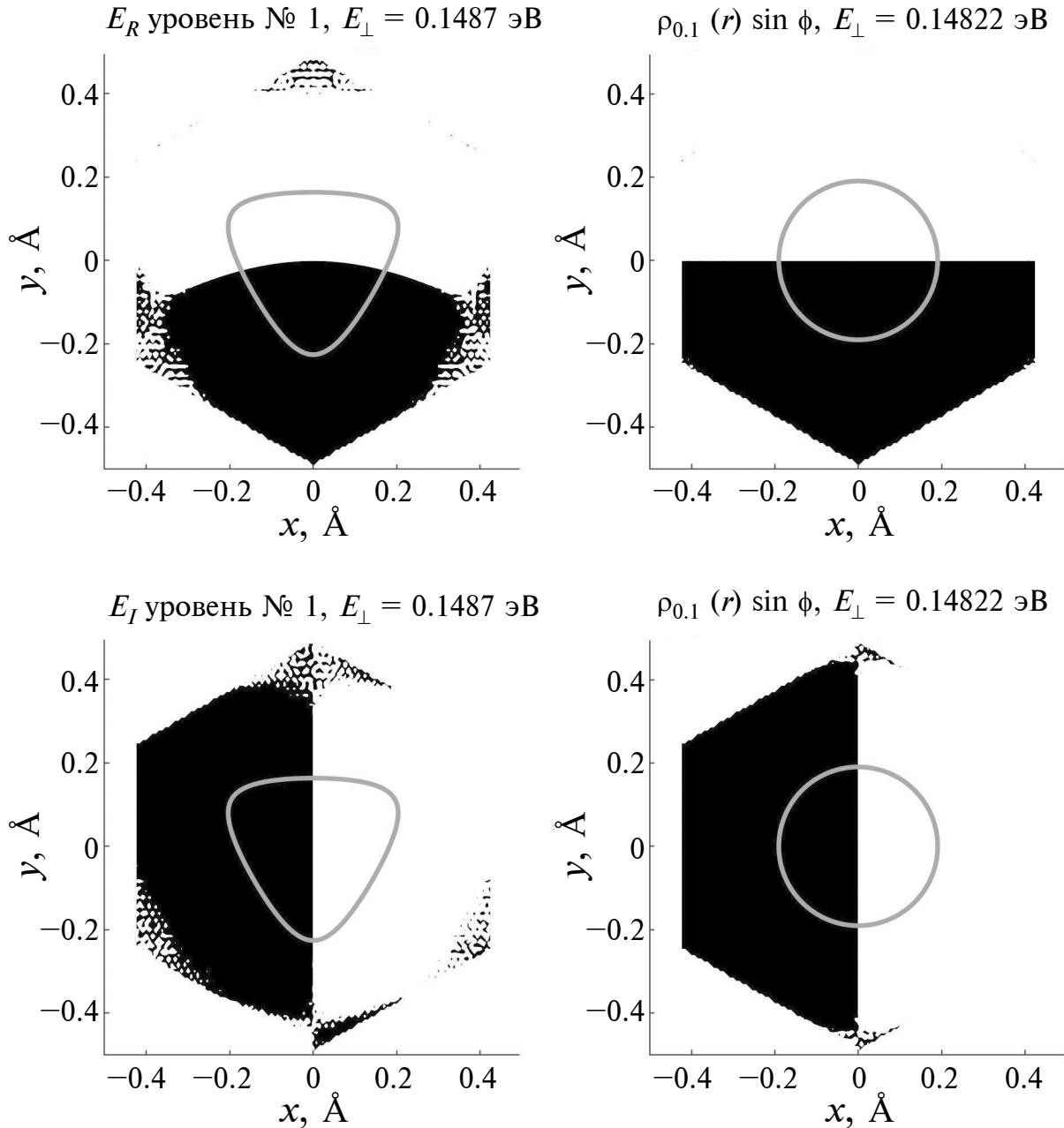


Рис. 3. Сравнение волновых функций состояний с $E_{\perp} = 0.1487$ эВ в потенциальной яме (1) и волновых функций состояний с $E_{\perp} = 0.14822$ эВ в потенциальной яме (8). Линиями отмечены классические границы движения $U(x, y) = E_{\perp}$. Нерегулярность черных и белых областей вдали от центра потенциальной ямы обусловлена погрешностями численного моделирования.

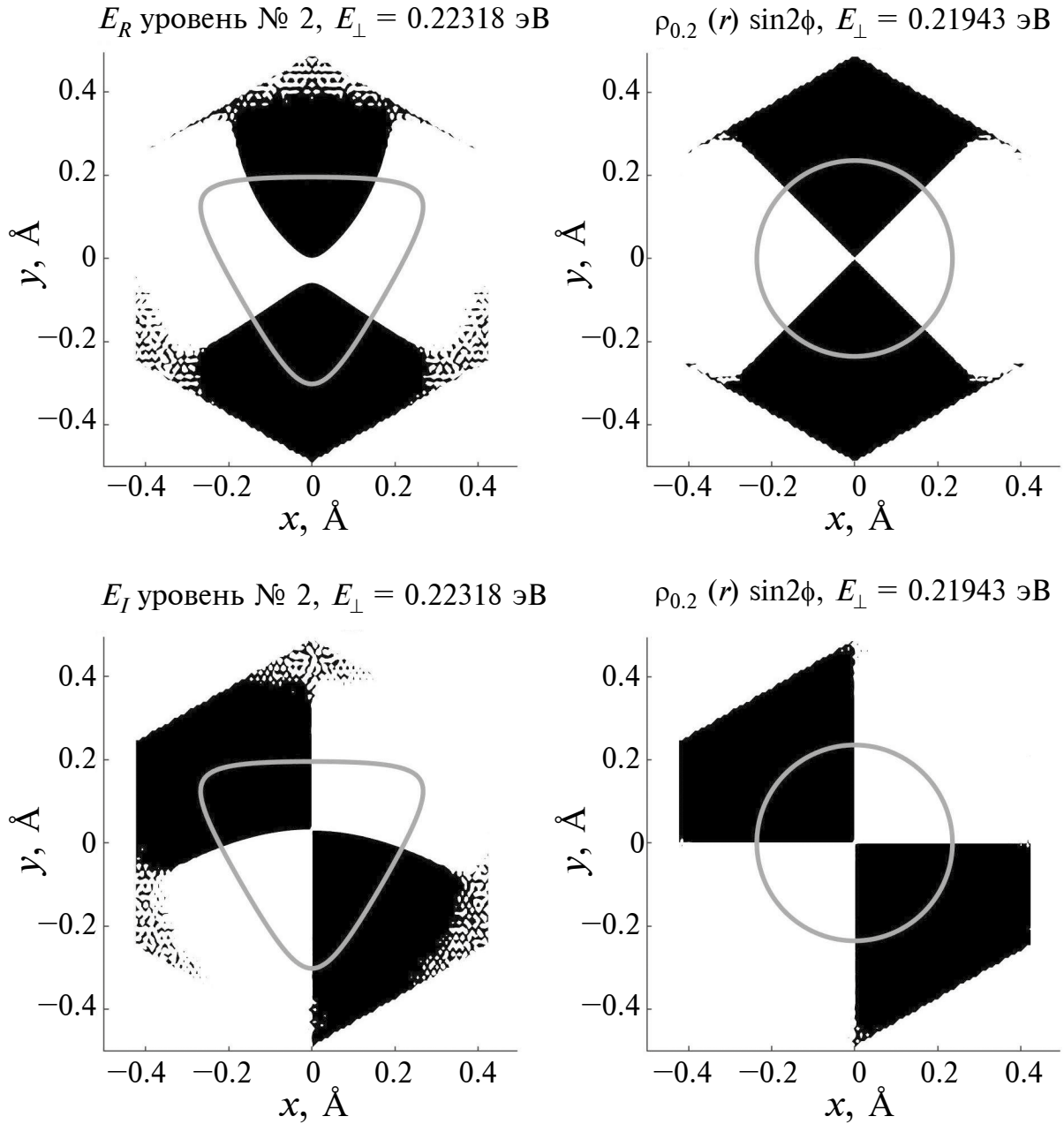


Рис. 4. То же, что и на рис. 3, для состояний с $E_{\perp} = 0.22318$ эВ в потенциальной яме (1) и волновых функций состояний с $E_{\perp} = 0.21943$ эВ в потенциальной яме (8).

тию вырождения состояний, обладающих $|m|$, кратным трем, и сохранять вырождение в остальных случаях. Сопоставление волновых функций потенциала (1) с волновыми функциями в аксиально-симметричной потенциальной яме (8) иллюстрирует этот вывод: пара вырожденных состояний с $n_r = 0$, $|m| = 1$ под влиянием возмущения переходит в пару также вырожденных наинизших состояний, относящихся к типу симметрии E (рис. 3), пара состояний с $n_r = 0$, $|m| = 2$ переходит

во вторую пару состояний типа E (рис. 4), а пара состояний с $n_r = 1$, $|m| = 1$ — в третью пару состояний типа E (рис. 5). Напротив, пара состояний с $n_r = 0$, $|m| = 3$ расщепляется под действием возмущения на два невырожденных состояния: третье состояние типа A_1 и первое (и единственное для $E_{\parallel} = 6$ ГэВ) состояние типа A_2 (рис. 6).

Линии узлов волновых функций рис. 3–6 позволяют проследить родство обсуждаемых состояний в потенциальных ямах (8) и (1). Кроме того,

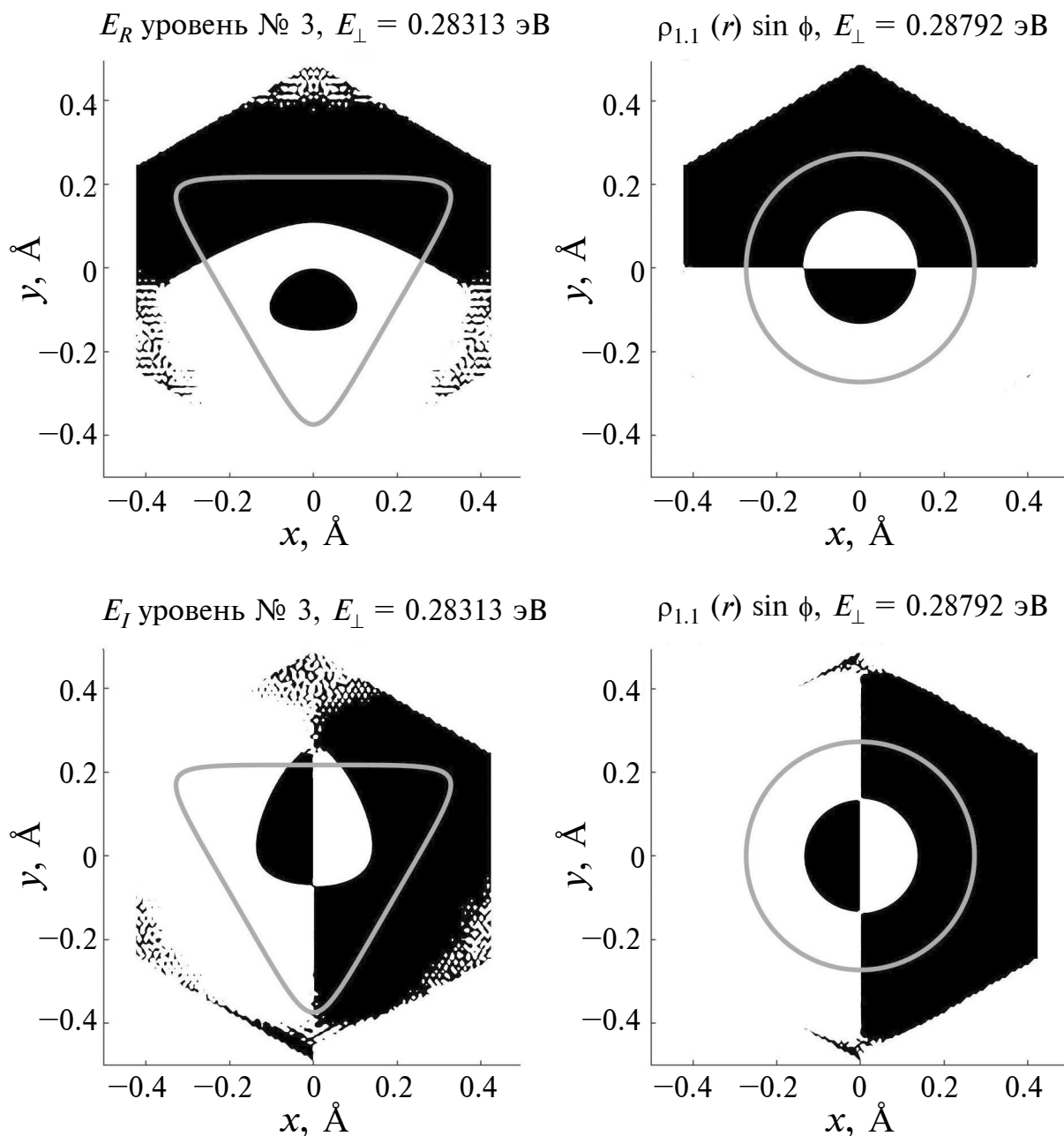


Рис. 5. То же, что и на рис. 3, для состояний с $E_\perp = 0.28313$ эВ в потенциальной яме (1) и волновых функций состояний с $E_\perp = 0.28792$ эВ в потенциальной яме (8).

в характере линий узлов волновых функций в потенциальной яме (1) проявляется важное отличие от интегрируемого потенциала (8). Как показывает исследование с помощью сечений Пуанкаре [2, 28], в верхней части потенциала (1) второй интеграл движения отсутствует для подавляющей части начальных условий, что делает уравнение движения в потенциальной яме (1) неинтегрируемым (в отличие от аксиально-симметричного потенциала (8)), а само движение — хаотическим. Одно из проявлений динамического хаоса в квантовой

механике — как раз характер рисунка линий узлов волновой функции: в регулярном (интегрируемом) случае эти линии пересекаются, образуя узор типа шахматной доски, а в неинтегрируемом (хаотическом) — избегают пересечений [8, 9, 17, 19]. Примеры такого избегания видны на левых верхних графиках рис. 4–6.

Наиболее ярко, однако, эта особенность (как и прочие характерные черты квантового хаоса) проявляются в квазиклассической области зна-

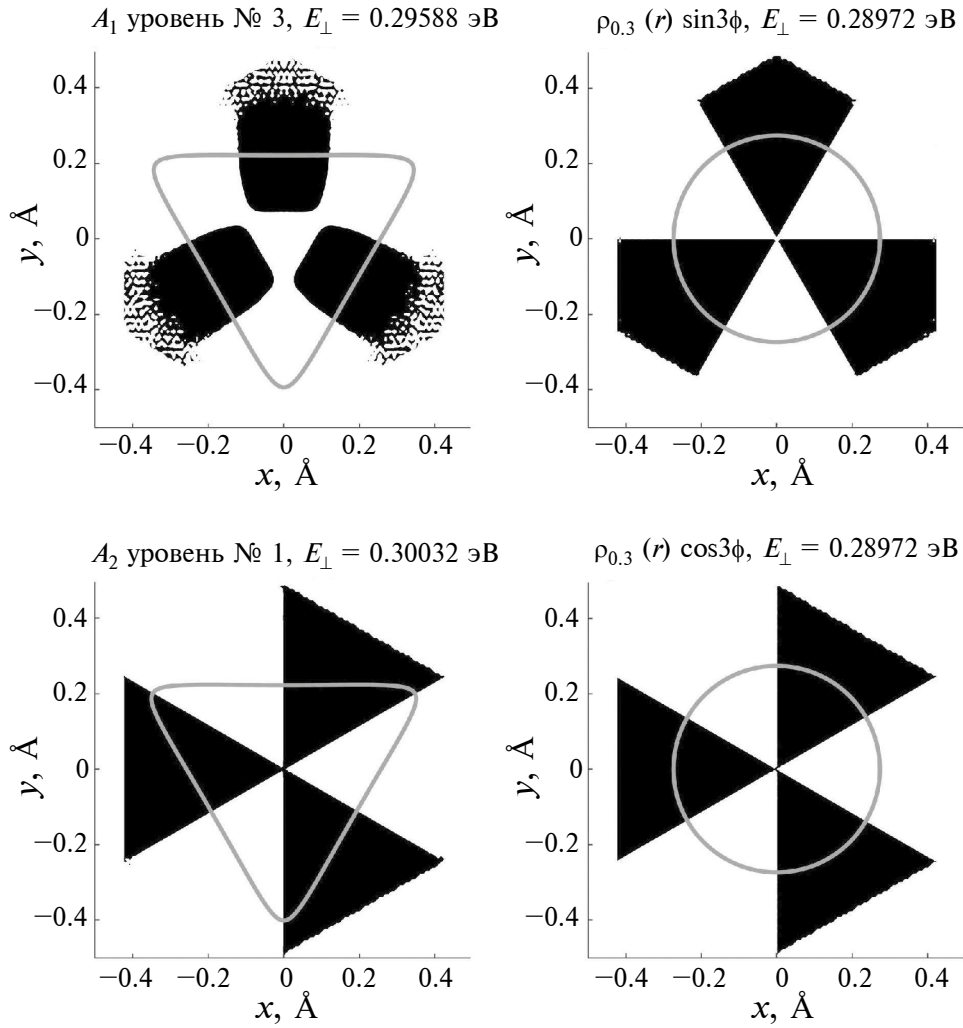


Рис. 6. То же, что и на рис. 3, для состояний с $E_{\perp} = 0.29588$ эВ и $E_{\perp} = 0.30032$ эВ в потенциальной яме (1) и волновых функций состояний с $E_{\perp} = 0.28972$ эВ в потенциальной яме (8).

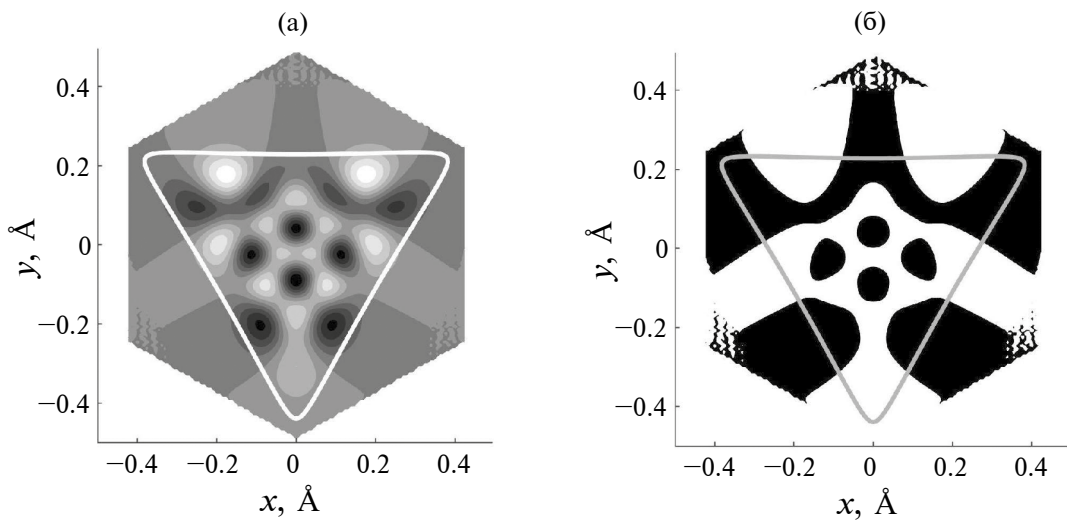


Рис. 7. Волновая функция состояния типа E_R для позитрона с энергией $E_{\parallel} = 20$ ГэВ в потенциальной яме (1), соответствующая $E_{\perp} = 0.31807$ эВ, (а) и график той же волновой функции, на котором области положительных значений закрашены белым, а отрицательных значений — черным (б).

чений параметров, где плотность уровней энергии велика и где в пределах потенциальной ямы укладывается много узлов и пучностей волновой функции. На рис. 7 представлен пример волновой функции стационарного состояния позитрона с энергией $E_{\parallel} = 20$ ГэВ в верхней части потенциальной ямы (1). Мы видим типичное для хаотической, неинтегрируемой системы отсутствие пересечений линий узлов.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В работе рассмотрено каналирование позитронов с энергией 5, 6 и 20 ГэВ вблизи направления [111] кристалла кремния. С помощью разработанного ранее алгоритма найдены все уровни энергии поперечного движения и соответствующие им собственные функции. Графики всех волновых функций позитронов с энергией 6 ГэВ представлены в настоящей работе, полные наборы графиков волновых функций поперечного движения для случаев 5 и 20 ГэВ будут опубликованы в [29].

Найденные волновые функции классифицированы по неприводимым представлениям группы C_{3v} , описывающей симметрию потенциальной ямы, в которой происходит поперечное движение каналированных позитронов. Продемонстрировано, каким образом возмущение, обладающее симметрией равностороннего треугольника, приводит к возникновению отличий данных волновых функций от волновых функций в аксиально-симметричной потенциальной яме. Показано, что в верхней части потенциальной ямы, где классическое движение частицы является неинтегрируемым для подавляющего большинства начальных условий, в структуре волновых функций появляются качественные особенности, отличающие их от волновых функций интегрируемых систем. Такие отличия наиболее заметны в случае позитронов с энергией 20 ГэВ, поскольку возросшая плотность уровней энергии делает справедливым квазиклассическое приближение, в котором и проявляются эффекты квантового хаоса.

КОНФЛИКТ ИНТЕРЕСОВ

Авторы заявляют, что у них нет конфликта интересов.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Ахиезер А.И., Шульга Н.Ф. Электродинамика высоких энергий в веществе. М.: Наука, 1993. 344 с.
2. 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/UFNr.0165.199510c.1165>
3. Gemmel D.S. // Rev. Mod. Phys. 1974. V. 46. P. 129.
<https://doi.org/10.1103/RevModPhys.46.129>
4. Uggerhøj U.I. // Rev. Mod. Phys. 2005. V. 77. P. 1131.
<https://doi.org/10.1103/RevModPhys.77.1131>
5. Lindhard J. // Kongel. Dan. Vidensk. Selsk., Mat.-Fys. Medd. 1965. V. 34 (14). P. 1.
6. 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>
7. Shul'ga N.F., Syshchenko V.V., Tarnovsky A.I., Isupov A.Yu. // Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. B. 2016. V. 370. P. 1.
<https://doi.org/10.1016/j.nimb.2015.12.040>
8. Shul'ga N.F., Syshchenko V.V., Tarnovsky A.I., Isupov A.Yu. // J. Phys.: Conf. Ser. 2016. V. 732. P. 012028.
<https://doi.org/10.1088/1742-6596/732/1/012028>
9. Шульга Н.Ф., Сыщенко В.В., Тарновский А.И., Исупов А.Ю. // Поверхность. Рентген., синхротр. и нейтрон. исслед. 2016. № 4. С. 103.
<https://doi.org/10.7868/S0207352816040168>
10. Сыщенко В.В., Тарновский А.И. // Поверхность. Рентген., синхротр. и нейтрон. исслед. 2021. № 7. С. 84.
<https://doi.org/10.31857/S1028096021070207>
11. 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>
12. Shul'ga N.F., Syshchenko V.V., Tarnovsky A.I., Dronik V.I., Isupov A.Yu. // J. Instrum. 2019. V. 14. P. C12022.
<https://doi.org/10.1088/1748-0221/14/12/C12022>
13. 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>
14. Сыщенко В.В., Тарновский А.И., Дроник В.И., Исупов А.Ю. // Поверхность. Рентген., синхротр. и нейтрон. исслед. 2023. № 6. С. 88.
<https://doi.org/10.31857/S1028096023060158>
15. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Теоретическая физика. Т. 3. Квантовая механика. Нерелятивистская теория. М.: Физматлит, 2016. 800 с.
16. Gutzwiller M.C. Chaos in Classical and Quantum Mechanics. Springer, 1990.
<https://doi.org/10.1007/978-1-4612-0983-6>
17. Штокман Х.-Ю. Квантовый хаос. М.: Физматлит, 2004. 376 с.
18. Райхл Л.Е. Переход к хаосу в консервативных классических и квантовых системах. М.—Ижевск: РХД, 2008. 756 с.
19. 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>
20. Hénon M., Heiles C. // Astronom. J. 1964. V. 69. P. 73.
<https://doi.org/10.1086/109234>
21. Davis M.J., Heller E.J. // J. Chem. Phys. 1981. V. 75. P. 246.
<https://doi.org/10.1063/1.441832>

22. Syshchenko V.V., Tarnovsky A.I., Parakhin A.S., Isupov A.Yu. // J. Surf. Invest.: X-ray, Synchrotron Neutron Tech. 2024. V. 18. № 2. P. 274.
<https://doi.org/10.1134/S1027451024020186>
23. Feit M.D., Fleck J.A., Jr., Steiger A. // J. Comput. Phys. 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)
24. 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>
25. Shul'ga N.F., Syshchenko V.V., Neryabova V.S. // Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. B. 2013. V. 309. P. 153.
<https://doi.org/10.1016/j.nimb.2013.01.022>
26. Галицкий В.М., Карнаков Б.М., Коган В.И. Задачи по квантовой механике. М.: Наука, 1981. 648 с.
27. Шаниро Д.А. Представления групп и их применения в физике. Новосибирск: НГУ, 2005. 142 с.
28. Исупов А.Ю., Сыщенко В.В., Парахин А.С. // Прикладная математика & физика. 2023. Т. 55. № 1. С. 49.
<https://doi.org/10.52575/2687-0959-2023-55-1-49-56>
29. Исупов А.Ю., Сыщенко В.В., Тарновский А.И., Парахин А.С. // Прикладная математика & физика. 2024. Т. 56, № 4. С. 320.
<https://doi.org/10.52575/2687-0959-2024-56-4-320-327>

Wave Functions of Positrons Channeling in [111] Direction of a Silicon Crystal

V. V. Syshchenko^{1,*}, A. I. Tarnovsky², A. S. Parakhin¹, A. Yu. Isupov²

¹Belgorod State University, Belgorod, 308015 Russia

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

*e-mail: syshch@yandex.ru

For a positively charged particle, the repulsive uniform potentials of the three neighboring [111] chains of the silicon crystal form a small potential well with the symmetry of an equilateral triangle is described by the C_{3v} group. The motion of a quantum particle in such a well is of interest in terms of manifestations of quantum chaos. A previously developed procedure for numerically finding the energy levels and wave functions of stationary states, taking into account the symmetry of this problem, is used to study the transverse motion of the channeling positrons with energies of 5, 6 and 20 GeV. A classification of stationary states of transverse motion of a positron is given based on the theory of group representations. The wave functions of the stationary states in an axially symmetric potential well are also found, and it is shown how these functions are modified under the influence of a perturbation with the symmetry of an equilateral triangle. In the upper part of the triangular potential well, the classical motion is chaotic for the majority of initial conditions. The structure of the wave functions in this domain has the features predicted by the quantum chaos theory.

Keywords: channeling, silicon, numerical simulation, spectral method, hexagonal grid, triangular symmetry, quantum chaos.