

ОБЗОРЫ АКТУАЛЬНЫХ ПРОБЛЕМ

Динамика заряженных частиц высоких энергий в прямых и изогнутых кристаллах

А.И. Ахиезер, Н.Ф. Шульга, В.И. Трутень, А.А. Гриненко, В.В. Сыщенко

Исследуются проблемы динамики заряженных частиц высоких энергий в прямых и изогнутых кристаллах. Рассматриваются различные методы описания рассеяния частиц в кристаллах: борновское приближение, классическая электродинамика, эйконоальное приближение. Исследуемые проблемы относятся к теории нелинейных систем, в которых возможны как регулярный, так и хаотический режимы движения. Рассматриваются различные режимы движения при каналировании и при надбарьерном движении частиц в кристалле вдоль одной из кристаллографических осей. Особое внимание уделяется изучению движения частиц в изогнутом кристалле, который может быть использован для поворотов пучков частиц высоких энергий.

PACS numbers: 03.65.Pm, 03.80.+r, 05.45.+b, 65.80.Mk

Содержание

1. Введение (1165).
2. Рассеяние быстрых заряженных частиц на цепочках атомов кристалла (1166).
2.1. Рассеяние в борновском приближении. 2.2. Рассеяние в классической механике. 2.3. Рассеяние в эйконоальном приближении. 2.4. Движение заряженной частицы в поле, создаваемом совокупностью цепочек атомов кристалла.
3. Хаос в динамических системах (1172).
3.1. Движение в потенциале Хеннона–Хейлса. 3.2. Устойчивость движения. 3.3. Неустойчивость движения в случае многократного рассеяния от трех центров.
4. Регулярное и хаотическое движение быстрых заряженных частиц в кристаллах (1177).
4.1. Каналирование положительно заряженных частиц. 4.2. Аксиальное каналирование отрицательно заряженных частиц. 4.3. Явление динамического хаоса при надбарьерном движении частиц в кристалле. 4.4. Характер движения частиц при многократном рассеянии на цепочках атомов кристалла и возможности его описания.
5. Прохождение заряженных частиц высоких энергий через изогнутый кристалл (1184).
5.1. Отклонение положительно заряженных частиц при плоскостном каналировании в изогнутом кристалле. 5.2. Движение быстрых частиц в поле цепочек атомов изогнутого кристалла. 5.3. Моделирование прохождения заряженных частиц высоких энергий через изогнутый кристалл.

Заключение (1191).

Список литературы (1191).

1. Введение

Проблема взаимодействия быстрых заряженных частиц с кристаллами представляет значительный интерес с различных точек зрения. Прежде всего при прохождении частиц высоких энергий через кристалл проявляются когерентные и интерференционные эффекты, обусловленные взаимодействием частицы с различными атомами решетки, такие как дифракция рентгеновских лучей в кристаллах [1], брэгговское рассеяние [2], когерентное рассеяние, излучение релятивистских электронов и образование электронно-позитронных пар [3–6], радужное рассеяние [7, 8]. Благодаря таким явлениям вероятности процессов взаимодействия частицы с атомами решетки могут сильно возрастать по отношению к вероятностям аналогичных процессов, связанных с отдельными атомами. Этим проблемам посвящены многочисленные публикации (см., например, обзоры и монографии [9–16]).

Кристалл представляет собой уникальную систему с очень большими внутренними электрическими полями. Средние значения внутрикристаллических полей могут на несколько порядков быть выше существующих макроскопических внешних полей, создаваемых внешними источниками. При движении частиц в таких полях может возникнуть замечательное явление — каналирование, при котором частица движется в открытых каналах, образованных атомами, лежащими в кристаллических плоскостях либо находящимися вдоль кристаллографической оси¹. Движение в сильном неоднородном поле кристаллической решетки существенно нелинейное

А.И. Ахиезер, Н.Ф. Шульга, В.И. Трутень, А.А. Гриненко, В.В. Сыщенко. Национальный научный центр "Харьковский физико-технический институт", 310108 Харьков, ул. Академическая 1, Украина
Факс: (057) 235-17-38. E-mail: kfti@kfti.kharkov.ua

Статья поступила 20 января 1995 г.

¹ На это явление впервые обратил внимание Штарк в 1912 г. [17]. Существование открытых каналов было установлено много позже Робинсоном и Оэном [18] путем численного моделирования движения заряженной частицы в кристалле. Основы теории каналирования были развиты в фундаментальной работе Линдхарда [19]. (Каналированию посвящены обзоры и монографии [20–27].)

и может быть как регулярным, так и хаотическим. Казалось бы, любое движение частицы в кристалле, благодаря его периодической структуре, должно быть всегда регулярным. Между тем именно благодаря большой интенсивности поля и нелинейности в кристаллах наряду с регулярным может реализоваться хаотическое движение частицы [28–30]. Такая ситуация возможна как при каналировании, так и при его отсутствии [14, 31].

Квантовоэлектродинамические эффекты, возникающие при движении заряженной частицы в сильном кристаллическом поле, приобретают ряд интересных свойств. Вероятности таких процессов, как тормозное излучение и образование пар, сильно возрастают в области высокоэнергетических частиц (см., например, [14, 25, 32–36]). При описании таких эффектов необходимо учитывать отдачу при излучении и множественные процессы. При этом весьма специфично развивается электромагнитный ливень в кристалле [37, 38].

Возникает также проблема взаимодействия частиц высоких энергий с искривленным кристаллом. При наличии сильного внутрикристаллического поля искривление кристалла приводит к искривлению траектории частицы, в результате чего становится возможным поворот пучка движущихся частиц в кристалле. Это явление, на которое впервые было обращено внимание в работе Цыганова [39], может быть использовано для поворота пучков заряженных частиц высоких энергий, вывода частиц из циркулярных ускорителей, расщепления пучка на несколько пучков (см. обзоры [40–43]). Существенно, что с помощью кристаллов эти задачи могут быть решены в гораздо меньших пространственных областях, чем с помощью макроскопических внешних полей. Это связано с большими внутрикристаллическими полями.

Взаимодействие заряженной частицы высокой энергии с кристаллическими полями исследуется различными теоретическими методами, такими как борновская теория возмущений, квазиклассическое приближение, классическая электродинамика, при этом возникает вопрос об аппроксимации внутрикристаллического поля. В теории каналирования широко используется так называемое приближение непрерывной цепочки, в котором потенциал решетки усредняется по координате кристаллической оси, вблизи которой происходит движение.

Цель настоящего обзора — детальное исследование динамики заряженных частиц в непрерывном потенциале цепочек атомов кристалла и определение условий, при которых это движение будет регулярным и при которых оно будет хаотическим. Выясним также особенности динамики не только в прямых, но и в изогнутых кристаллах.

2. Рассеяние быстрых заряженных частиц на цепочках атомов кристалла

2.1. Рассеяние в борновском приближении

При движении заряженных частиц высоких энергий в кристалле под малым углом к одной из кристаллографических осей (оси z) проявляются корреляции между их последовательными соударениями с атомами решетки. Вследствие этих корреляций сечение рассеяния частицы в кристалле может существенно отличаться от сечения рассеяния в аморфной среде. Корреляции проявляются

уже при столкновениях частицы с атомами, образующими отдельную цепочку атомов, расположенных вдоль оси z . Поэтому рассмотрим вначале рассеяние на отдельной цепочке атомов кристалла при падении пучка под малым углом ψ к оси цепочки (рис. 1).

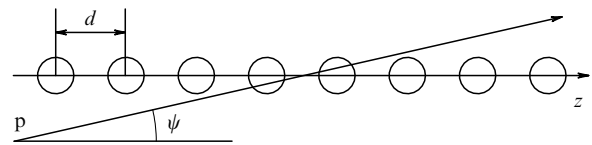


Рис. 1. Взаимодействие быстрой заряженной частицы с цепочкой атомов кристалла

Благодаря периодической структуре цепочки и обусловленной этим возможности интерференции амплитуд рассеяния при столкновениях частицы с различными атомами, рассеяние на цепочке может быть когерентным. Эффективность такого рассеяния, как мы увидим, определяется значением параметра [14]

$$\zeta^{(N)} = N_c \frac{Ze^2}{\hbar c}, \quad (2.1)$$

где $N_c \propto R/\psi a$ — число атомов цепочки, с которыми эффективно взаимодействует частица, пролетая через цепочку, Ze — заряд ядра отдельного атома, R — радиус экранировки потенциала атома, a — постоянная решетки (далее используется система единиц, в которой квантовая постоянная $\hbar$ и скорость света c приняты равными единице).

Параметр $\zeta^{(N)}$ может быть как малым, так и большим по сравнению с единицей. В зависимости от значения параметра для описания рассеяния необходимо пользоваться различными методами. Если $\zeta^{(N)} \ll 1$, то применимо борновское приближение; если $\zeta^{(N)} \gg 1$, то можно пользоваться приближением классической механики. И, наконец, в промежуточном случае применимо эйкональное приближение. Рассмотрим все три приближения и начнем с борновского.

В первом борновском приближении сечение рассеяния определяется квадратом модуля матричного элемента энергии взаимодействия частицы с внешним полем, который пропорционален фурье-компоненте энергии взаимодействия U_q . Интересуясь в дальнейшем высокими энергиями и малыми углами рассеяния, можно не учитывать спинорной структуры матричного элемента. Дифференциальное сечение рассеяния в этом случае определяется формулой [14, 44]

$$d\sigma = \frac{\varepsilon^2}{4\pi^2} |U_q|^2 d\Omega, \quad (2.2)$$

где $d\Omega$ — элемент телесного угла в направлении рассеяния, ε — энергия частицы, $\mathbf{q} = \mathbf{p} - \mathbf{p}'$ — импульс, переданный внешнему полю, $\mathbf{p}$ и $\mathbf{p}'$ — импульсы частицы до и после рассеяния.

При рассеянии на цепочке атомов энергия взаимодействия частицы с цепочкой $U(\mathbf{r})$ представляет собой сумму энергий взаимодействия с ее отдельными атомами $u(\mathbf{r} - \mathbf{r}_n)$:

$$U(\mathbf{r}) = \sum_{n=1}^N u(\mathbf{r} - \mathbf{r}_n), \quad (2.3)$$

где $\mathbf{r}_n$ — координата положения атома в цепочке. Здесь $\mathbf{r}_n = \mathbf{r}_n^0 + \mathbf{u}_n$, $\mathbf{r}_n^0$ — координата равновесного положения атома в цепочке (предполагается, что атомы расположены вдоль оси z на равных расстояниях d друг от друга (см. рис. 1)) и $\mathbf{u}_n$ — тепловое смещение каждого атома. Квадрат модуля фурье-компоненты потенциала (2.3) имеет вид

$$|U_q|^2 = \sum_{n,m=1}^N \exp[i\mathbf{q}(\mathbf{r}_n - \mathbf{r}_m)] |u_q|^2. \quad (2.4)$$

Выполняя усреднение этого выражения по тепловым колебаниям атомов (процедура такого усреднения описана, например, в [9, 12]) и учитывая, что при больших значениях N

$$\left| \sum_{n=1}^N \exp(iq_z d n) \right|^2 = N \frac{2\pi}{d} \sum_{g_z} \delta(q_z - g_z),$$

находим

$$\langle |U_q|^2 \rangle = N \left\{ \frac{2\pi}{d} \sum_{g_z} \delta(q_z - g_z) \exp(-\mathbf{q}^2 \overline{u^2}) + [1 - \exp(-\mathbf{q}^2 \overline{u^2})] \right\} |u_q|^2, \quad (2.5)$$

где $\overline{u^2}$ — средний квадрат теплового смещения атома в цепочке, $\delta(q_z)$ — дельта-функция и $g_z = 2\pi n_z/d$ — компонента вектора обратной решетки ($n_z = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$). При этом сечение рассеяния (2.2) можно представить в виде

$$d\sigma = d\sigma_{\text{coh}} + d\sigma_n, \quad (2.6)$$

где $d\sigma_{\text{coh}}$ и $d\sigma_n$ — сечения когерентного и некогерентного рассеяния:

$$d\sigma_{\text{coh}} = N \frac{2\pi}{d} \sum_{g_z} \delta(q_z - g_z) \exp(-\mathbf{q}^2 \overline{u^2}) d\sigma_1(q), \quad (2.7)$$

$$d\sigma_n = N [1 - \exp(-\mathbf{q}^2 \overline{u^2})] d\sigma_1(q). \quad (2.8)$$

Здесь $d\sigma_1(q)$ — сечение рассеяния частицы в поле отдельного атома цепочки. В случае, когда потенциал отдельного атома представляет собой экранированный потенциал Кулона

$$u(r) = (Ze|e|r^{-1}) \exp\left(-\frac{r}{R}\right), \quad (2.9)$$

сечение $d\sigma_1$ имеет вид

$$d\sigma_1 = \frac{4Z^2 e^4 \varepsilon^2}{(\mathbf{q}^2 + R^{-2})^2} d\omega. \quad (2.10)$$

Величина $d\sigma_n$ не зависит от ориентации цепочки относительно импульса падающей частицы и определяет некогерентное рассеяние, которое только фактором $[1 - \exp(-\mathbf{q}^2 \overline{u^2})]$ отличается от соответствующего сечения в аморфной среде. Сечение когерентного рассеяния $d\sigma_{\text{coh}}$ существенно зависит от ориентации цепочки атомов относительно импульса падающей частицы. Рассмотрим более подробно это слагаемое.

Из законов сохранения энергии и импульса при рассеянии $\varepsilon = \varepsilon'$, $\mathbf{p} = \mathbf{p}' + \mathbf{q}$, находим, что $2pq_{\parallel} = \mathbf{q}^2$, где

$q_{\parallel}$ — компонента $\mathbf{q}$, параллельная p . При малых углах падения частицы на цепочку ($\psi \ll 1$) это соотношение принимает вид

$$2p(q_z + \psi q_x) \approx q_z^2 + q_x^2 + q_y^2, \quad (2.11)$$

где ось x направлена вдоль проекции импульса падающей частицы $\mathbf{p}$ на плоскость (x, y) , ортогональную оси цепочки z . Формула (2.11) фактически определяет связь между компонентами вектора $\mathbf{q}$. Для малых углов рассеяния имеем

$$q_z \approx -\psi q_x + \frac{q_y^2}{2p}. \quad (2.11a)$$

Учитывая, что для малых углов рассеяния $d\omega \approx dq_x dq_y p^{-2}$, находим

$$d\sigma_{\text{coh}} = N \sum_n \delta\left(\psi q_x - \frac{q_y^2}{2p} - \frac{2\pi}{d} n\right) \times \times \frac{dq_x dq_y}{2\pi d p^2} \varepsilon^2 |u_q|^2 \exp(-\mathbf{q}^2 \overline{u^2}). \quad (2.12)$$

Основной вклад в это сечение вносит слагаемое с $n = 0$. Действительно, при $n = 0$ $q_x \approx q_y^2/2p\psi$, тогда как при $n = 1$ $q_x \approx 2\pi/d\psi \gg q_y^2/2p\psi$. Так как u_q и $\exp(-\mathbf{q}^2 \overline{u^2})$ быстро убывают с ростом q , вклад слагаемых с $n \neq 0$ в сечение рассеяния мал. В результате после интегрирования по q_x получим

$$d\sigma_{\text{coh}} = N \frac{dq_y}{2\pi d \psi} \frac{\varepsilon^2}{p^2} |u_q|^2 \exp(-q^2 \overline{u^2}), \quad q_x \approx \frac{q_y^2}{2p\psi}. \quad (2.13)$$

Сечение (2.13) быстро растет с уменьшением ψ . Это обусловлено когерентным механизмом рассеяния частицы на $N_c \propto R/\psi d$ атомах цепочки. Чтобы показать это, заметим, что сечение (2.13) можно представить в виде

$$d\sigma_{\text{coh}} \propto N N_c d\sigma_1 \propto M_c N_c^2 d\sigma_1, \quad (2.14)$$

где $d\sigma_1$ — сечение рассеяния на одном атоме, проинтегрированное по q_x , и $M_c \propto N/N_c$.

Мы видим, что сечение $d\sigma_{\text{coh}}$ пропорционально N_c^2 , т.е. квадрату числа атомов в цепочке, с которыми эффективно взаимодействует частица, проходя через цепочку [14]. В этом и проявляется когерентный характер рассеяния частиц на цепочке. Обратим внимание, что в формулу (2.14) входит квадрат не полного числа атомов цепочки N , а только величины N_c , т.е. когерентность в рассеянии имеет место по отношению не ко всем N атомам цепочки, а только к части атомов N_c , которая определяется углом падения частицы на цепочку: $N_c \propto R/\psi d$. Иными словами, в когерентный процесс рассеяния вовлекаются не все атомы цепочки, а только их часть N_c ($N_c \ll N$). С уменьшением угла ψ число N_c растет. Однако угол ψ нельзя считать равным нулю, так как в этом случае теряет смысл борновское приближение (см. ниже).

В формулу (2.14) входит еще число M_c , которое пропорционально отношению полного числа атомов цепочки N к N_c . Наличие этого множителя можно интерпретировать следующим образом. Если разбить всю цепочку атомов на M_c блоков, каждый из которых

содержит N_c атомов, то отдельные блоки при рассеянии не будут интерферировать между собой, т.е. не будут приводить к когерентному эффекту в рассеянии, и, следовательно, сечение рассеяния должно быть пропорционально числу этих блоков M_c (но не квадрату этого числа!).

Разъясним теперь условия применимости используемого борновского приближения. Как известно [44], при рассеянии на отдельном атоме борновским приближением можно пользоваться, если $Ze^2/\hbar c \ll 1$. При этом Z представляет собой заряд рассеивающего центра (в единицах $|e|$). Если рассеяние происходит когерентно на сложной системе, например на цепочке N_c атомов, то, очевидно, под зарядом рассеивающего центра нужно понимать величину $N_c Z$. Поэтому борновское приближение для когерентного рассеяния будет справедливо, если $N_c Ze^2/\hbar c \ll 1$. Величина $\zeta^{(N)} = N_c Ze^2/\hbar c$ и есть тот параметр, о котором упоминалось выше.

Обсудим, наконец, тот факт, что основной вклад в сечение рассеяния на цепочке атомов на малые углы вносят фурье-компоненты потенциальной энергии с $g_z = 0$. Это означает, что для рассеяния не существенна неоднородность потенциала вдоль оси цепочки и рассеяние определяется, в основном, непрерывным потенциалом цепочки — потенциалом цепочки, усредненным по координате z :

$$U_R(x, y) = \frac{1}{Nd} \int_{-\infty}^{\infty} dz \sum_{n=1}^N u(\mathbf{r} - \mathbf{r}_n). \quad (2.15)$$

Если этот потенциал подставим в (2.2), то получим сечение когерентного рассеяния (2.13).

Понятие непрерывного потенциала впервые было введено при описании каналирования быстрых частиц в кристалле [19]. Это явление заключается в том, что частица движется в каналах, образованных цепочками атомов кристалла или кристаллическими плоскостями атомов, периодически отклоняясь относительно оси канала на малые углы. Такое движение частиц в кристалле возможно, если угол ψ между импульсом частицы и осью канала не превышает некоторого определенного угла $\psi_c = \sqrt{4Ze^2/\epsilon d}$, который называется критическим углом осевого каналирования.

Понятием непрерывного потенциала можно пользоваться и при исследовании рассеяния частиц на цепочке атомов при малых значениях угла ψ , когда выполняется условие применимости борновского приближения $RZe^2/\psi d \hbar c \ll 1$. Заметим, что это условие отличается от условия каналирования $\psi \lesssim \psi_c$.

Обратим внимание на то обстоятельство, что угол каналирования естественным образом возникает в высших порядках теории возмущений при исследовании рассеяния быстрых заряженных частиц на цепочке атомов кристалла. В частности, этот угол входит в сечение рассеяния во втором борновском приближении, которое должно давать малый вклад по сравнению с сечением рассеяния в первом борновском приближении.

Действительно, с учетом второго борновского приближения сечение рассеяния быстрой частицы на цепочке атомов кристалла имеет следующий вид [45]:

$$d\sigma = N \frac{8\pi Z^2 e^4 dq_y}{\psi d(q_y^2 + R^{-2})^2} \left[1 + \frac{e}{|e|} \frac{\psi_c^2}{\psi^2} \eta(Rq_y) \right], \quad (2.16)$$

где безразмерный коэффициент η зависит от переданного импульса q_y : $\eta \sim 1$, если $Rq_y \sim 1$, и $\eta \approx 2 \ln(Rq_y)$, если $Rq_y \gg 1$. Формула (2.16) получена в предположении, что потенциал отдельного атома цепочки представляет собой экранированный потенциал Кулона.

Мы видим, что относительный вклад второго борновского приближения зависит от отношения $(\psi_c/\psi)^2$. Этот вклад мал, если $\psi^2 \gg \psi_c^2$. Последнее условие должно быть добавлено к рассмотренному выше $\zeta^{(N)} \ll 1$. Неравенство $\psi^2 \gg \psi_c^2$ автоматически выполняется при достаточно больших значениях энергии частиц, так что при больших энергиях применимость борновского приближения определяется условием $\zeta^{(N)} \ll 1$, которое от энергии частицы не зависит. Последнее неравенство физически означает малость амплитуды рассеянной волны по сравнению с амплитудой падающей волны. Хотя второе борновское приближение при высоких энергиях и приводит к малым эффектам, тем не менее оно может играть важную роль, если мы интересуемся зависимостью сечения рассеяния от знака заряда частицы. В первом борновском приближении такая зависимость отсутствует, во втором же частицы с разными знаками заряда рассеиваются по-разному.

2.2. Рассеяние в классической механике

Мы видели, что для описания рассеяния быстрых заряженных частиц на цепочке атомов кристалла можно использовать борновское приближение, если параметр $\zeta^{(N)} = N_c Ze^2/\hbar c$ мал по сравнению с единицей. Если этот параметр порядка единицы или больше, то пользоваться квантовомеханической теорией возмущений нельзя, и тогда задача рассеяния в квантовой механике должна решаться точно. Если параметр $\zeta^{(N)}$ велик по сравнению с единицей, то это формально соответствует предельному переходу $\hbar \rightarrow 0$ (большое значение параметра $\zeta^{(N)}$ достигается за счет малости угла ψ между импульсом частицы и осью цепочки). Такой переход означает переход от квантовой механики к классической, поэтому естественно рассматривать рассеяние в случае $\zeta^{(N)} \gg 1$ в рамках классической теории рассеяния. Если параметр $\zeta^{(N)}$ невелик по сравнению с единицей, т.е. если рассматривается промежуточный случай, то может быть развита теория рассеяния для быстрых частиц (см. раздел 2.3).

В классической электродинамике движение релятивистской заряженной частицы во внешнем поле $U(\mathbf{r})$ определяется уравнением [46]

$$\frac{d\mathbf{p}}{dt} = -\vec{\nabla} U(\mathbf{r}), \quad (2.17)$$

где $\mathbf{p}(t)$ — импульс частицы: $\mathbf{p} = m\mathbf{v}(1 - v^2/c^2)^{-1/2}$, $\mathbf{v} = \mathbf{p}/\epsilon$.

В рассматриваемой задаче рассеяния частицы на цепочке атомов под $U(\mathbf{r})$ следует понимать сумму потенциальных энергий взаимодействия частицы с отдельными атомами цепочки (2.3). Нас интересует рассеяние в том случае, когда энергия частицы ϵ достаточно велика, а угол ψ между импульсом $\mathbf{p}$ и осью цепочки достаточно мал. В этих условиях изменение прицельного параметра между последовательными столкновениями частицы с атомами цепочки мало по сравнению с самим прицельным параметром b . По этой причине движение частицы в поле цепочки атомов происходит так, как если бы имелся некоторый эффективный непрерывный потенциал (2.15), представляющий собой потенциал цепочки

атомов, усредненный по координате z оси цепочки. Таким образом, эффективный потенциал $U_R(x, y)$ является функцией только двух координат x и y , перпендикулярных оси цепочки. В простейшем случае $U_R(x, y)$ можно считать обладающим цилиндрической симметрией вдоль оси z , и мы приходим к задаче о движении частицы в поле, обладающем цилиндрической симметрией (рис. 2). В таком поле, очевидно, сохраняется составляющая импульса частицы p_z вдоль оси цепочки: $p_z = \text{const}$. При этом движение в поперечной плоскости согласно (2.17) определяется уравнением

$$\ddot{\mathbf{p}} = -\frac{1}{\varepsilon_{||}} \frac{\partial}{\partial \mathbf{p}} U_R(x, y), \quad (2.18)$$

где $\mathbf{p} = (x, y)$, ρ — расстояние частицы до оси цепочки, $\varepsilon_{||} = (\rho^2 + m^2)^{1/2}$, $\varepsilon_{||} \approx \varepsilon$.

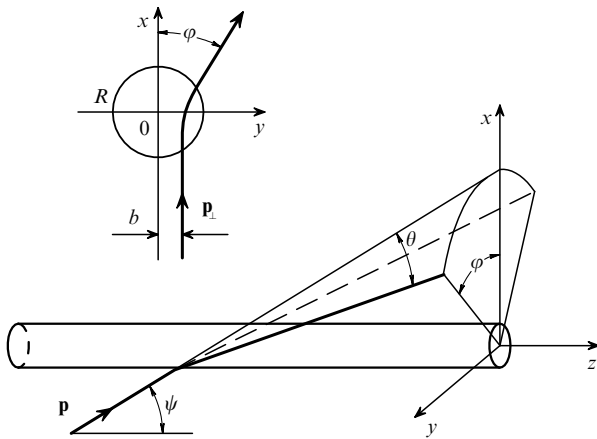


Рис. 2. Рассеяние быстрой частицы в поле непрерывного потенциала отдельной цепочки атомов

Так как функция $U_R(\rho)$ обладает цилиндрической симметрией, уравнение (2.18) имеет два интеграла движения, которыми являются энергия поперечного движения

$$\varepsilon_{\perp} = \frac{1}{2} \varepsilon \dot{\mathbf{p}}^2 + U_R(\rho) \quad (2.19)$$

и момент

$$M = \varepsilon \rho^2 \dot{\varphi}(t), \quad (2.20)$$

где $\varphi(t)$ — азимутальный угол рассеяния в поперечной плоскости (см. рис. 2). На больших расстояниях от цепочки атомов, где $U_R = 0$, интеграл энергии поперечного движения $\varepsilon_{\perp} = (1/2) \varepsilon \dot{\psi}^2$.

Используя эти интегралы движения, можно определить азимутальный угол рассеяния частицы цепочкой $\varphi(b)$ как функцию прицельного параметра цепочки [14]:

$$\varphi(b) = \pi - 2b \int_{\rho_0}^{\infty} \frac{d\rho}{\rho^2} \left[1 - \frac{U_R(\rho)}{\varepsilon_{\perp}} - \frac{b^2}{\rho^2} \right]^{-1/2}, \quad (2.21)$$

где ρ_0 — расстояние наибольшего сближения частицы с осью цепочки атомов. При выводе (2.21) использовано соотношение $M = \rho \psi b$, связывающее момент M с при-

цельным параметром цепочки. Входящая в это соотношение величина $\rho \psi$ представляет собой проекцию импульса падающей частицы на плоскость (x, y) .

Полный угол рассеяния частицы цепочкой определяется соотношением

$$\theta(b) = 2\psi \sin\left(\frac{1}{2} \varphi(b)\right). \quad (2.22)$$

Функция $\varphi(b)$ в классической теории рассеяния называется функцией отклонения частицы во внешнем поле.

Дифференциальное сечение рассеяния частицы цепочкой атомов определяется соотношением

$$d\sigma = L\psi db, \quad (2.23)$$

где $L\psi$ — проекция длины цепочки на плоскость, ортогональную импульсу падающей частицы, b — прицельный параметр цепочки, представляющий собой наименьшее расстояние между частицей и осью цепочки в том случае, если бы не было рассеяния (см. рис. 2).

Величину db согласно (2.21) можно выразить через азимутальный угол рассеяния, поэтому

$$d\sigma = L\psi \sum_n \frac{d\varphi}{|d\varphi(b)/db|_n}. \quad (2.24)$$

Здесь учтено, что функция $b(\varphi)$, обратная функции отклонения $\varphi = \varphi(b)$, вообще говоря, неоднозначно зависит от угла рассеяния [14, 47, 48]. Суммирование по n в (2.24) соответствует суммированию по однозначным ветвям функции отклонения $\varphi(b)$.

Полученные формулы показывают, что рассеяние быстрой заряженной частицы в поле непрерывного потенциала цепочки атомов кристалла возможно только вдоль азимутального угла φ в плоскости, ортогональной оси цепочки.

Входящая в (2.21) величина $U_R/\varepsilon_{\perp}$ представляет собой по порядку величины отношение квадрата критического угла осевого каналирования к квадрату угла падения частицы на цепочку: $U_R/\varepsilon_{\perp} \approx (\psi_c/\psi)^2$. Малым значениям этого параметра согласно (2.21) соответствуют малые значения азимутального угла рассеяния

$$\varphi(b) \approx \frac{1}{2\varepsilon_{\perp}} \frac{d}{db} \int_{-\infty}^{\infty} dx U_R(\sqrt{x^2 + b^2}). \quad (2.25)$$

При этом траектория частицы в поле цепочки атомов близка к прямолинейной. Такой случай соответствует движению в условиях, далеких от условий возникновения осевого каналирования.

При $\psi \gg \psi_c$ согласно (2.25) величина $|\varphi(b)|$ не зависит от знака заряда частицы и быстро растет с уменьшением ψ . Учет в функции отклонения (2.21) следующего члена разложения по параметру $U_R/\varepsilon_{\perp}$ приводит к зависимости $|\varphi(b)|$ от знака заряда частицы. Таким образом, с уменьшением ψ быстро увеличивается зависимость функции отклонения от знака заряда частицы.

Формула (2.21) справедлива не только при $\psi \gg \psi_c$, но и при $\psi \lesssim \psi_c$. В последнем случае невозможно разложение по параметру $U_R/\varepsilon_{\perp}$ и для определения функции отклонения и сечения рассеяния требуется численное интегрирование соотношения (2.21). Функции отклонения и

сечения рассеяния для некоторых непрерывных потенциалов цепочки атомов представлены в [14], поэтому здесь не будем подробно останавливаться на этих результатах. Отметим только, что при $\psi \lesssim \psi_c$ функции отклонения и сечения рассеяния на цепочке атомов частиц, обладающих зарядами различных знаков, весьма существенно различаются и типичные виды функций $U_R(\rho)$ таковы, что функции отклонения частиц в таком поле являются двузначными функциями прицельного параметра. Иными словами, в этом случае возможно радужное рассеяние частиц [49, 50].

2.3. Рассеяние в эйкональном приближении

Рассмотрим рассеяние заряженных частиц высоких энергий на цепочке атомов кристалла в промежуточном случае, когда параметр $\zeta^{(N)} \sim 1$. Для этого обсудим, как происходит переход от борновского приближения к приближению, даваемому классической механикой. В интересующем нас случае высоких энергий такой переход может быть исследован на основе квазиклассического приближения квантовой механики, аналогичного приближению геометрической оптики, которое справедливо, если длина волны мала и мало меняется на протяжении длины волны. Интересуясь рассеянием на малые углы ($\theta \ll \psi$), при $\psi \gg \psi_c$ можно разложить амплитуду рассеяния по обратным степеням энергии частицы. Движение при этом будет происходить по траектории, близкой к прямолинейной. Таким образом, мы приходим к эйкональному приближению, амплитуда рассеяния в котором определяется формулой [14, 48]

$$a(\mathbf{q}) = \frac{ip}{2\pi\hbar} \int d^2\rho \exp\left(\frac{i}{\hbar} \mathbf{q}\rho\right) \left\{ \exp\left[\frac{i}{\hbar} \chi(\rho)\right] - 1 \right\} \quad (2.26)$$

и сечение рассеяния равно

$$d\sigma = |a(\mathbf{q})|^2 d\omega, \quad (2.27)$$

где $d\omega$ — элемент телесного угла в направлении рассеяния, ρ — радиус-вектор в плоскости, ортогональной импульсу $\mathbf{p}$ падающей частицы, и

$$\chi(\rho) = -\frac{1}{v} \int_{-\infty}^{\infty} dl U(\mathbf{r}). \quad (2.28)$$

Интегрирование по l в (2.28) ведется вдоль пути, проходимого частицей в поле $U(\mathbf{r})$; $v = p/\varepsilon$.

Формула (2.26) справедлива, если движение частицы во внешнем поле близко к прямолинейному. При этом формулы (2.26) и (2.27) допускают предельный переход в область применимости как борновского приближения ($|\chi| \ll \hbar$), так и классической теории рассеяния ($|\chi| \gg \hbar$). Таким образом, эти формулы можно рассматривать как промежуточные между формулами для сечения рассеяния в борновском приближении и в классической теории рассеяния.

Мы видели, что и в борновском приближении, и в приближении, даваемом классической механикой, рассеяние быстрой заряженной частицы в поле цепочки атомов кристалла при малых углах ψ падения на цепочку определяется в основном непрерывным потенциалом цепочки (2.15). Этим выражением для потенциала можно пользоваться и в рассматриваемом промежуточном случае и с его помощью вычислить входя-

щую в (2.26) величину χ :

$$\chi = \chi(y) = -\frac{1}{\psi v} \int_{-\infty}^{\infty} dx U_R(x, y). \quad (2.29)$$

При этом интегрирование по l в (2.28) заменили интегрированием по x : $dl = dx/\psi$. Учитывая, что $\chi(y)$ — функция только координаты y , находим

$$a(\mathbf{q}) = ip\delta(q_x) \int_{-\infty}^{\infty} dy \exp\left(\frac{i}{\hbar} q_y y\right) \left\{ \exp\left[\frac{i}{\hbar} \chi(y)\right] - 1 \right\}. \quad (2.30)$$

Подставляя амплитуду рассеяния (2.3) в выражение для сечения рассеяния (2.27) и исключая дельта-функцию $\delta(q_x)$, получаем

$$d\sigma = \frac{L\psi}{2\pi\hbar} dq_y \left| \int_{-\infty}^{\infty} dy \exp\left(\frac{iq_y y}{\hbar}\right) \left\{ \exp\left[\frac{i}{\hbar} \chi(y)\right] - 1 \right\} \right|^2. \quad (2.31)$$

Мы воспользовались здесь тем, что $\delta^2(q_x) = (L\psi/2\pi\hbar) \delta(q_x)$.

Входящая в (2.31) функция $\chi/\hbar$ по порядку величины равна $RZe^2/\psi d\hbar c \approx \zeta^{(N)}$. Эта величина уже встречалась при рассмотрении области применимости борновского приближения и классической теории рассеяния. В первом случае она по сравнению с единицей была мала, а во втором — велика. Теперь мы видим, что она фактически входит в амплитуду рассеяния в эйкональном приближении, при этом она может быть как малой, так и большой по сравнению с единицей. Таким образом, формула (2.31) пригодна для описания рассеяния и в борновском приближении, и в классической теории.

Если $|\chi| \ll \hbar$, то формула (2.31) переходит в (2.13) для сечения рассеяния в борновском приближении.

Если же $|\chi| \gg \hbar$, то входящий в (2.31) интеграл по y может быть вычислен с помощью метода стационарной фазы. Точки стационарной фазы (их может быть несколько) определяются соотношением [36]

$$q_y = -\frac{d}{dy} \chi(y). \quad (2.32)$$

При этом

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{\infty} dy \exp\left(\frac{i}{\hbar} q_y y\right) \left\{ \exp\left[\frac{i}{\hbar} \chi(y)\right] - 1 \right\} &\approx \\ &\approx \sum_n \sqrt{\frac{2i\pi\hbar}{d^2\chi/dy_n^2}} \exp\left(\frac{i}{\hbar} F_n\right), \end{aligned}$$

где $F_n = q_y y_n + \chi(y_n)$ и суммирование ведется по различным точкам стационарной фазы y_n . Для сечения рассеяния в этом случае находим следующее выражение:

$$d\sigma = L\psi dq_y \left| \sum_n \left(\frac{d^2\chi}{dy_n^2}\right)^{-1/2} \exp\left(\frac{i}{\hbar} F_n\right) \right|^2. \quad (2.33)$$

Если в этом выражении пренебречь интерференцией между слагаемыми, соответствующими различным точкам стационарной фазы, то придем к выражению (2.24),

даваемому классической теорией рассеяния. (При этом следует учесть соотношение (2.32) и то, что при малых углах рассеяния $\theta \approx \psi\varphi$ и $q_y \approx p\psi\varphi$.)

Подчеркнем, что параметр $\zeta^{(N)}$, входящий в (2.31), быстро растет с уменьшением ψ и при $\zeta^{(N)} \gg 1$ рассеяние частицы на цепочке атомов становится классическим. Параметр $\zeta^{(N)} \sim 1$, когда $\psi \sim RZe^2/d\hbar c$. Этот угол при высоких энергиях значительно больше критического угла осевого каналирования $\psi_c = \sqrt{4Ze^2/\epsilon d}$, т.е. рассеяние становится классическим значительно раньше, чем наступает каналирование.

2.4. Движение заряженной частицы в поле, создаваемом совокупностью цепочек атомов кристалла

Мы рассмотрели движение заряженной частицы в поле цепочки атомов и показали, что это движение определяется в основном непрерывным потенциалом цепочки (2.15), представляющим собой потенциал цепочки атомов, усредненный по координате z оси цепочки. Рассмотрим теперь движение частицы в поле совокупности цепочек атомов кристалла

$$U(x, y) = \sum_n U_R(\mathbf{p} - \mathbf{p}_n), \quad (2.34)$$

где $U_R(\mathbf{p})$ — потенциальная энергия взаимодействия частицы с непрерывным потенциалом отдельной цепочки атомов, $\mathbf{p}_n$ — радиус-вектор цепочки в плоскости, ортогональной оси z .

Как и в случае движения в поле непрерывного потенциала отдельной цепочки атомов (2.15), в поле (2.34) сохраняется составляющая импульса частицы, параллельная кристаллографической оси z , вблизи которой происходит движение. При этом движение в поперечной оси z плоскости определяется уравнением

$$\ddot{\mathbf{p}} = -\frac{1}{\epsilon} \frac{\partial}{\partial \mathbf{p}} U(x, y). \quad (2.35)$$

Непрерывные потенциалы цепочек атомов кристалла, вообще говоря, перекрываются, поэтому движение происходит в весьма сложном периодическом поле цепочек атомов. Тем не менее основные особенности движения в таком поле можно проанализировать, используя интеграл энергии поперечного движения

$$\epsilon_{\perp} = \frac{1}{2} \epsilon \dot{\mathbf{p}}^2 + U(x, y). \quad (2.36)$$

На рис. 3 и 4 представлены типичные эквипотенциальные поверхности непрерывной потенциальной энергии $U(x, y)$ для положительно заряженных частиц, когда движение происходит в кристалле кремния вблизи кристаллографических осей $\langle 111 \rangle$ и $\langle 110 \rangle$. Для отрицательно заряженных частиц эти эквипотенциалы необходимо взять с отрицательным знаком.

Приведенные эквипотенциалы показывают, что для положительно заряженных частиц функция $U(x, y)$ имеет максимумы в точках, которые соответствуют положениям цепочек атомов в поперечной плоскости, и неглубокие потенциальные ямы в областях между цепочками атомов. Ясно, что в зависимости от энергии поперечного движения $\epsilon_{\perp}$ движение в таком поле может быть как финитным, так и инфинитным по отношению к цепочкам атомов. Движение будет финитным, если $\epsilon_{\perp} < U_H$, где U_H — потенциальная энергия в седловой точке.

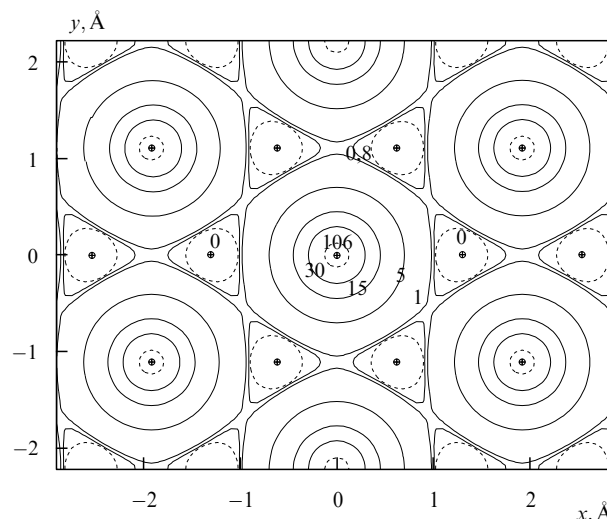


Рис. 3. Эквипотенциальные поверхности непрерывной потенциальной энергии $U(x, y)$ взаимодействия положительно заряженной частицы с цепочками атомов кристалла кремния в плоскости, ортогональной оси $\langle 111 \rangle$, при комнатной температуре кристалла. Цифры у линий соответствуют значениям потенциальной энергии в электронвольтах. Пунктирные линии соответствуют нулевому значению кривизны потенциальной энергии (3.11)

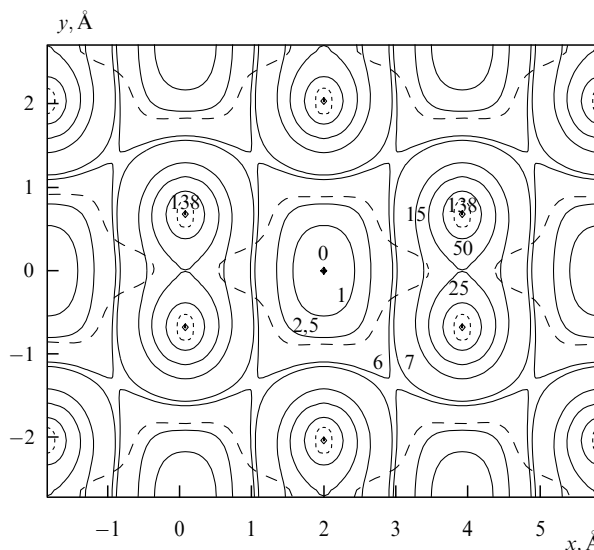


Рис. 4. То же, что на рис. 3, для кристаллографической оси $\langle 110 \rangle$

Частицы при этом движутся в каналах (канализуются) по траекториям типа винтовой линии с осью вдоль оси канала.

При $\epsilon_{\perp} > U_H$ движение является инфинитным по отношению к цепочкам атомов. Частица в этом случае имеет достаточную энергию $\epsilon_{\perp}$, чтобы пройти над имеющимися потенциальными барьерами, поэтому такие частицы можно назвать надбарьерными.

При $1/2\epsilon\psi_c^2 > \epsilon_{\perp} > U_H$, где ψ_c — критический угол осевого каналирования, согласно (2.36) положительно заряженная частица не может подойти на близкие расстояния к ядрам атомов решетки, поэтому для такой частицы будут подавлены процессы, связанные с малыми прицельными параметрами (ядерные реакции, рассеяние на большие углы и др.). Термин "канализованная частица" впервые был введен в [19] для того, чтобы

выделить такую группу частиц, которые не могут подходить на близкие расстояния к ядрам атомов. В дальнейшем термин "канализованная частица" используется для частиц, которые совершают финитное движение, а термин "надбарьерная частица" — для частиц, которые совершают надбарьерное движение.

При $\varepsilon_{\perp} \gtrsim U_H$ существуют небольшие пространственные области между цепочками атомов, попав в которые частица может перейти из одного канала в другой. При этом, двигаясь между цепочками атомов, положительно заряженная частица может длительное время проводить в одном из каналов (пока не попадет в указанную область вблизи седловой точки). Поэтому такое движение можно назвать "квазифинитным". С ростом $\varepsilon_{\perp}$ вероятность такого движения быстро уменьшается, так как при этом быстро расширяется пространственная область вблизи седловой точки, попав в которую частица переходит в соседний канал.

Для отрицательно заряженных частиц финитное движение возможно при $|\varepsilon_{\perp}| \lesssim 1/2\varepsilon\psi_c^2$, т.е. если частица падает на цепочку под углом $\psi \lesssim \psi_c$. При этом возможны ситуации, когда частица движется в канале, образованном одной из цепочек атомов или несколькими цепочками.

Финитное движение частиц в кристалле происходит не только при $\psi \lesssim \psi_c$, но и в случае $\psi \gg \psi_c$. Действительно, существуют открытые плоскостные каналы, образованные цепочками атомов, попав в которые частица будет колебаться между цепочками атомов. Такое движение называется плоскостным канализованием. Для осуществления такого движения необходимо, чтобы был мал угол θ между составляющей импульса частицы, ортогональной оси цепочки z , и осью плоскостного канала i , кроме того, $\psi \gg \psi_c$.

Таким образом, характер движения в поле цепочек атомов кристалла существенно зависит от энергии поперечного движения, знака заряда частицы, от ориентации импульса частицы в плоскости, ортогональной оси цепочки, и характера расположения цепочек атомов в этой плоскости. При этом движение может быть как финитным, так и инфинитным по отношению к цепочке атомов.

Для решения уравнения (2.35) кроме интеграла энергии поперечного движения необходимо знать еще один интеграл движения. В случае рассеяния на отдельной цепочке атомов таким интегралом движения был момент количества движения. Однако в рассматриваемой задаче второй интеграл движения существует далеко не всегда, причем такая ситуация имеет место как при финитном, так и при инфинитном движении частицы в плоскости, поперечной оси z [28–31]. Если второй интеграл существует, то переменные в (2.35) разделяются и движение будет квазипериодическим. Если же второй интеграл не существует, то отсутствуют периодически повторяющиеся участки пути и движение будет существенно неперiodическим. О таком движении говорят как о хаотическом.

Итак, рассматриваемая задача о движении заряженной частицы в двумерном периодическом поле цепочек атомов является типичной задачей теории нелинейных систем, в которых исследуются проблемы, связанные с регулярным и хаотическим характером движения, а также проблемы устойчивости движения. Перейдем к обсуждению этих вопросов.

3. Хаос в динамических системах

3.1. Движение в потенциале Хеннона–Хейлса

Движение частицы в сравнительно сложном поле может быть не только регулярным, но и стохастическим [51, 52], что связано с неустойчивостью движения частицы в этом поле. Неустойчивость означает, что малое изменение начальных условий приводит к экспоненциальному разбеганию первоначально близких траекторий. При этом, если наблюдать за движением частицы в течение больших промежутков времени, то оно будет восприниматься как случайное, хаотическое. Такая ситуация осуществляется уже в том случае, когда частица совершает финитное движение в поле, зависящем от двух координат. Рассмотрим, например, движение в так называемом потенциале Хеннона–Хейлса [53]

$$U_{H-H} = \frac{1}{2}(x^2 + y^2) + x^2y - \frac{1}{3}y^3. \quad (3.1)$$

Для простоты все переменные здесь считаются безразмерными.

К потенциальной энергии (3.1) придем, если расположим три одинаковые одноименные заряда в вершинах равностороннего треугольника и рассмотрим движение в плоскости, образованной этими зарядами вблизи центра треугольника. Тогда разлагая потенциалы, создаваемые отдельными зарядами, по координатам x и y относительно центра треугольника и ограничиваясь членами третьего порядка, мы придем к потенциалу (3.1).

На рис. 5 представлены эквипотенциальные поверхности потенциальной энергии (3.1) вблизи ее минимального значения.

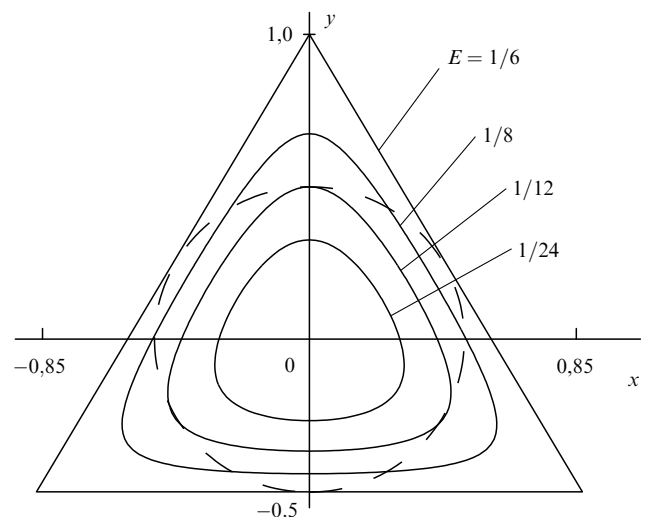


Рис. 5. Эквипотенциальные поверхности потенциала Хеннона–Хейлса (3.1)

При движении частицы в поле (3.1) сохраняется энергия частицы

$$E = \frac{1}{2}(p_x^2 + p_y^2) + U_{H-H}(x, y) \quad (3.2)$$

(энергия E и компоненты импульса p_x и p_y здесь считаются безразмерными). При этом частица будет совершать финитное движение, если $E < 1/6$ [51].

Траектория частицы в поле (3.1) кроме интеграла энергии может обладать еще и вторым интегралом движения. Но далеко не всегда, а только при определенных условиях.

Второй интеграл движения существует при малых значениях энергии, когда можно пренебречь кубическими членами в разложении потенциала. В этом случае кроме энергии сохраняется момент количества движения $M = \rho^2 \dot{\varphi}$, где ρ и φ — полярные координаты траектории частицы. При этом переменные в уравнении движения разделяются и траектория частицы имеет вид

$$t = \pm \int \frac{d\rho}{\sqrt{2[E - U(\rho)] - M^2 \rho^{-2}}} + \text{const}, \quad (3.3)$$

$$\varphi = M \int dt \rho^{-2}(t) + \text{const},$$

где $U(\rho) = (1/2)(x^2 + y^2)$.

Второй интеграл движения может существовать также при учете в потенциальной энергии кубических членов разложения. Если такой интеграл движения существует, то движение будет регулярным. Если же второй интеграл не существует, то движение будет хаотическим [51, 52]. Характер движения может быть установлен с помощью метода сечений Пуанкаре (см., например, [14, 51]), который заключается в следующем.

Рассмотрим траекторию частицы в фазовом пространстве (x, p_x, y, p_y) . Из закона сохранения энергии (3.2) следует, что траектория лежит на трехмерной поверхности в этом пространстве, определяемой соотношением $E(x, p_x, y, p_y) = \text{const}$. Рассмотрим точки пересечения траектории с некоторой плоскостью, например плоскостью (y, p_y) . Иными словами, положим $x = \text{const}$ в соотношении $E(x, p_x, y, p_y) = \text{const}$. Эти точки могут лежать на некоторой кривой либо могут быть распределены случайным образом в некоторой части плоскости (y, p_y) . Если точки лежат на кривой, то существует второй интеграл движения, в противном случае второй интеграл движения отсутствует. Таким образом, здесь существование второго интеграла движения связывается с расположением точек вдоль некоторой кривой. Критерия нахождения точек на некоторой кривой мы не имеем и определяем существование этой кривой только приближенно путем численного интегрирования уравнения движения. Поэтому нет и общего критерия существования второго интеграла движения.

Наличие хаотического движения позволяет применять методы статистической физики для описания физических процессов, связанных с этим движением. Поскольку хаотическое движение может возникать, как мы видим, уже при двух степенях свободы, то отсюда вытекает, что методы статистической физики можно применять не обязательно при очень большом числе степеней свободы, но и при ограниченном. В данном случае их число равно двум.

На рис. 6 представлены результаты вычислений сечений Пуанкаре и соответствующих им траекторий для частиц, движущихся в потенциале Хеннона–Хейлса, при различных значениях энергии. Видно, что при малых значениях E , когда движение происходит вблизи дна потенциальной ямы (3.1), практически для всех начальных условий движение регулярное. Это связано с тем, что

при малых значениях энергии E частица не попадает в область с большой нелинейностью, и поэтому мы фактически имеем дело с задачей о движении в центрально-симметричном поле.

Заметим, что существует несколько областей, в которых движение устойчиво в том смысле, что при малом изменении начальных условий характер фазовых кривых мало меняется [51, 52]. Эти области разделены некоторыми линиями, при переходе через которые характер движения существенно изменяется, а именно, один устойчивый режим движения переходит в другой.

С ростом энергии частицы области, в которых движение является неустойчивым, расширяются и заполняют все большую часть фазового пространства в сечениях Пуанкаре, разделяя "островки" в сечении, где движение устойчиво. Это означает, что в зависимости от начальных условий характер движения может существенно различаться, т.е. быть либо регулярным, устойчивым, либо нерегулярным, хаотическим.

При $E \approx 1/6$ практически для всех начальных условий движение будет хаотическим.

Таким образом, движение частицы в двумерном поле (3.1) может быть как регулярным, так и хаотическим.

3.2. Устойчивость движения

Мы видели на простейшем примере движения частицы в потенциале Хеннона–Хейлса, что при малых значениях энергии движение устойчиво. С ростом энергии, когда частица попадает в область, где силы существенно нелинейны, в зависимости от начальных условий движение может быть как регулярным, так и хаотическим. При значениях энергии, близких к вершине потенциальной ямы, практически для всех начальных условий движение неустойчиво.

Механизмом развития хаотического режима движения является локальная неустойчивость движения в том смысле, что малому изменению начальных условий соответствует экспоненциально быстрое разбегание траекторий. Поэтому обсудим более подробно вопрос об устойчивости движения частицы во внешнем поле [31, 54]. С этой целью рассмотрим скорость разбегания двух первоначально близких фазовых траекторий со временем. Их движение будет неустойчивым, если траектории экспоненциально разбегаются со временем:

$$d(t) = d(0) \exp(\lambda t), \quad \text{Re } \lambda > 0, \quad (3.4)$$

где $d(0)$ — расстояние между двумя траекториями в фазовом пространстве при $t = 0$.

Естественно связать значение параметра $\text{Re } \lambda$, при котором развивается неустойчивость, с границей перехода к хаотическому режиму движения. Однако это условие потери устойчивости движения является только необходимым условием перехода к хаотическому режиму, но не достаточным, ибо при $\text{Re } \lambda > 0$ может происходить также смена одного устойчивого режима движения другим. Вместе с тем это необходимое условие весьма важное и широко используется для анализа характера движения в различных системах.

Обсудим более подробно этот необходимый критерий устойчивости [54]. Рассмотрим две первоначально близкие траектории в фазовом пространстве $(\mathbf{r}_1(t); \mathbf{p}_1(t))$ и $(\mathbf{r}_2(t); \mathbf{p}_2(t))$ в случае двумерного движения, где $\mathbf{r}_{1,2}$ и $\mathbf{p}_{1,2}$ — двумерные векторы координат и импульсов частиц.

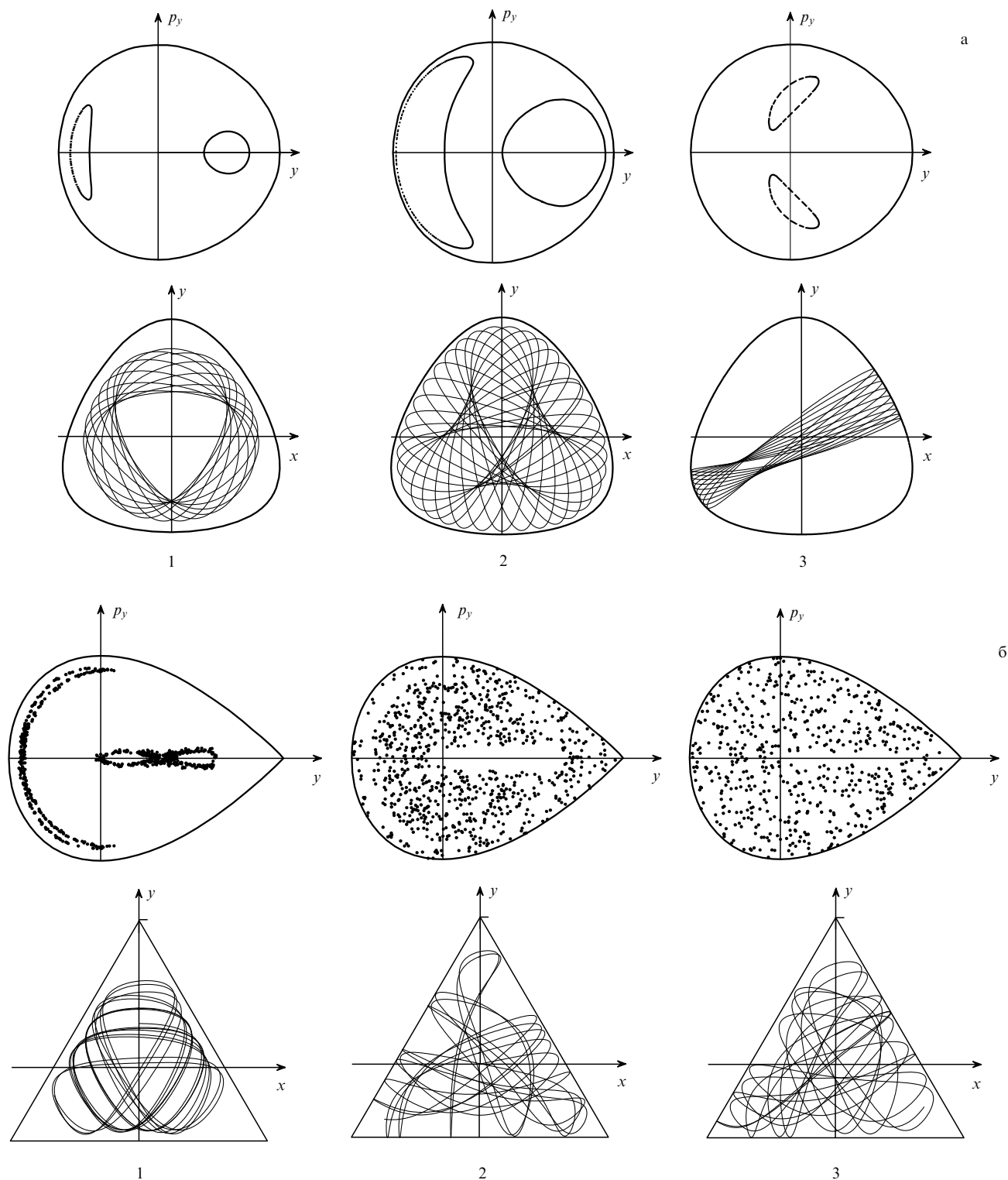


Рис. 6. Сечения Пуанкаре и соответствующие им траектории для частиц, движущихся в потенциале Хеннона–Хейлса (3.1) при $E = 1/20$ (а) и $E = 1/6$ (б); кривые 1, 2 и 3 соответствуют различным начальным условиям для траектории

Введем переменные

$$\xi = \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2, \quad \eta = \mathbf{p}_1 - \mathbf{p}_2.$$

При этом $\dot{\xi} = \eta$ (для простоты, как и в предыдущем параграфе, считаем, что переменные $\mathbf{r}$ и $\mathbf{p}$ – безразмерные величины).

Тогда, линеаризуя уравнение движения

$$\dot{\eta} = -\nabla U(\mathbf{r}_1) + \nabla U(\mathbf{r}_2), \quad (3.5)$$

при $\mathbf{r}_2 = \mathbf{r}_1 - \xi$, считая ξ малым, приходим к следующим уравнениям для ξ и η :

$$\dot{\xi} = \eta, \quad \dot{\eta} = -\hat{S}\xi, \quad (3.6)$$

где $\hat{S}$ – матрица, получаемая из вторых производных потенциала вдоль траектории

$$S_{ij} = \left. \frac{\partial^2 U}{\partial r_i \partial r_j} \right|_{\mathbf{r}=\mathbf{r}_1(t)}.$$

Набор уравнений (3.6) можно записать в матричном виде:

$$\begin{pmatrix} \dot{\xi} \\ \dot{\eta} \end{pmatrix} = \hat{I} \begin{pmatrix} \xi \\ \eta \end{pmatrix}, \quad \hat{I} = \begin{pmatrix} \hat{O} & \hat{I} \\ -\hat{s} & \hat{O} \end{pmatrix}, \quad (3.7)$$

где $\hat{O}$ и $\hat{I}$ — нулевая и единичная матрицы второго ранга. Используя унитарное преобразование $\hat{T}$, матрицу $\hat{I}$ можно привести к диагональному виду:

$$(\hat{T}\hat{I}\hat{T}^{-1})_{ij} = \lambda_i \delta_{ij}. \quad (3.8)$$

Если хотя бы одно из собственных значений матрицы $\hat{I}$ имеет положительно-определенную реальную часть, то траектории экспоненциально разбегаются и движение неустойчиво.

Для малых интервалов времени входящую в (3.7) матрицу $\hat{s}$ можно считать не зависящей от времени (но $\hat{s}$ зависит от координат $\mathbf{r}_1$). Тогда собственные значения матрицы $\hat{I}$ будут определять локальную, т.е. при заданных значениях координат, устойчивость движения.

Условие для определения собственных значений матрицы имеет вид

$$\det(\hat{I} - \lambda) = 0. \quad (3.9)$$

Отсюда находим собственные значения λ :

$$\lambda_{1,2,3,4} = \pm \sqrt{-b \pm \sqrt{b^2 - 4c}}, \quad (3.10)$$

где

$$b = \frac{\partial^2 U}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 U}{\partial y^2}, \quad c = \frac{\partial^2 U}{\partial x^2} \frac{\partial^2 U}{\partial y^2} - \left(\frac{\partial^2 U}{\partial x \partial y} \right)^2.$$

Если $b > 0$, то для $c > 0$ все λ_i — мнимые величины, и, следовательно, движение будет устойчивым. Для $c < 0$ один из корней λ_i будет реальным и положительным. Движение в таком случае будет неустойчивым, так как при этом происходит экспоненциально быстрое разбегание траекторий.

Знак величины c совпадает со знаком гауссовой кривизны $K(x, y)$ поверхности $U(x, y)$:

$$K(x, y) = c \left[1 + \left(\frac{\partial U}{\partial x} \right)^2 + \left(\frac{\partial U}{\partial y} \right)^2 \right]^{-1}. \quad (3.11)$$

Заметим, что кривизна — локальное понятие, поэтому полученный критерий устойчивости является локальным. Таким образом, устойчивое движение соответствует ситуации, когда движение происходит в области с положительной кривизной поверхности $K(x, y)$. Если же траектория частицы попадает в область с отрицательной кривизной этой поверхности, то движение неустойчиво.

В случае потенциала Хеннона–Хейлса линия, соответствующая нулевому значению кривизны поверхности $U_{\text{Н-Н}}(x, y)$, представляет собой окружность (см. рис. 5). Эта линия разделяет области с положительной кривизной внутри окружности и отрицательной кривизной вне окружности. При малых значениях энергии частица движется вблизи минимального значения потенциальной энергии, где кривизна положительна. В этом случае движение устойчиво и имеет регулярный квазипериодический характер. При увеличении энергии в течение

некоторых промежутков времени траектория частицы может проходить через область с отрицательным значением кривизны функции $U_{\text{Н-Н}}(x, y)$. В этих областях происходит потеря устойчивости движения, т.е. первоначально близкие траектории начинают экспоненциально быстро расходиться со временем. Чем больше времени частица находится в области с отрицательной кривизной потенциальной энергии, тем сильнее разбегаются траектории. Таким образом, используя критерий отрицательной кривизны потенциальной энергии, можно определить значение энергии частицы, при котором становится возможным переход от регулярного режима движения к хаотическому.

3.3. Неустойчивость движения в случае многократного рассеяния от трех центров

В предыдущих параграфах рассмотрено финитное движение частицы в двумерной потенциальной яме и показано, что оно может быть как регулярным, так и хаотическим. При хаотическом движении малое изменение начальных условий приводит к экспоненциально быстрому разбеганию траекторий, которое соответствует неустойчивости движения. Эта неустойчивость существенно связана с двумерностью потенциала, в котором происходит движение. Покажем, что неустойчивость возникает не обязательно при движении в потенциальной яме, но также и в процессе рассеяния. Для этого необходимо, чтобы в рассеянии участвовало не менее трех центров. Простейшее рассеяние возникает при упругом отражении, поэтому чтобы проиллюстрировать сделанное утверждение, рассмотрим простейшую задачу о рассеянии частицы при упругом отражении от трех дисков, расположенных в одной плоскости [55]. Для простоты предположим, что диски одинаковые, а их центры образуют равносторонний треугольник. Пусть частица движется в этой же плоскости, так что она может испытывать, в принципе, сколько угодно столкновений с дисками, но может также и выйти из области треугольника.

При столкновении с отдельным диском частица отражается от него под углом, равным углу падения (углу между импульсом частицы и перпендикуляром к касательной к диску в точке падения (рис. 7)). При этом угол рассеяния связан с прицельным параметром b соотношением

$$\varphi(b) = \pi - 2 \arcsin \frac{b}{R}, \quad (3.12)$$

где R — радиус диска.

Если имеется второй диск, то частица после отражения от первого может либо пройти мимо второго диска, либо отразиться от него. В принципе, возможна ситуация, когда частица будет бесконечно много раз отражаться и от первого, и от второго дисков, т.е. совершать колебания между ними. Такое колебательное движение, однако, будет неустойчивым, так как при малом изменении начальных условий частица, совершив несколько колебаний между дисками, покинет их.

Более сложной оказывается ситуация при наличии трех дисков. В этом случае возможно многократное отражение от трех дисков, при котором частица все время будет оставаться в пространстве между ними. Число таких траекторий частицы, в отличие от случая двух дисков, бесконечно велико, и все они неустойчивы. Пример такой траектории представлен на рис. 8.

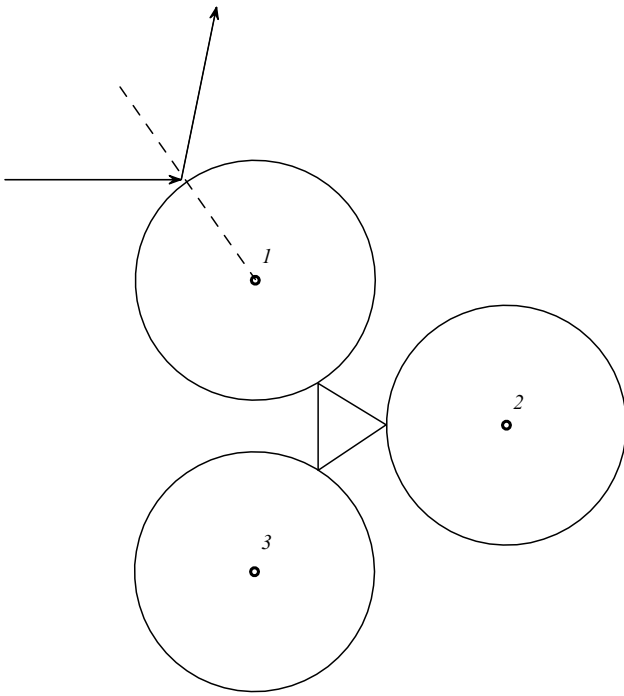


Рис. 7. Движение частицы в поле трех дисков, расположенных на плоскости

Время пребывания частицы в пространстве между тремя дисками существенно зависит от начальных условий для траектории. Определим это время в том случае, когда частица падает на диски перпендикулярно линии, соединяющей центры дисков 1 и 3 (рис. 8). Время задержки определяется как функция величины y_0 . Под временем задержки $\tau(y_0)$ понимается время пребывания частицы в пространстве, ограниченном окружностью, касающейся трех дисков. Траектория частицы в рассматриваемой задаче представляет собой сложную функцию времени и начальных условий, поэтому воспользуемся методом численного нахождения времени задержки $\tau(y_0)$.

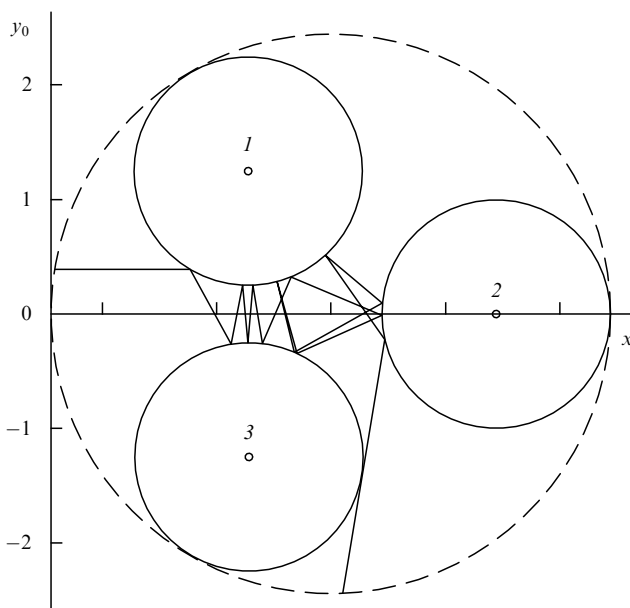


Рис. 8. Многократное рассеяние частицы на дисках

На рис. 9 представлены расчетные зависимости $\tau(y_0)$ от прицельного параметра y_0 . По оси ординат отложена величина $F = \log(\tau(y_0)/T)$, а по оси абсцисс — y_0 . Здесь $T = R/v$ (радиус диска R и скорость v предполагаются безразмерными, так что $R = 1$ и $v = 1$), y_0 отсчитывается от средней точки между двумя дисками. Приведенный график показывает, что существуют области значений y_0 , в которых функция $\tau(y_0)$ весьма сильно изменяется в зависимости от y_0 . При некоторых значениях y_0 величина $\tau(y_0)$ может быть очень большой. Иными словами, при некоторых значениях y_0 частица в течение длительного промежутка времени может находиться в области между дисками.

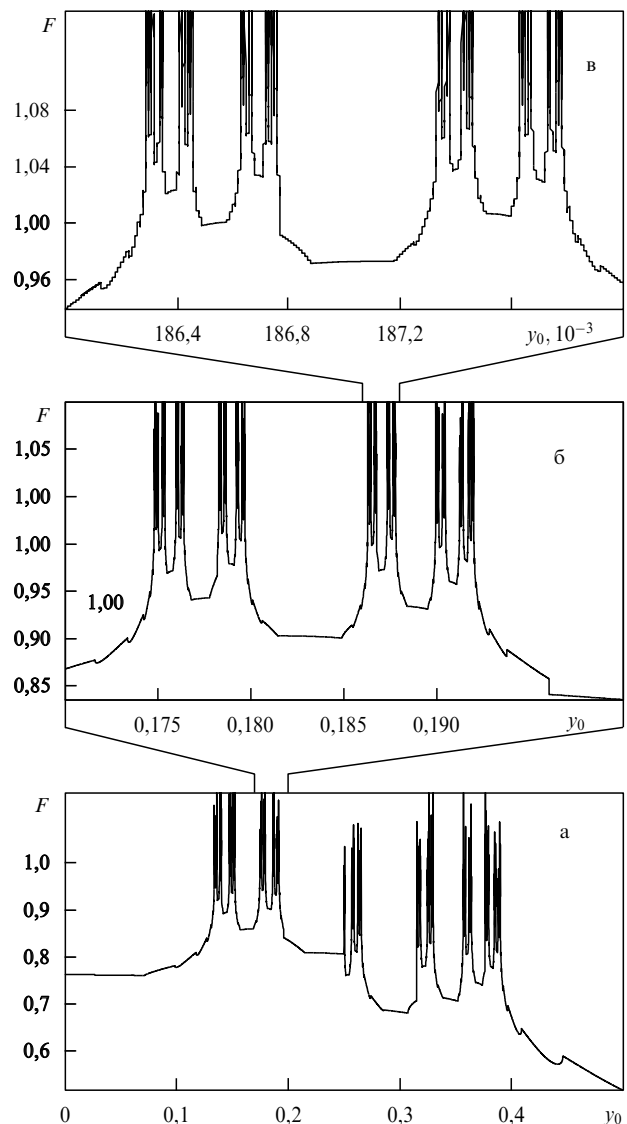


Рис. 9. Зависимость времени пребывания частицы в пространстве между дисками от прицельного параметра y_0

Возникает вопрос о более тонкой структуре функциональной зависимости времени задержки от прицельного параметра в области сильного изменения $\tau(y_0)$. Для этого проводились расчеты с уменьшенным шагом y_0 . Если при этом растянуть график по y_0 , то оказывается, что картина с измененным масштабом не отличается от исходной (см. переход от рис. 9а к рис. 9б). Это свойство

функции $\tau(y_0)$, т.е. неизменность картины, сохраняется и при последующих изменениях масштаба y_0 (рис. 9в). Такое поведение функции $\tau(y_0)$ называется фрактальным [56]. Фрактальность в данном случае означает, что при изменении масштаба y_0 получается практически одинаковая картина рассеяния частицы тремя дисками.

Задача о рассеянии частицы тремя дисками подробно рассмотрена в работах [55, 57]. В них обсуждаются также некоторые математические вопросы, а именно, устойчивость движения, энтропия, размерность Хаусдорфа и др. Данная задача представляет значительный интерес еще и потому, что допускает квантовомеханическое рассмотрение (см., например, [57–59]).

Аналогичная задача для некоторых других потенциалов, плавно изменяющихся в пространстве, рассмотрена в [60–62].

Тройку дисков можно рассматривать как некий исходный элемент, с помощью которого можно построить плоскую периодическую структуру. Такая периодическая структура аналогична структуре цепочек атомов кристалла. Рассеяние частицы в периодической структуре, состоящей из трех дисков, во многом аналогично рассеянию в периодическом поле цепочек атомов кристалла. Поэтому двумерная периодическая структура, состоящая из трех дисков, является хорошей моделью для исследования режима движения в кристалле.

4. Регулярное и хаотическое движение быстрых заряженных частиц в кристаллах

4.1. Каналирование положительно заряженных частиц

Мы рассмотрели движение быстрых заряженных частиц в кристалле под малым углом ψ к одной из кристаллографических осей и показали, что при высоких энергиях это движение определяется в основном непрерывным потенциалом цепочек атомов кристалла (2.34). Движение частицы в таком поле при $\psi \lesssim \psi_c$ может быть как финитным, так и инфинитным по отношению к цепочкам атомов. Потенциал, в котором происходит движение, является сложной нелинейной функцией двух координат, поэтому описание движения частицы в кристалле фактически сводится к задаче о движении в двумерном периодическом нелинейном поле. Движение частицы в двумерном нелинейном поле (см. раздел 3) может быть как регулярным, так и хаотическим. Аналогичная ситуация наблюдается и при движении заряженной частицы в кристалле. Рассмотрим возможности реализации того или иного типа движения частицы в кристалле при канализовании и надбарьерном движении частицы в кристалле. Начнем с движения в кристалле положительно заряженной частицы высокой энергии.

Непрерывный потенциал, в котором движется частица в кристалле, существенно зависит от кристаллографического направления, вблизи которого происходит движение (см. раздел 2.4). В случае движения частицы в кристалле кремния вдоль оси $\langle 111 \rangle$ эквипотенциальные поверхности непрерывного потенциала цепочек атомов представлены на рис. 3. Этот потенциал на больших расстояниях от цепочек образует потенциальную яму, которая по форме близка к потенциалу Хеннона–Хейлса. Действительно, потенциал на больших расстояниях от цепочки может быть разложен в ряд Тейлора относи-

тельно центральной точки потенциальной ямы. Суммируя потенциалы соседних цепочек атомов, которые фактически и определяют потенциальную яму, и сохраняя кубические члены в разложении, приходим к задаче о движении в потенциале Хеннона–Хейлса. При этом энергия частицы определяется энергией поперечного движения $\varepsilon_{\perp}$. Движение частицы в потенциале Хеннона–Хейлса, как мы видели, может быть как регулярным, так и хаотическим в зависимости от значения энергии и начальных условий.

Таким образом, при канализовании положительно заряженной частицы высокой энергии в кристалле кремния вдоль оси $\langle 111 \rangle$ ее движение в потенциальной яме может носить как регулярный, так и хаотический характер. С ростом энергии поперечного движения, когда $\varepsilon_{\perp}$ приближается к энергии в седловой точке, доля начальных условий, для которых движение является хаотическим, быстро увеличивается.

Рассмотрим движение частицы в кристалле кремния вдоль оси $\langle 100 \rangle$. Как и в предыдущем случае, потенциалы соседних цепочек атомов образуют потенциальную яму (см. рис. 10), форма которой, однако, отличается от формы потенциальной ямы в случае движения вдоль оси $\langle 111 \rangle$. Разлагая потенциалы соседних цепочек атомов относительно центральной точки потенциальной ямы по малому отклонению от этой точки и сохраняя первый нелинейный член разложения, приходим к задаче о движении в потенциале вида ² [31]

$$U(x, y) = 4U_H(\tilde{x}^2 + \tilde{y}^2 - \tilde{x}^4 - \tilde{y}^4 + 14\tilde{x}^2\tilde{y}^2), \quad (4.1)$$

где $\tilde{x} = 4x/a$, $\tilde{y} = 4y/a$, a — постоянная решетки, U_H — потенциальная энергия в седловой точке. В силу симметрии потенциала в данном случае слагаемые, содержащие кубические члены разложения, отсутствуют и первый нелинейный член разложения содержит четвертые степени координат.

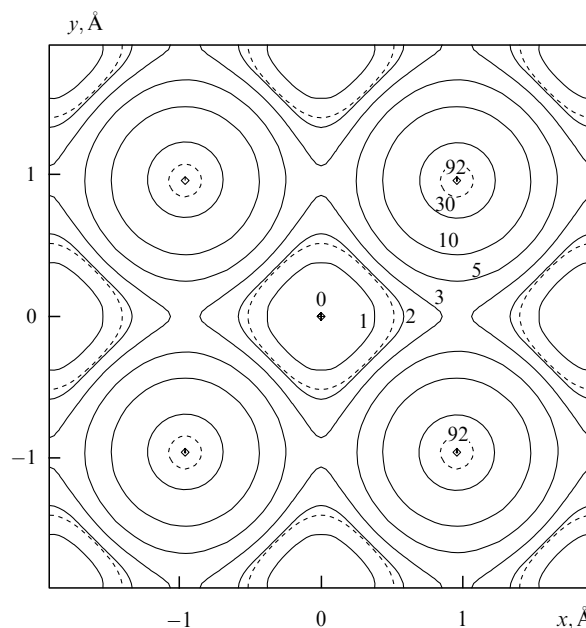


Рис. 10. То же, что на рис. 3 для кристаллографической оси $\langle 100 \rangle$

² Регулярное и хаотическое движение положительно заряженной частицы в кристалле кремния вдоль оси $\langle 100 \rangle$ исследовалось также в [30] без использования разложения (4.1).

Характер движения частицы определяется кривизной поверхности потенциальной энергии. В рассматриваемом поле, благодаря слагаемым четвертой степени по координатам, кривизна поверхности потенциальной энергии может быть как положительной, так и отрицательной в области потенциальной ямы. Используя разложение (4.1), легко получить уравнение для линии с нулевым значением кривизны поверхности потенциальной энергии:

$$1 + 8(\tilde{x}^2 + \tilde{y}^2) - 84(\tilde{x}^4 + \tilde{y}^4) - 552\tilde{x}^2\tilde{y}^2 = 0. \quad (4.2)$$

Эта линия показана на рис. 10 пунктиром.

В зависимости от значения $\varepsilon_{\perp}$ движение частицы в поле (4.1) может происходить либо полностью в области с положительной кривизной поверхности потенциальной энергии, либо в области с положительной кривизной и частично в области с отрицательной кривизной поверхности потенциальной энергии. Иными словами, движение частицы в таком поле может быть как регулярным, так и хаотическим.

На рис. 11 приведены типичные траектории частицы в поле (4.1) и соответствующие им сечения Пуанкаре при различных значениях поперечной энергии. Мы видим, что при малых значениях $\varepsilon_{\perp}$, когда траектория частицы полностью лежит в области с положительной кривизной поверхности потенциальной энергии, движение регулярное. С увеличением значения $\varepsilon_{\perp}$, когда траектория частицы попадает в область с отрицательным значением кривизны $U(x, y)$, наряду с регулярным возможно хаотическое движение частицы в данной потенциальной яме. С ростом $\varepsilon_{\perp}$, когда поперечная энергия приближается к

энергии в седловой точке, доля начальных условий, при которых движение является хаотическим, увеличивается.

Аналогичная ситуация имеет место и в случае финитного движения частицы в потенциальной яме вдоль оси $\langle 110 \rangle$. Потенциальная яма в этом случае имеет более сложную структуру, чем при движении частицы вдоль осей $\langle 111 \rangle$ и $\langle 100 \rangle$, поэтому здесь этот случай подробно не анализируется.

4.2. Аксиальное каналирование отрицательно заряженных частиц

Перейдем к рассмотрению аксиального каналирования в кристаллах отрицательно заряженных частиц. В этом случае потенциальная энергия частицы отличается знаком от потенциальной энергии положительно заряженной частицы, а финитное движение имеет место при движении в потенциальных ямах, возникающих вблизи цепочек атомов. Эти потенциальные ямы отличаются от потенциальных ям в случае положительно заряженных частиц большей глубиной, а также формой (см. рис. 3, 4 и 10, на которых эквипотенциальные поверхности необходимо взять с обратным знаком).

В случае движения в кристалле кремния вдоль осей $\langle 111 \rangle$ и $\langle 100 \rangle$ потенциальные энергии для областей потенциальных ям можно с хорошей точностью аппроксимировать функцией, имеющей цилиндрическую симметрию (это непосредственно видно из рис. 3 и 10), и мы приходим к задаче о финитном движении частицы в поле $U(\rho)$, зависящем только от модуля расстояния от частицы до оси цепочки. В таком поле, очевидно, кроме энергии поперечного движения $\varepsilon_{\perp}$ сохраняется и момент количества движения M . В цилиндрических координатах

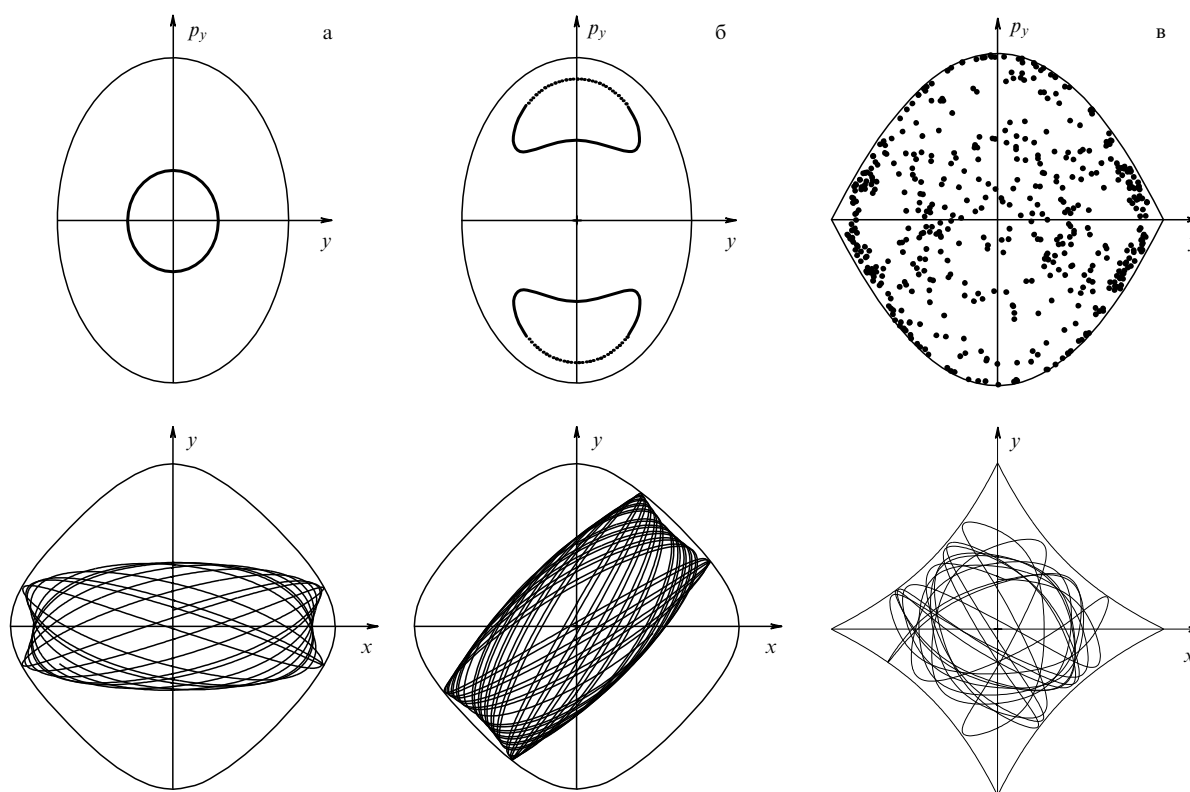


Рис. 11. Сечения Пуанкаре и соответствующие им траектории для частиц, совершающих финитное движение в поле (4.1) при $\varepsilon_{\perp} = 1$ эВ (а), $\varepsilon_{\perp} = 2$ эВ (б) и $\varepsilon_{\perp} = 3$ эВ (в)

(ρ , φ) эти интегралы определяются формулами

$$\varepsilon_{\perp} = \frac{1}{2} \varepsilon \dot{\rho}^2 + \frac{M^2}{2\varepsilon \rho^2} + U(\rho), \quad M = \varepsilon \rho \dot{\varphi}, \quad (4.3)$$

где φ — азимутальный угол в плоскости (x , y).

Из соотношений (4.3) легко найти зависимости $\rho(t)$ и $\varphi(t)$. При этом в случае финитного движения $\rho(t)$ будет периодической функцией с периодом

$$T = 2 \int_{\rho_{\min}}^{\rho_{\max}} \frac{d\rho}{\dot{\rho}}, \quad (4.4)$$

где $\rho_{\min}$ и $\rho_{\max}$ — минимальное и максимальное расстояния от частицы до оси цепочки, определяемые из уравнения

$$\varepsilon_{\perp} = \frac{M^2}{2\varepsilon \rho^2} + U(\rho).$$

Частица в общем случае будет совершать прецессию, при которой за время T радиус-вектор повернется на угол

$$\Delta\varphi = 2 \int_{\rho_{\min}}^{\rho_{\max}} \frac{M d\rho}{\varepsilon \rho \dot{\rho}}. \quad (4.5)$$

Обратим внимание на то, что линии, соответствующие нулевому значению кривизны представленных на рис. 3, 4 и 10 поверхностей потенциальной энергии, для отрицательно заряженных частиц расположены вблизи минимумов потенциальных ям. Это означает, что в широком интервале поперечных энергий $\varepsilon_{\perp}$ траектория аксиально каналированной частицы будет находиться в области с отрицательной кривизной поверхности потенциальной энергии и, казалось бы, ее движение всегда должно носить хаотический характер. Однако это, как мы видели выше, не так. Потенциал каждой цепочки атомов на малых расстояниях от ее оси обладает цилиндрической симметрией, поэтому движение частицы в таком поле должно быть регулярным квазипериодическим. Это кажущееся противоречие между критерием гауссовой кривизны для хаотического режима движения частицы во внешнем поле и регулярным режимом движения частицы в цилиндрически-симметричном поле обусловлено следующим. При выводе критерия гауссовой кривизны для определения характера движения частицы во внешнем поле предполагалось, что матрица $s_{ij} = \partial^2 U / \partial r_i \partial r_j$ слабо зависит от времени на интервалах времени $\Delta t \sim \lambda_i^{-1}$, в течение которых расходятся первоначально близкие траектории. Иными словами, требуется, чтобы потенциальная энергия $U(x, y)$ медленно изменялась с изменением координат. Вблизи же цепочек атомов это условие не выполняется, и, следовательно, в этой области координат нельзя применять критерий гауссовой кривизны для определения характера движения частицы в поле цепочки атомов.

Таким образом, в общем случае финитное движение частицы в поле $U(\rho)$ является регулярным квазипериодическим. Такая ситуация реализуется при движении частицы в кристалле кремния вдоль оси $\langle 111 \rangle$ или оси $\langle 100 \rangle$, для которых непрерывный потенциал в области потенциальной ямы может быть аппроксимирован цилиндрически-симметричной функцией. При движении

вдоль других кристаллографических осей такая ситуация может не иметь места. Например, при движении отрицательно заряженной частицы в кристалле кремния вдоль оси $\langle 110 \rangle$ потенциальная яма образуется двумя цепочками атомов, находящимися близко друг от друга. Потенциальная энергия в этом случае не обладает цилиндрической симметрией: функция $U(x, y)$ имеет глубокие минимумы при значениях координат, определяющих положения этих цепочек, и седловую точку на прямой, соединяющей цепочки (рис. 12). Канализованная в таком поле отрицательно заряженная частица в зависимости от $\varepsilon_{\perp}$ может двигаться в поле либо одной, либо двух цепочек атомов.

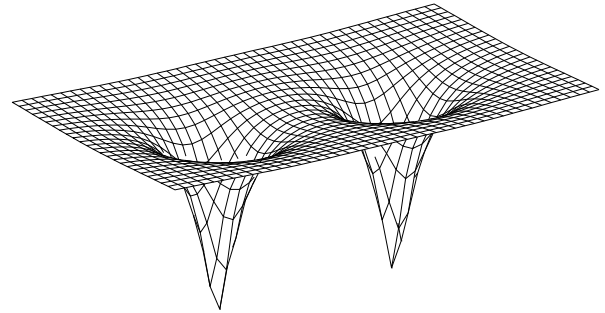


Рис. 12. Потенциальная яма для каналированной отрицательно заряженной частицы, движущейся в кристалле кремния вдоль оси $\langle 110 \rangle$

Особый интерес представляет случай, когда энергия поперечного движения близка к потенциальной энергии в седловой точке, поскольку траектория частицы в этом случае может проходить через область с отрицательной кривизной поверхности потенциальной энергии вблизи седловой точки и, следовательно, можно ожидать, что движение частицы будет неустойчивым по отношению к малым изменениям начальных условий. Поэтому рассмотрим подробнее движение отрицательно заряженной частицы при $\varepsilon_{\perp} \sim U_c$, где $U_c \approx -25$ эВ — значение потенциальной энергии в седловой точке, когда возможно попадание частицы в область седловой точки [28, 63].

Сечения Пуанкаре, соответствующие значениям $\varepsilon_{\perp} = 1,1 U_c$ и $\varepsilon_{\perp} = 0,4 U_c$, представлены на рис. 13. При $\varepsilon_{\perp} = 1,1 U_c$ частица может двигаться только в одной из двух частей (половинок) потенциальной ямы, образованной двумя цепочками атомов (см. рис. 12). При этом для различных начальных условий частица может совершать как регулярное, так и хаотическое движение в одной из половинок общей потенциальной ямы. Траектории, соответствующие регулярному и хаотическому режимам движения, при $\varepsilon_{\perp} = 1,1 U_c$ представлены на рис. 13а.

При $\varepsilon_{\perp} = 0,4 U_c$ частица, двигаясь в потенциальной яме, может переходить от одной цепочки атомов к другой. В этом случае практически при всех начальных условиях частица движется в потенциальной яме хаотически. Одна из таких траекторий представлена на рис. 13б.

Таким образом, как и в случае положительно заряженной частицы, движение отрицательно заряженной частицы в поле непрерывного потенциала цепочек атомов кристалла может быть как регулярным, так и хаотическим. Однако формы и глубины потенциальных

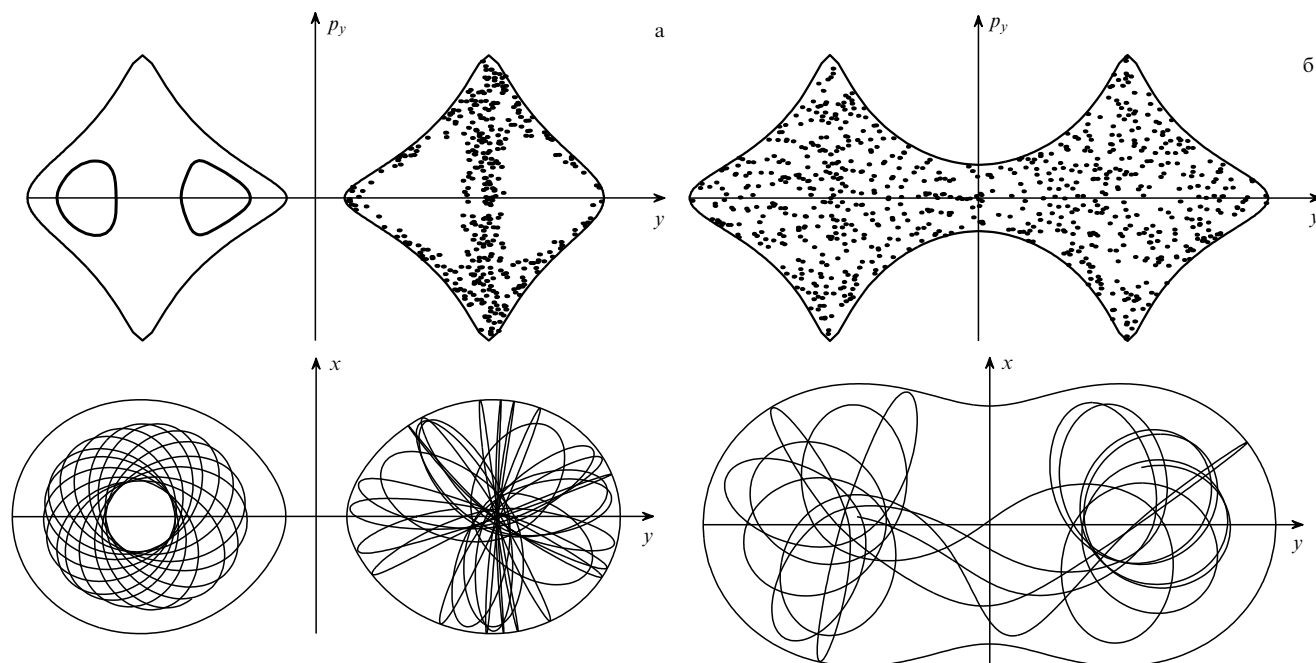


Рис. 13. Сечения Пуанкаре и соответствующие им траектории для частиц, движущихся в потенциальной яме, представленной на рис. 12, при $\varepsilon_{\perp} = 1, 1 U_c$ (а) и $\varepsilon_{\perp} = 0, 4 U_c$ (б)

ям для положительно и отрицательно заряженных частиц существенно различаются.

4.3. Явление динамического хаоса при надбарьерном движении частиц в кристалле

Мы рассмотрели финитное движение быстрой заряженной частицы в поле непрерывного потенциала цепочек атомов кристалла и показали, что это движение может иметь как регулярный, так и хаотический характер. Рассмотрим случай, когда частица совершает инфинитное (надбарьерное) движение по отношению к цепочкам атомов. Такая ситуация реализуется, если энергия поперечного движения превосходит потенциальную энергию в седловых точках (см. раздел 2.4).

При надбарьерном движении частица последовательно сталкивается с различными цепочками атомов, расположенными параллельно оси z , вблизи которой происходит движение. Между последовательными столкновениями может существовать корреляция и может ее не быть. Наличие корреляций соответствует регулярному движению частицы в поле цепочек атомов. Отсутствие же их соответствует нерегулярному, т.е. хаотическому, движению частицы в периодическом поле цепочек атомов. При этом для положительно заряженной частицы мы фактически приходим к задаче, аналогичной задаче о движении частицы в периодическом поле дисков, рассмотренной в разделе 3.3. Эта аналогия особенно близка, если движение происходит вдоль оси $\langle 111 \rangle$ в кристалле кремния, имеющего периодическую структуру, похожую на структуру, образованную периодически расположенными тройками дисков (см. раздел 3.3).

Действительно, существенные изменения траектории частицы происходят на расстояниях ее наибольшего сближения с цепочками атомов, где градиенты потенциала максимальны и потенциал можно считать цилиндрически-симметричным. Поэтому при описании движения надбарьерной частицы в поле непрерывного потен-

циала цепочек атомов в первом приближении можно считать, что потенциалы соседних цепочек цилиндрически-симметричны в области $\rho \leq \bar{a}/2$, где $\bar{a}$ — расстояние между цепочками, и что значение потенциала в оставшейся области между цепочками равно нулю. Таким образом, мы приходим к задаче, аналогичной рассмотренной в разделе 3.3 задаче о рассеянии в периодическом поле дисков, причем отражению от дисков соответствует рассеяние частицы на цепочках атомов. Обратим внимание на то, что длительное нахождение положительно заряженной частицы в области между тройками дисков фактически соответствует явлению осевого квазиканализирования положительно заряженных частиц в кристалле.

Вместе с тем между данными задачами имеется не только сходство, но и некоторое различие. Дело в том, что рассеяние от дисков является как бы "жестким", т.е. при всех значениях энергии угол падения равен углу отражения и частица не может попасть в область, ограниченную дисками. В результате этого движение частицы в такой системе крайне неустойчиво: близкие траектории быстро разбегаются при всех начальных условиях. При этом регулярное периодическое движение частицы в поле дисков возможно только для некоторых избранных траекторий (см. раздел 3.3).

В случае же движения в периодическом поле цепочек атомов кристалла частица может попадать в области, где потенциал цепочки отличен от нуля. Это приводит к тому, что наряду с областями начальных условий, для которых движение является хаотическим, существуют такие области начальных условий, для которых движение является регулярным и устойчивым (например, движение вдоль кристаллических плоскостей).

Как и в случае финитного движения в потенциальной яме, в рассматриваемой задаче о движении частицы в периодическом поле цепочек атомов кристалла для определения характера движения частицы может быть использован метод сечений Пуанкаре. Учитывая перио-

дичность, можно свести задачу о движении частицы в поле многих цепочек к задаче о движении в одной ячейке [63]. Для этого следует учесть отражение частицы от краев ячейки. В результате приходим к задаче о движении частиц в бильярде, помещенном во внешнее поле (см. [31, 64, 65]).

Процедура построения сечения Пуанкаре выглядит наиболее просто, если движение происходит в кристалле кремния вдоль оси $\langle 100 \rangle$, когда цепочки атомов образуют периодическую структуру с квадратной ячейкой в поперечной плоскости (см. рис. 10) [31, 63]. Для положительно заряженных частиц с $\varepsilon_{\perp} = 2Ze^2/d$ такие сечения представлены на рис. 14а. Элементарная ячейка в рассматриваемом случае в плоскости (x, y) представляет собой квадрат с центром на оси одной из цепочек атомов, стороны которого параллельны кристаллографическим плоскостям (011) и $(0\bar{1}1)$. Предполагается, что при пересечении краев ячейки частица упруго отражается. Построенные сечения Пуанкаре соответствуют точкам пересечения фазовой траектории частицы одной из сторон ячейки.

Аналогичные сечения нетрудно построить и в случае отражения частицы от дисков, периодически расположенных на плоскости (x, y) с квадратной элементарной ячейкой (рис. 14б). Мы видим, что при рассеянии на цепочках атомов наряду с нерегулярным возможно регулярное движение частицы. Последнее соответствует движению вдоль кристаллических плоскостей, образованных цепочками атомов. В случае же отражения от дисков практически для всех начальных условий движение является хаотическим. Существуют только отдельные точки в фазовом пространстве, для которых траектории регулярны.

С ростом $\varepsilon_{\perp}$ увеличиваются области в фазовом пространстве сечения Пуанкаре, в которых движение частицы регулярное. При этом появляются также и новые области, соответствующие регулярному движению частицы вдоль других кристаллических плоскостей с меньшей, чем плоскость (011) , упаковкой цепочками атомов. В случае же отражения от дисков при всех значениях энергии движение положительно заряженных частиц хаотическое.

Рассмотрим надбарьерное движение в поле цепочек атомов кристалла отрицательно заряженных частиц.

Такие частицы в отличие от положительно заряженных частиц притягиваются к цепочкам атомов и поэтому при всех значениях поперечной энергии могут подходить на близкие расстояния к цепочкам атомов, где градиенты потенциала велики. Это приводит к большей стохастизации их движения в периодическом поле цепочек атомов по сравнению с положительно заряженными частицами. Данное утверждение иллюстрирует представленное на рис. 14в сечение Пуанкаре для отрицательно заряженных частиц, движущихся в кристалле кремния вблизи оси $\langle 100 \rangle$. (Метод построения этого сечения тот же, что и в случае положительно заряженных частиц.) Это сечение показывает, что при $\varepsilon_{\perp} = 2Ze^2/d$ практически для всех начальных условий движение отрицательно заряженных частиц в периодическом поле цепочек атомов кристалла является хаотическим. Такая ситуация сохраняется вплоть до весьма больших значений $\varepsilon_{\perp}$ ($\varepsilon_{\perp} \sim 10Ze^2/d$).

Мы видим, что хаотический характер движения в периодическом поле цепочек атомов кристалла отрицательно заряженных частиц более близок к характеру движения частиц в периодическом поле дисков на плоскости (см. раздел 3.3). Однако в случае рассеяния на дисках происходит отражение частиц, тогда как отрицательно заряженные частицы притягиваются атомами цепочек.

Таким образом, как положительно, так и отрицательно заряженные частицы могут совершать хаотическое движение в периодическом поле цепочек атомов. При этом движение отрицательно заряженных частиц является более хаотическим — такой режим движения реализуется для большего набора начальных условий, чем в случае положительно заряженных частиц.

4.4. Характер движения частиц при многократном рассеянии на цепочках атомов кристалла и возможности его описания

В предыдущих разделах мы видели, что для определения характера движения необходимо знать траекторию частицы в периодическом поле цепочек атомов. Поэтому может сложиться впечатление, что если известна сама траектория, то определение характера движения частицы не представляет особого интереса. Однако это не так, ибо знание характера движения и определение областей в фазовом пространстве, соответ-

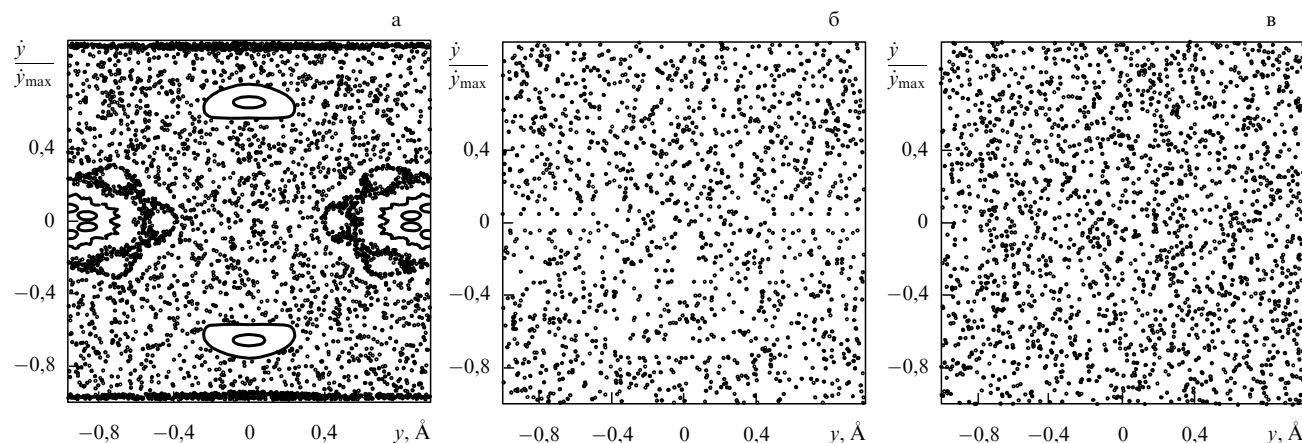


Рис. 14. Сечения Пуанкаре для положительно (а) и отрицательно (в) заряженных частиц, совершающих надбарьерное движение в кристалле кремния вблизи оси $\langle 100 \rangle$; (б) то же для частиц, отраженных от дисков, образующих на плоскости квадратную ячейку

ствующих различным режимам движения, позволяют существенно упростить описание физических процессов, связанных с характером движения (например, процессов многократного рассеяния частиц на цепочках атомов и тормозного излучения).

Действительно, если известно, что частица совершает регулярное движение вдоль одной из кристаллических плоскостей (плоскости (y, x)) при малых углах ψ между ее импульсом и осью цепочек атомов, образующих плоскость, то для нахождения траектории в первом приближении можно воспользоваться приближением непрерывной плоскости — потенциалом решетки, усредненным по координатам данной плоскости [19]:

$$U_p(x) = \frac{1}{L_y} \int_{-\infty}^{\infty} dy U(\mathbf{p}), \quad (4.6)$$

где L_y — линейный размер плоскости вдоль оси y , $U(\mathbf{p})$ — непрерывный потенциал цепочек атомов, образующих плоскость.

В поле (4.6) сохраняются составляющие импульса частицы p_z и p_y , параллельные плоскости (y, z) . В результате приходим к одномерной задаче о движении частицы в периодическом поле кристаллических плоскостей $U_p(x)$. При этом траектория частицы вдоль оси x , ортогональной кристаллической плоскости, определяется уравнением [14, 19–21]

$$\ddot{x} = -\frac{1}{\varepsilon} \frac{\partial}{\partial x} U_p(x), \quad (4.7)$$

решение которого может быть выражено через интеграл энергии поперечного движения по отношению к кристаллическим плоскостям

$$\varepsilon_{\perp p} = \frac{1}{2} \varepsilon \dot{x}^2 + U_p(x). \quad (4.8)$$

Частица в зависимости от значения $\varepsilon_{\perp p}$ может совершать в поле $U_p(x)$ либо финитное (плоскостное каналирование), либо инфинитное движение по отношению к кристаллическим плоскостям, причем такая ситуация возможна как для положительно, так и для отрицательно заряженных частиц. Зная траекторию частицы в поле $U_p(x)$, можно найти, например, характеристики излучения частицы в этом поле, вероятности ее столкновения с ядрами и другие характеристики взаимодействия частицы с атомами решетки.

Однако применимость приближения непрерывного потенциала кристаллических плоскостей (4.6) определяется условиями регулярного движения частицы в периодическом поле цепочек атомов. В некоторых случаях (например, при $\psi \gg \psi_c$) такие условия могут быть получены путем аналитических оценок, исходя из требования наличия корреляций между последовательными столкновениями частицы с цепочками атомов [31, 66]. В общем же случае (в частности, при $\psi \lesssim \psi_c$) требуется численный анализ проблемы с применением метода сечений Пуанкаре. Такой анализ показывает, что для положительно заряженных частиц приближением непрерывной плоскости можно пользоваться для описания движения частиц вдоль некоторых кристаллических плоскостей даже при $\psi \lesssim \psi_c$, но в ограниченной области фазового пространства (рис. 14а). Для отрицательно заряженных частиц такое описание при $\psi \lesssim \psi_c$ невозможно (рис. 14в).

Если же частица движется хаотически в периодическом поле цепочек атомов, то ее столкновения с различными цепочками можно рассматривать как случайные. При этом речь идет о многократном рассеянии частицы на цепочках атомов. Если известно, что данный процесс является случайным, то легко написать уравнение для функции распределения рассеянных частиц по углам. Учитывая, что рассеяние при столкновениях с различными цепочками атомов происходит вдоль азимутального угла φ в плоскости, ортогональной оси цепочек, приходим к следующему уравнению для функции распределения частиц по углам φ на глубине z от поверхности кристалла³:

$$\frac{d}{dz} f(\varphi, z) = nd\psi \int_{-\infty}^{\infty} db [f(\varphi + \varphi(b), z) - f(\varphi, z)], \quad (4.9)$$

где $\varphi(b)$ — функция отклонения частицы в поле отдельной цепочки атомов кристалла (2.21), определяемая прицельным параметром цепочки b .

В уравнении (4.9) предполагается, что элементарным актом, определяющим взаимодействие частицы с решеткой, является столкновение частицы с отдельной цепочкой атомов кристалла.

Функция $f(\varphi, z)$ нормирована условием

$$\int_0^{2\pi} d\varphi f(\varphi, z) = 1. \quad (4.10)$$

При этом решение уравнения (4.9), удовлетворяющее условию $f(\varphi, 0) = \delta(\varphi)$, где $\delta(\varphi)$ — дельта-функция, имеет вид [26]

$$f(\varphi, z) = \frac{1}{2\pi} \sum_{k=-\infty}^{\infty} \cos(k\varphi) \times \exp \left\{ -nd\psi z \int_{-\infty}^{\infty} db [1 - \cos(k\varphi(b))] \right\}. \quad (4.11)$$

Используя решение (4.11), легко найти средний квадрат угла многократного рассеяния частицы на цепочках атомов кристалла

$$\overline{\theta^2} = \int_0^{2\pi} d\varphi f(\varphi, z) 4\psi^2 \sin^2 \frac{\varphi}{2}. \quad (4.12)$$

Эта величина имеет вид

$$\overline{\theta^2} = 2\psi^2 \left\{ 1 - \exp \left[-2nd\psi z \int_{-\infty}^{\infty} db \sin^2 \frac{1}{2} \varphi(b) \right] \right\}. \quad (4.13)$$

Некоторые предельные случаи формул (4.11) и (4.13) рассмотрены в работах [66–69]. Здесь же обратим внимание только на условия применимости этих формул.

Формулы (4.11) и (4.13) справедливы, если столкновение частицы с цепочками атомов кристалла можно

³ Уравнение (4.9) использовано в работах [67, 68] для описания рассеяния положительно заряженных частиц в кристалле при $\psi \lesssim \psi_c$. В [69] показано, что в случае высоких энергий это уравнение справедливо при описании рассеяния в кристалле как положительно, так и отрицательно заряженных частиц при $\psi \gg \psi_c$.

рассматривать как случайные. Это заведомо выполняется, если вся область фазового пространства в сечении Пуанкаре соответствует хаотическому режиму движения. Если в сечении Пуанкаре имеются значительные области, соответствующие регулярному движению, то это может привести к отклонению функции распределения частиц по углам $f(\varphi, z)$ от распределения, даваемого формулой (4.11). При этом для нахождения $f(\varphi, z)$ особое значение приобретают методы численного моделирования движения частицы.

Сравним для примера средние квадраты угла многократного рассеяния частицы на цепочках атомов кристалла $\overline{\theta^2}$, полученные на основе численного моделирования движения частицы в периодическом поле цепочек атомов и на основе формулы (4.11), справедливой в приближении, когда столкновения частицы с различными цепочками можно считать случайными (приближение случайных цепочек). Данное сравнение проводится на рис. 15 для рассеяния в кристалле положительно и отрицательно заряженных частиц [31]. По оси ординат на этом рисунке отложена величина $f = (\overline{\theta^2}/\overline{\theta_{\text{ам}}^2})^{1/2}$, где $\overline{\theta_{\text{ам}}^2} = \varepsilon_s^2 L / \varepsilon^2 L_{\text{рад}}$ — средний квадрат угла многократного рассеяния частиц в аморфной среде, $\varepsilon_s^2 = 4\pi m^2 / e^2$, m — масса электрона, $L_{\text{рад}}$ — радиационная длина [12, 14]; по оси абсцисс отложена величина ψ/ψ_c .

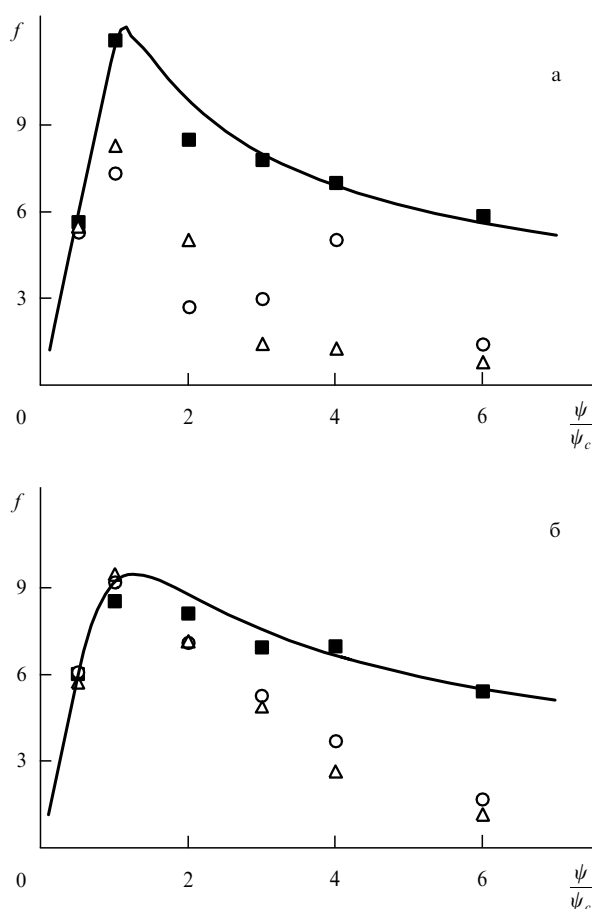


Рис. 15. Ориентационная зависимость среднего квадрата угла многократного рассеяния положительно (а) и отрицательно (б) заряженных частиц на цепочках атомов кристалла кремния, движущихся вблизи оси $\langle 100 \rangle$

Сплошные кривые на рис. 15 соответствуют результатам вычисления $\overline{\theta^2}$ по формуле (4.13) для частиц с энергией $\varepsilon = 30$ ГэВ, движущихся в кристалле кремния толщиной $L = 50$ мкм вблизи оси $\langle 100 \rangle$.

Моделирование проводилось на основе формулы

$$\overline{\theta^2} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N 4\psi^2 \sin^2 \frac{\varphi_i}{2}, \quad (4.14)$$

где N — число частиц, движение которых моделировалось ($N = 200$), φ_i — азимутальный угол рассеяния i -й частицы после ее выхода из кристалла, получаемый численным решением уравнения (2.35), индекс i относится к различным значениям начальных условий (различным значениям прицельного параметра при первом столкновении частицы с цепочкой атомов).

Светлые кружки и треугольники на рис. 15 соответствуют результатам моделирования $\overline{\theta^2}$ при различных ориентациях кристаллографических осей x и y относительно проекции импульса падающей частицы $\mathbf{p}_{\perp}$ на плоскость (x, y) , ортогональную кристаллографической оси z , вблизи которой происходит движение. Темные квадраты — результаты моделирования в случае, когда соседние цепочки атомов сдвинуты в плоскости (x, y) случайным образом друг относительно друга.

Полученные результаты показывают, что $\overline{\theta^2} \gg \overline{\theta_{\text{ам}}^2}$ в широкой области значений углов ψ , причем если столкновения частицы с различными цепочками атомов являются случайными, то результаты моделирования и аналитических вычислений величины f совпадают. Если же движение происходит в периодическом поле цепочек атомов кристалла, то результаты моделирования и аналитических вычислений функции f с использованием формулы (4.13) совпадают только в области углов $\psi \lesssim \psi_c$. Для отрицательно заряженных частиц такое совпадение имеет место в большей области углов ψ , чем для положительно заряженных частиц. Связано это с большей стохастизацией движения отрицательно заряженных частиц в периодическом поле цепочек атомов по сравнению с положительно заряженными частицами.

Значительное расхождение результатов моделирования (светлые кружки и треугольники) и аналитически вычисленных величин f в области $\psi \gg \psi_c$ обусловлено влиянием на рассеяние регулярных режимов движения частицы в периодическом поле цепочек атомов.

Отметим в заключение, что приведенные результаты получены в пренебрежении эффектом некогерентного рассеяния частиц на неоднородностях потенциала кристалла, связанных с тепловым разбросом положений атомов в решетке, а также с рассеянием на электронной подсистеме решетки. Учет этих эффектов приводит к уменьшению областей в фазовом пространстве, которые связаны с регулярным режимом движения. При этом увеличивается область фазового пространства, в которой справедливо описание процесса многократного рассеяния на основе модели случайных цепочек (см. уравнение (4.9)). Учет некогерентных эффектов в рассеянии приводит также к возможности рассеяния частиц не только вдоль азимутального угла φ , но и вдоль полярного.

Учет некогерентных эффектов в рассеянии усложняет задачу о движении частицы в кристалле, и для ее решения особое значение приобретают методы моделирования процесса на ЭВМ.

5. Прохождение заряженных частиц высоких энергий через изогнутый кристалл

5.1. Отклонение положительно заряженных частиц при плоскостном каналировании в изогнутом кристалле

В предыдущем разделе показано, что если быстрая заряженная частица совершает регулярное движение вдоль одной из кристаллических плоскостей, то ее движение определяется, в основном, одномерным непрерывным потенциалом (4.6) кристаллических плоскостей $U_p(x)$, где x — координата частицы, ортогональная кристаллическим плоскостям. Частица в поле непрерывного потенциала кристаллических плоскостей может совершать либо финитное (каналированное), либо инфинитное (надбарьерное) движение по отношению к плоскостям.

Представим себе, что плоскости, оставаясь параллельными друг другу, поворачиваются (рис. 16). Тогда вместе с поворотом канала может испытывать поворот и траектория частицы. Это обстоятельство можно использовать для вывода пучков заряженных частиц высоких энергий из циклических ускорителей, если к ускорителю соответствующим образом присоединить изогнутый кристалл. На этот эффект было обращено внимание в [39].

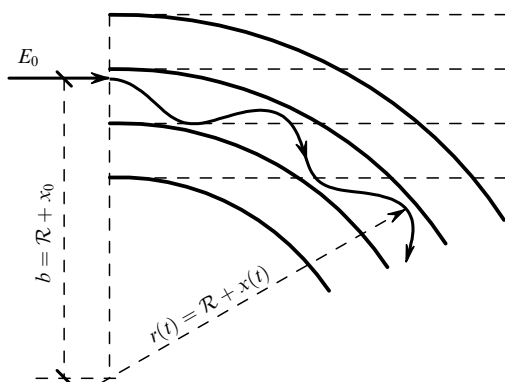


Рис. 16. Поворот положительно заряженной частицы при плоскостном каналировании в поле изогнутых кристаллических плоскостей

Так как средние кристаллические поля значительно превосходят обычно используемые для поворотов пучков внешние магнитные поля, то размеры изогнутого кристалла, применяемого для вывода пучка, будут значительно меньше размеров устройств для выводов пучков с помощью внешних полей (см., например, [40–43]). При этом открываются и другие возможности для управления пучками и их параметрами. К таковым относятся возможность расщепления пучка на несколько пучков [70], устранение гау пучка [71], фокусировка пучка [43] и др. В связи с этим представляет большой интерес изучение прохождения пучков заряженных частиц высоких энергий через изогнутые кристаллы. Этой задаче и посвящены следующие разделы настоящего обзора.

Начнем с вывода уравнений движения изогнутой траектории частицы, движущейся в поле, образованном изогнутыми кристаллическими плоскостями. Для простоты будем считать, что радиус кривизны $\mathcal{R}$ изгиба кристаллических плоскостей одинаков во всех точках искривленной плоскости и достаточно велик, так что

движение происходит в пространственных областях, размеры которых малы по сравнению с $\mathcal{R}$. Движение происходит в цилиндрически-симметричном поле $U_p(r)$, где r — расстояние от центра кривизны, которое можно записать в виде

$$r = \mathcal{R} + x. \quad (5.1)$$

Здесь x представляет собой малое отклонение частицы от кристаллических плоскостей в направлении нормали к поверхности, $|x| \ll \mathcal{R}$.

Чтобы вывести уравнения движения для $x(t)$, удобно воспользоваться релятивистским уравнением Гамильтона–Якоби для действия $S(\mathbf{r}, t)$ частицы, движущейся в поле $U_p(r)$ [46],

$$\left[\frac{\partial}{\partial t} S + U_p(r) \right]^2 = (\nabla S)^2 + m^2. \quad (5.2)$$

Учитывая, что потенциальная энергия является цилиндрически-симметричной функцией r , действие S следует искать в виде

$$S(\mathbf{r}, t) = -Et + M\varphi + f(r), \quad (5.3)$$

где E — энергия частицы, M — ее момент, φ — угол поворота частицы и $f(r)$ — некоторая функция от r . Для $f(r)$ из (5.3) получаем уравнение

$$\left(\frac{df}{dr} \right)^2 + \frac{M^2}{r^2} + m^2 = [E - U_p(r)]^2,$$

откуда находим

$$f(r) = \int dr \sqrt{[E - U_p(r)]^2 - \frac{M^2}{r^2} - m^2}. \quad (5.4)$$

Из соотношения $\partial S / \partial E = \text{const}$ приходим к следующему уравнению для траектории частицы $r(t)$:

$$\left(\frac{dr}{dt} \right)^2 = \frac{[E - U_p(r)]^2 - M^2/r^2 - m^2}{[E - U_p(r)]^2}. \quad (5.5)$$

Входящая в это уравнение величина E представляет собой полную энергию частицы в кристалле. Она связана с энергией падающей на кристалл частицы ε соотношением $\varepsilon = E + U_p(r_0)$, где r_0 — значение координаты r , при котором частица влетает в кристалл. Так как для быстрой частицы $\varepsilon \gg U_p$, то уравнение (5.5) можно упростить:

$$\left(\frac{dr}{dt} \right)^2 \approx \left(\frac{p^2}{\varepsilon^2} - \frac{M^2}{\varepsilon^2 r^2} \right) \left[1 + 2 \frac{U_p(r) + U_p(r_0)}{\varepsilon} \right] - 2 \frac{U_p(r) + U_p(r_0)}{\varepsilon}.$$

Замечая далее, что $M = pb$, где p — импульс частицы и b — прицельный параметр ($b = r_0$), и что $r = \mathcal{R} + x$ и $b = \mathcal{R} + x_0$, где x_0 — точка влета частицы в кристалл (рис. 17), причем $|x| \ll \mathcal{R}$ и $|x_0| \ll \mathcal{R}$, получаем в первом приближении по параметрам $x/\mathcal{R}$ и U_p/ε следующее уравнение для $x(t)$:

$$\left(\frac{dx}{dt} \right)^2 \approx 2 \frac{x - x_0}{\mathcal{R}} - 2 \frac{u(x) + u(x_0)}{\varepsilon}. \quad (5.6)$$

Здесь дано обозначение $u(x) = u_p(\mathcal{R} + x)$.

Уравнение (5.6), в принципе, определяет траекторию частицы $x(t)$ как функцию времени t . Его можно наглядно интерпретировать, если продифференцировать по времени:

$$\frac{d^2x}{dt^2} = -\frac{1}{\varepsilon} \frac{\partial}{\partial x} U_{\text{eff}}(x), \quad (5.7)$$

где

$$U_{\text{eff}}(x) = u(x) - x \frac{\varepsilon}{R}. \quad (5.8)$$

Таким образом, мы видим, что величину $U_{\text{eff}}(x)$ можно рассматривать как эффективную потенциальную энергию частицы, движущейся в искривленном кристалле.

Уравнение (5.7) совпадает с соответствующим результатом, полученным в [72] другим методом.

Входящая в (5.8) величина $u(x)$ представляет собой потенциальную энергию взаимодействия частицы с непрерывным потенциалом кристаллических плоскостей, а $(-x\varepsilon/R)$ — центробежную энергию. На рис. 17 приведены графики функции $U_{\text{eff}}(x)$ для положительно заряженных частиц, движущихся в изогнутом кристалле при различных значениях радиуса кривизны.

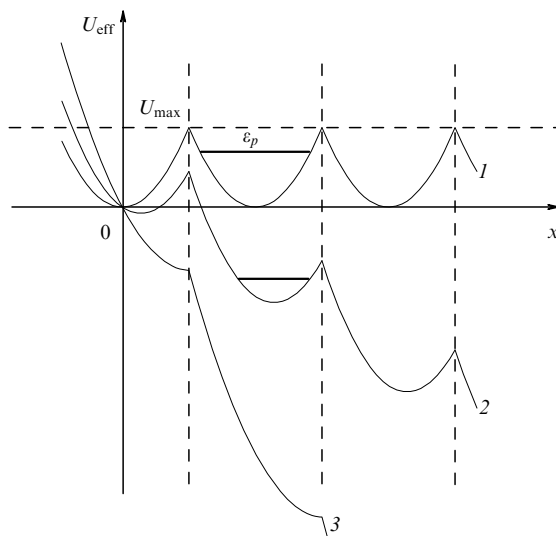


Рис. 17. Эффективная потенциальная энергия (5.8) взаимодействия частицы с непрерывным потенциалом изогнутых кристаллических плоскостей при различных радиусах изгиба: 1 — $R \rightarrow \infty$, 2 — $R > R_c$, 3 — $R < R_c$

При $R \rightarrow \infty$ частица движется в периодическом поле кристаллических плоскостей прямого кристалла. Движение в таком поле, как показано в разделе 4.4, может быть как финитным, так и инфинитным по отношению к кристаллическим плоскостям. Финитное движение реализуется, если энергия поперечного движения $\varepsilon_{\perp p} = 1/2 \varepsilon \theta^2$ мала по сравнению с максимальным значением потенциальной энергии $U_{p, \max}$, где θ — угол между импульсом падающей на кристалл частицы и кристаллической плоскостью. При $\varepsilon_{\perp p} > U_{p, \max}$ частица совершает инфинитное движение по отношению к плоскостям.

Если же движение происходит в изогнутом кристалле и радиус кривизны достаточно велик, то $U_{\text{eff}}(x)$ имеет

отрицательную добавку к потенциальной энергии, которая линейно растет с увеличением x . Это приводит к модификации потенциальной ямы, образованной непрерывным потенциалом кристаллических плоскостей, при которой один из краев результирующей потенциальной ямы уменьшается по отношению к минимальному значению функции $U_{\text{eff}}(x)$ в области потенциальной ямы (кривая 2 на рис. 17). Ясно, что частица в таком поле, как и в случае прямого кристалла ($R \rightarrow \infty$), может совершать финитное движение по отношению к кристаллическим плоскостям. Такое движение возможно, когда поперечная энергия $\varepsilon_{\perp p}$ меньше потенциального барьера в данной задаче. При этом частица будет совершать периодическое движение в канале, образованном потенциалом соседних плоскостей, следуя за изгибом кристаллических плоскостей. В пренебрежении некогерентными эффектами в рассеянии такое движение осуществляется по всей длине кристалла, что приводит к повороту частицы на угол $\theta = L/R$, где L — толщина кристалла. Ясно, что при больших L этот угол может значительно превышать критический угол плоскостного каналирования $\theta_p = \sqrt{2U_{p, \max}/\varepsilon}$. Иными словами, поворот пучка может произойти на угол, значительно превосходящий критический угол плоскостного каналирования.

С уменьшением R глубина потенциальной ямы, образованной $U_{\text{eff}}(x)$, уменьшается и при некотором значении R потенциальная яма полностью исчезает (кривая 3 на рис. 17). Радиус $R = R_c$, при котором потенциальная яма $U_{\text{eff}}(x)$ исчезает, называется критическим радиусом кривизны. При $R < R_c$ финитное движение в поле $U_{\text{eff}}(x)$ невозможно и, следовательно, невозможен и поворот пучка изогнутым кристаллом.

Если за межплоскостной потенциал принять потенциал, определяемый гармоническим осциллятором [21] $u(x) = U_p(4x^2/d_p^2)$, где $|x| \leq (1/2)d_p$ и d_p — расстояние между плоскостями, расположенными при $x = (\pm 1/2)d_p$, то, как легко проверить,

$$R_c = d_p \frac{\varepsilon}{2U_p}. \quad (5.9)$$

Например, в случае протонов с энергией $\varepsilon = 100$ ГэВ, движущихся в изогнутом кристалле кремния вдоль кристаллических плоскостей (110), имеем $U_p \approx 22$ эВ, $d_p \approx 2 \text{ \AA}$ и, следовательно, $R_c \approx 25$ см. При этом $\theta_p = 10^{-5}$ рад. Тогда при $R > R_c$ возможен поворот части частиц пучка на угол $\theta = L/R \gg \theta_p$. Подчеркнем еще раз, что средние поля, действующие на частицу в кристалле, на несколько порядков превосходят стационарные макроскопические внешние поля, которые могут быть созданы физическими установками. Поэтому размеры изогнутого кристалла малы по сравнению с размерами устройств, служащих для отклонения пучка с помощью магнитных полей. Так, например, для поворота тяжелых положительно заряженных частиц с $\varepsilon = 800$ ГэВ на угол $\theta \sim 10^{-3}$ рад необходим изогнутый кристалл кремния толщиной $L = 10$ см и $R = 100$ м, тогда как с помощью магнитов, создающих поле с $B = 1$ кГс, такой поворот можно осуществить установкой длиной в 60 м.

Заметим, что поворот пучков тяжелых отрицательно заряженных частиц также осуществим с помощью изогнутого кристалла, поскольку и в этом случае в изогнутом кристалле может существовать потенциальная яма. Однако в отличие от случая положительно заряженных

частиц для отрицательно заряженных частиц существенны некогерентные эффекты в рассеянии, связанные с тем, что частица может подходить близко к ядрам атомов, образующих кристаллические плоскости. Поэтому эффективность поворота пучка отрицательно заряженных частиц значительно меньше, чем пучка положительно заряженных частиц. До сих пор поворот пучка отрицательно заряженных частиц с помощью изогнутых кристаллов экспериментально не наблюдался, тогда как поворот положительно заряженных частиц не только наблюдался во многих экспериментах [41, 42, 73–86], но и практически использовался для решения ряда задач, таких как вывод пучка из ускорителя, измерение магнитного момента Σ^+ -гиперона [87, 88] и др. (см. обзоры [40, 43]).

5.2. Движение быстрых частиц в поле цепочек атомов изогнутого кристалла

Мы рассмотрели задачу о движении положительно заряженной частицы при плоскостном каналировании в изогнутом кристалле и показали, что при малом изгибе кристалла возможен поворот частиц, совершающих финитное движение. Аналогичная задача возникает и для осевого каналирования, но она гораздо сложнее, чем для плоскостного каналирования. Это связано с тем, что в случае плоскостного каналирования эта задача одномерная, а при осевом каналировании двумерная. Кроме того, сложность задачи с осевым каналированием обусловлена ролью надбарьерного движения частиц. В то время как при плоскостном каналировании надбарьерные частицы не испытывают отклонений в изогнутом кристалле, при осевом они (как показано ниже) отклоняются так же, как и частицы, совершающие финитное движение в поле цепочек атомов, причем оказывается, что основная часть частиц пучка, отклоняемых изогнутым кристаллом, совершает инфинитное движение.

В этом разделе мы рассмотрим надбарьерное движение быстрых заряженных частиц (независимо от знака их заряда) в поле цепочек атомов изогнутого кристалла. Потенциал цепочек атомов считаем непрерывным и зависящим только от расстояния частицы до ближайшей цепочки. (В следующем разделе мы рассмотрим более реалистичскую задачу, в которой наряду с инфинитным возможно также и финитное движение в поле цепочек атомов и, кроме того, учтем некогерентные эффекты в рассеянии.)

Предварительно покажем, что частицы, совершающие надбарьерное движение в поле цепочек атомов, могут испытывать отклонение не только в изогнутом, но и в неизогнутом кристалле.

Действительно, быстрая заряженная частица при падении на кристалл под малым углом ψ к одной из кристаллических осей (оси z) последовательно сталкивается с различными цепочками атомов кристалла, расположенными параллельно этой оси. Рассеяние при столкновении с каждой цепочкой атомов происходит, в основном, вдоль азимутального угла φ в плоскости, ортогональной оси z . Вследствие многократного рассеяния на различных цепочках атомов происходит перераспределение частиц по углам φ . Если угол ψ между импульсом частицы и кристаллографической осью z достаточно мал ($\psi \lesssim \psi_c$), то весьма быстро устанавливается равномерное распределение частиц по углам φ

(см. результаты численного моделирования прохождения быстрых заряженных частиц через кристалл при $\psi \sim \psi_c$ [86]). В результате центр рассеянного пучка будет направлен вдоль кристаллической оси z , т.е. при многократном рассеянии на цепочках атомов происходит поворот оси пучка на угол, равный ψ . Такой поворот пучка возможен как для положительно, так и для отрицательно заряженных частиц [86].

В изогнутом кристалле происходит перераспределение частиц и по азимутальному углу φ относительно текущего направления кристаллической оси, и по полярному углу ψ относительно этой оси. Обратим внимание на некоторые особенности такого рассеяния.

Рассмотрим простейший случай, когда в течение времени взаимодействия частицы с отдельной цепочкой атомов изменение угла ψ между импульсом частицы и осью цепочки мало. Это условие выполняется, если велик радиус кривизны изгиба кристалла. В этом случае процесс рассеяния на каждой цепочке атомов можно рассматривать в приближении $\psi = \text{const}$. Тогда угловые координаты частицы при переходе от одной цепочки атомов к другой будут изменяться согласно следующим рекуррентным соотношениям:

$$\begin{aligned}\theta_{x,i+1} &= \theta_{x,i} \cos \varphi_i + (\theta_{y,i} - \theta_i) \sin \varphi_i, \\ \theta_{y,i+1} &= (\theta_{y,i} - \theta_i) \cos \varphi_i - \theta_{x,i} \sin \varphi_i + \theta_i,\end{aligned}\quad (5.10)$$

где $\theta_{x,i}$ и $\theta_{y,i}$ — угловые координаты частицы в плоскости, ортогональной первоначальному направлению кристаллической оси, перед i -м столкновением с цепочкой атомов, φ_i — азимутальный угол рассеяния частицы при i -м столкновении (φ_i согласно (2.21) определяется полярным углом ψ_i и прицельным параметром цепочки b_i), $\theta_i = L_i/R$ — текущее направление кристаллографической оси, L_i — длина пути, который проходит частица в кристалле перед i -м столкновением, и R — радиус кривизны изгиба кристалла (предполагается, что изгиб осуществляется вдоль оси y). Данные рекуррентные соотношения приведены на рис. 18.

Перейдя в соотношениях (5.10) к переменным $\theta'_{y,i} = \theta_{y,i} - \theta_i$, $\theta'_{x,i} = \theta_{x,i}$, получим рекуррентные соотношения для величин $\theta'_{y,i}$ и $\theta'_{x,i}$, определяющих угловые

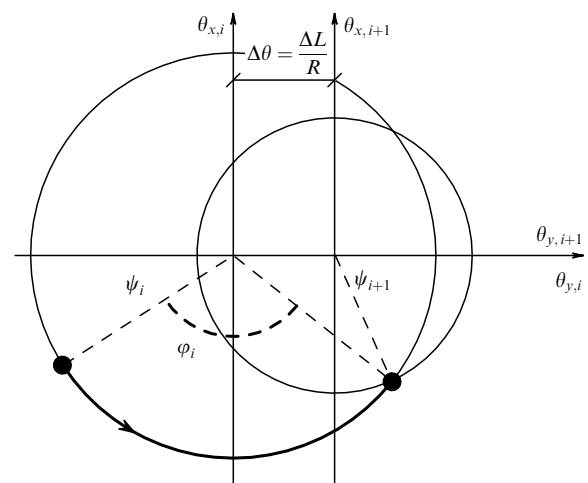


Рис. 18. Изменение угловых координат частицы при ее последовательных столкновениях с цепочками атомов изогнутого кристалла

координаты частицы относительно текущего направления кристаллографической оси [89]:

$$\theta'_{x,i+1} = \theta'_{x,i} \cos \varphi_i + \theta'_{y,i} \sin \varphi_i, \quad (5.11)$$

$$\theta'_{y,i+1} = \theta'_{y,i} \cos \varphi_i - \theta'_{x,i} \sin \varphi_i - \frac{l_i}{\mathcal{R}},$$

$$\psi_i = \sqrt{\theta'^2_{x,i} + \theta'^2_{y,i}}.$$

Здесь приведено также соотношение для ψ_i , связывающее значение угла ψ_i между импульсом частицы и направлением кристаллографической оси при i -м столкновении с угловыми координатами частицы $\theta'_{x,i}$ и $\theta'_{y,i}$. Входящая в (5.11) величина l_i представляет собой длину пути, проходимою частицей между i -м и $(i+1)$ -м столкновением с цепочками атомов, $l_i = L_{i+1} - L_i$.

Соотношения (5.11) могут быть использованы при изучении динамики частицы в изогнутом кристалле и при численном моделировании прохождения частицы через кристалл в этом случае. Движение быстрых частиц в периодическом поле цепочек атомов кристалла может быть как регулярным, так и хаотическим, поэтому в общем случае картина прохождения частиц через кристалл довольно сложна и требует численного моделирования с учетом реальной геометрии расположения цепочек атомов в кристалле. Прежде чем переходить к рассмотрению результатов численного моделирования, остановимся на некоторых аналитических соотношениях, вытекающих из основных рекуррентных формул (5.11), описывающих процесс рассеяния частиц на цепочках атомов изогнутого кристалла [94].

Предположим, что при каждом столкновении с цепочкой атомов устанавливается равномерное распределение частиц по углам φ_i , т.е., что функция распределения частиц по φ_i не зависит от угла φ_i . Произведя усреднение уравнений (5.10) по такому распределению, получим очевидные соотношения

$$\overline{\theta'_{x,i+1}} = 0, \quad \overline{\theta'_{y,i+1}} = \frac{L_i}{\mathcal{R}}, \quad (5.12)$$

где чертой обозначено усреднение по φ_i . Эти соотношения показывают, что при выполнении условия равномерного распределения частиц по углам φ_i центр пучка смещается вдоль изогнутой кристаллической оси. Как показывают результаты численного моделирования в модели бинарных столкновений [86], такое приближение оказывается качественно правильным, если угол ψ между импульсом частицы и кристаллической осью мал по сравнению с критическим углом осевого каналирования ψ_c .

Определим теперь средние значения квадратов углов рассеяния частиц цепочками атомов $\theta'^2_{x,i+1}$ и $\theta'^2_{y,i+1}$ относительно текущего направления кристаллической оси в том случае, когда распределение частиц по углам φ_i равномерное. Возводя первое из соотношений (5.11) в квадрат и усредняя его по φ_i , получаем

$$\overline{\theta'^2_{x,i+1}} - \overline{\theta'^2_{x,i}} = \frac{1}{2} (\overline{\theta'^2_{y,i}} - \overline{\theta'^2_{x,i}}). \quad (5.13)$$

Полагая, что при переходе от одной ячейки к другой величины $\overline{\theta'^2_{x,i+1}}$ и $\overline{\theta'^2_{y,i+1}}$ изменяются слабо, запишем следующее уравнение для $\overline{\theta'^2_{x,i}}$:

$$\frac{d}{di} \overline{\theta'^2_{x,i}} = \frac{1}{2} (\overline{\theta'^2_{y,i}} - \overline{\theta'^2_{x,i}}). \quad (5.14a)$$

Выполнив аналогичные преобразования со вторым уравнением (5.11), получим уравнение для $\overline{\theta'^2_{y,i}}$:

$$\frac{d}{di} \overline{\theta'^2_{y,i}} = -\frac{1}{2} (\overline{\theta'^2_{y,i}} - \overline{\theta'^2_{x,i}}) + \left(\frac{l_i}{\mathcal{R}}\right)^2. \quad (5.14b)$$

Складывая и вычитая уравнения (5.14a) и (5.14b), находим, что

$$\frac{d}{di} \overline{\psi_i^2} = \left(\frac{l_i}{\mathcal{R}}\right)^2;$$

$$\frac{d}{di} (\overline{\theta'^2_{y,i}} - \overline{\theta'^2_{x,i}}) = -(\overline{\theta'^2_{y,i}} - \overline{\theta'^2_{x,i}}) + \left(\frac{l_i}{\mathcal{R}}\right)^2,$$

где $\overline{\psi_i^2} = \overline{\theta'^2_{x,i}} + \overline{\theta'^2_{y,i}}$. Заменяя здесь l_i средней длиной пробега частицы между последовательными столкновениями с цепочками атомов l , которая определяется уравнением [19]

$$\frac{1}{l} = nd \int_{-\infty}^{\infty} db [1 - \cos \varphi(b)], \quad (5.15)$$

и, замечая, что $di \approx dz/l$, получим следующие уравнения для $\overline{\theta'^2_x(z)}$ и $\overline{\theta'^2_y(z)}$:

$$\frac{d}{dz} \overline{\psi^2} = \frac{l}{\mathcal{R}^2}; \quad l \frac{d}{dz} (\overline{\theta'^2_y} - \overline{\theta'^2_x}) = -(\overline{\theta'^2_y} - \overline{\theta'^2_x}) + \left(\frac{l}{\mathcal{R}}\right)^2. \quad (5.16)$$

Полагая, что по порядку величины $l \approx a^2/R\psi_c$, где a — расстояние между цепочками атомов и R — радиус экранировки потенциала атома, находим

$$\overline{\psi^2} \approx \frac{lL}{\mathcal{R}^2}, \quad (5.17a)$$

$$\overline{\theta'^2_y} \approx \overline{\theta'^2_x} + \left(\frac{l}{\mathcal{R}}\right)^2. \quad (5.17b)$$

Согласно соотношениям (5.17) при $l \ll \mathcal{R}\psi_c$ $\overline{\theta'^2_{y,i}} \approx \overline{\theta'^2_{x,i}}$ и при $L \gg l$ средний квадрат угла отклонения частиц относительно конечного направления изогнутой кристаллографической оси (5.17a) много меньше квадрата угла поворота пучка кристаллом $\theta^2 = (L/\mathcal{R})^2$. Иными словами, в рассматриваемом случае реализуется поворот пучка вдоль изгиба кристаллографической оси, при котором флуктуация углов рассеяния частиц пучка мала по сравнению с углом отклонения пучка изогнутым кристаллом:

$$\theta^2 \gg \overline{\psi^2}. \quad (5.18)$$

Подчеркнем, что поворот пучка осуществляется в рассматриваемом случае для частиц, совершающих инфинитное движение по отношению к цепочкам атомов. При этом поворот возможен как для положительно, так и для отрицательно заряженных частиц. Для такого поворота требуется, чтобы выполнялось условие равномерного распределения частиц по углам φ , что, как отмечалось выше, возможно при $\psi \leq \psi_c$. Так как при выходе из кристалла $\psi^2 = \theta'^2_x + \theta'^2_y$, то условие $\psi \leq \psi_c$ можно записать в виде

$$\frac{lL}{\mathcal{R}^2} \leq \psi_c^2. \quad (5.19)$$

Это условие определяет соотношение между L , $\mathcal{R}$ и ε , при которых возможен поворот пучка частиц при их многократном рассеянии на цепочках атомов изогнутого кристалла.

При выводе соотношений (5.12)–(5.19) не использован конкретный закон расположения цепочек атомов кристалла в плоскости, ортогональной кристаллографической оси z . Поэтому соотношениями (5.12)–(5.19) можно пользоваться как при движении частицы в периодическом поле цепочек атомов, так и в случае, когда положения цепочек в поперечной оси z плоскости можно считать случайными. Требуется только, чтобы выполнялось условие равномерного распределения частиц по углам φ при столкновениях с цепочками атомов. Такое распределение оказывается качественно правильным при $\psi \leq \psi_c$. Поскольку при $\psi \leq \psi_c$ основная часть частиц пучка движется хаотически в периодическом поле цепочек, то для рассеяния несуществен конкретный закон расположения цепочек в поперечной плоскости.

Заметим, что условие (5.19) совпадает с аналогичным соотношением, полученным в работе [42] для длины деканализации быстрых частиц в изогнутом кристалле. Однако при решении уравнений (5.17) было использовано соотношение $l \approx a^2/R\psi_c$. Величина же l , согласно (5.15), вообще говоря, является функцией ψ^2 . Поэтому (5.17а) — нелинейное дифференциальное уравнение для $\psi^2(z)$. Случай $l \approx a^2/R\psi_c$ имеет место для потенциала цепочки атомов вида $U(\rho) = U_0(R/\rho)^2$. Для других же функций $U(\rho)$ это решение будет другим. Например, в случае потенциала $U(\rho) = U_0\pi R/2\rho$, который часто используется в теории каналирования, имеем [19] $l = l_0\psi/\psi_c$, $l_0 = 4/\pi^2(1/ndR\psi_c)$ и уравнение для $\psi^2(z)$ принимает вид

$$\frac{d}{dz} \overline{\psi^2} = \frac{l_0}{\mathcal{R}^2} \frac{\sqrt{\overline{\psi^2}}}{\psi_c},$$

где ψ в выражении для $l(\psi)$ заменено на $\sqrt{\overline{\psi^2}}$. Решение имеет вид

$$\overline{\psi^2} = \frac{4}{\psi_c^2} \left(\frac{l_0 L}{\mathcal{R}^2} \right)^2.$$

Легко проверить, что в рассматриваемом случае, как и в случае $l \approx a^2/R\psi_c$, существуют такие значения ε , L и $\mathcal{R}$, при которых выполняются соотношения $\theta^2 \gg \psi^2$ и $\psi^2 \leq \psi_c^2$, т.е. возможен поворот пучка частиц при их многократном рассеянии на цепочках атомов изогнутого кристалла.

Обратим внимание теперь на некоторые особенности движения быстрых заряженных частиц в изогнутом кристалле, обусловленные периодичностью расположения цепочек атомов. С этой целью покажем, что при регулярном движении частиц в кристалле вдоль кристаллографической плоскости рекуррентные соотношения (5.10) переходят в соответствующие результаты теории движения частиц в поле непрерывного потенциала изогнутых кристаллических плоскостей, полученные в предыдущем параграфе. Как и ранее, будем считать, что цепочки атомов образуют в плоскости (x, y) квадратную ячейку, стороны которой направлены вдоль осей x и y .

Заметим предварительно, что при $\psi \gg \psi_c$ характерные значения азимутальных углов рассеяния частицы

цепочкой атомов (2.25) малы по сравнению с единицей $\varphi_{i,\text{eff}} \sim (\psi_c/\psi_i)^2$. При этом, если исходные значения углов $\theta_{x,0}$ и $\theta_{y,0}$ таковы, что $\theta_{x,0} = \psi \gg \psi_c$ и $\theta_{y,0} \leq \psi_c$, частица будет испытывать корреляции при последовательных столкновениях с цепочками атомов, расположенными периодически в плоскостях, параллельных кристаллографической плоскости (x, z) . Разлагая рекуррентные соотношения (5.10) по малым значениям $\varphi_i \ll 1$, имеем в первом приближении

$$\begin{aligned} \theta_{x,i+1} &\approx \theta_{x,i} \approx \psi, \\ \theta_{y,i+1} &\approx \theta_{y,i} - \psi \varphi_i - \frac{l_i}{\mathcal{R}}, \end{aligned} \quad (5.20)$$

где $l_i = a/\psi$, $\psi \gg \psi_c$, a — расстояние между цепочками атомов в плоскости (x, z) .

Таким образом, в рассматриваемом случае сохраняется составляющая скорости частицы вдоль оси x , а движение в поперечном направлении описывается соотношением

$$\theta_{y,i+1} - \theta_{y,i} \approx -\psi \varphi_i - \frac{a}{\psi \mathcal{R}}. \quad (5.21)$$

Величины φ_i при $\psi \gg \psi_c$ определяются формулой (2.25). Входящий в эту формулу интеграл по x можно связать с непрерывным потенциалом кристаллической плоскости $U_p(b_i)$ соотношением

$$\frac{1}{a} \int_{-\infty}^{\infty} dx U_R(\sqrt{x^2 + b_i^2}) = U_p(b_i).$$

Замечая далее, что величины $\theta_{y,i}$ медленно изменяются с i и пропорциональны компоненте скорости частицы $v_{y,i}$ вдоль оси y , приходим к следующему уравнению для величин $v_{y,i}$:

$$\frac{\psi}{a} \frac{d}{di} v_{y,i} = -\frac{1}{\varepsilon} \frac{\partial}{\partial y_i} U_p(y_i) - \frac{1}{\mathcal{R}}.$$

Мы перешли здесь от переменной b_i к переменной $y_i = b_i$. Используя, наконец, соотношение $(a/\psi) di = d\tau_i$, приходим к уравнению

$$\frac{d^2 y}{d\tau^2} = -\frac{1}{\varepsilon} \frac{\partial}{\partial y} U_p(y) - \frac{1}{\mathcal{R}}, \quad (5.22)$$

которое фактически совпадает с соответствующим уравнением (5.7) для частицы, движущейся в непрерывном потенциале изогнутых кристаллических плоскостей. Различие между этими уравнениями состоит только в том, что в (5.7) изгиб осуществляется в сторону меньших значений x , тогда как в (5.22) в сторону больших значений y . Это приводит к различному знаку при центробежном члене ($\sim 1/\mathcal{R}$).

Таким образом, если частица совершает регулярное движение вдоль кристаллической плоскости, то рекуррентные соотношения (5.10) переходят в соответствующий результат (5.7) теории движения частиц в периодическом поле изогнутых кристаллических плоскостей.

5.3. Моделирование прохождения заряженных частиц высоких энергий через изогнутый кристалл

Рекуррентные соотношения (5.11), определяющие связь между угловыми координатами частицы при переходе от

одной цепочки атомов к другой, были проанализированы в предположении, что имеет место равномерное распределение частиц по азимутальному углу φ в плоскости, ортогональной кристаллической оси, вблизи которой движется частица. Однако предположение о равномерном распределении частиц по углам φ можно рассматривать только как качественное. Если не делать предположения о равномерном распределении частиц по углам φ , то исследование рекуррентных соотношений (5.11) требует численного моделирования. Изложим некоторые результаты такого численного моделирования, а также результаты исследования влияния некогерентных эффектов на прохождение быстрых частиц через изогнутый кристалл. Эти эффекты связаны, в основном, с многократным рассеянием проходящих частиц на тепловых колебаниях положений атомов в решетке.

Для выполнения численных расчетов необходимо кроме рекуррентных соотношений (5.10) иметь еще соотношения, связывающие прицельные параметры b_{i+1} и b_i при последовательных столкновениях частицы с цепочками атомов. Легко видеть (рис. 19), что эти величины связаны между собой формулой

$$b_{i+1} = b_i + \left(\frac{\theta_{x,i+1}}{\psi_{i+1}} c_y - \frac{\theta_{y,i+1}}{\psi_{i+1}} c_x \right), \quad (5.23)$$

где c_x и c_y — координаты центров соседней цепочки атомов (относительно цепочки атомов с индексом i), в которую попадает частица после прохождения i -й ячейки. Здесь в пределах элементарной ячейки непрерывный потенциал цепочки атомов предполагается радиально-симметричным.

Так как величины b_i связаны определенным образом с углами φ_i (см. (2.19)), то (5.23) фактически дает возможность установить связь между углами φ_i и φ_{i+1} . После этого рекуррентные соотношения (5.11) могут служить для решения задачи о движении частицы в периодическом поле цепочек атомов изогнутого кристалла. Строго говоря, формулы (5.23) относятся к прямому кристаллу. Но так как изгибание происходит медленно, то ими можно пользоваться также и в случае изогнутого кристалла.

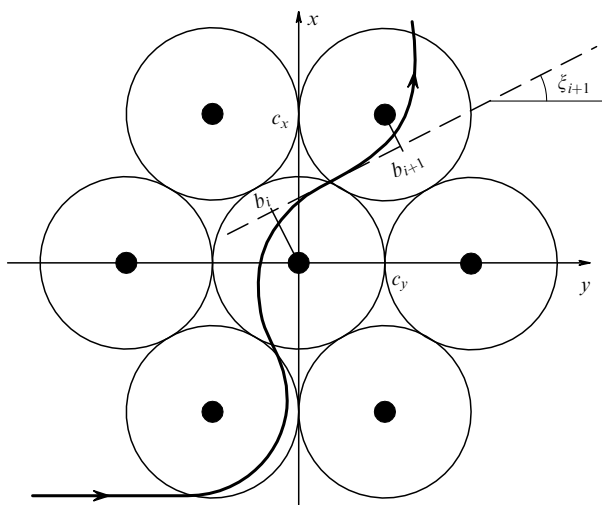


Рис. 19. Прицельные параметры b_i и b_{i+1} при последовательных столкновениях частицы с цепочками атомов ($\xi_{i+1} = \theta_{x,i+1}/\psi_{i+1}$)

В рассматриваемой задаче в качестве элементарного акта взаимодействия частицы с кристаллом выступает ее рассеяние на цепочке атомов кристалла, а не на отдельном атоме, как это происходит в модели бинарных столкновений (см., например, [86]). Поэтому используемый метод дает возможность исследовать прохождение частиц через достаточно толстый кристалл.

Приведем некоторые результаты численных расчетов. На рис. 20 представлены угловые распределения положительно и отрицательно заряженных частиц с энергией $\varepsilon = 300$ ГэВ, проходящих через изогнутый кристалл кремния с радиусом изгиба $R = 10^4$ см для различных толщин кристаллов. Моделирование проводилось для частиц, влетающих в кристалл под малым углом ($\psi \lesssim 0,1 \psi_c$) к кристаллографической оси $\langle 111 \rangle$ при различных значениях прицельного параметра b . Точки на рис. 20 представляют собой результаты моделирования для 100 частиц. Кристалл изгибался вдоль оси y .

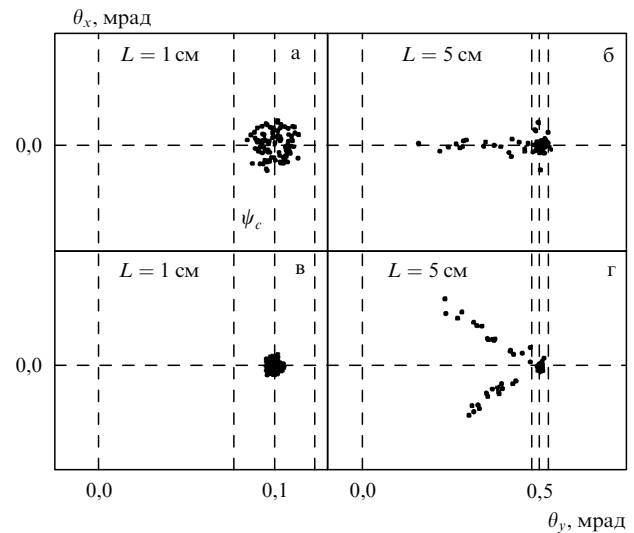


Рис. 20. Угловые распределения отрицательно (а, б) и положительно (в, г) заряженных частиц с энергией $\varepsilon = 300$ ГэВ, проходящих через изогнутый кристалл кремния с $R = 10^4$ см вблизи оси $\langle 111 \rangle$; падающий на кристалл пучок имеет координаты $(\theta_x, \theta_y) = (0; 0)$

Полученные результаты показывают, что при больших радиусах изгиба кристалла пучок может следовать за кристаллографической осью изогнутого кристалла, причем такой поворот пучка возможен как для положительно, так и для отрицательно заряженных частиц. Средние квадраты углов отклонения частиц относительно текущего направления кристаллографической оси в рассматриваемом случае малы по сравнению с квадратом угла поворота пучка, поэтому в соответствии с (5.10) при больших R и малых L весь пучок смещается в направлении кристаллографической оси изогнутого кристалла. Отметим еще раз, что поворот имеет место для частиц, совершающих инфинитное движение по отношению к цепочкам атомов, и обусловлен особенностями многократного рассеяния частиц на этих цепочках.

Результаты моделирования также показывают, что распределения по углам для положительно и отрицательно заряженных частиц различны. Это связано с различием движения в кристалле надбарьерных частиц, обладающих зарядами разного знака. Так, при $\psi \lesssim \psi_c$ некоторая часть положительно заряженных частиц

может совершать регулярное движение вдоль кристаллографических плоскостей (см. рис. 14). Этим частицам на рис. 20 соответствует распределение некоторой части частиц пучка вдоль линий. Для отрицательно заряженных частиц при $\psi \lesssim \psi_c$ регулярное движение не реализуется, поэтому "захвата" таких частиц кристаллическими плоскостями не происходит (рис. 14в). Основная же часть положительно заряженных частиц при $\psi \lesssim \psi_c$ совершает хаотическое движение в поле цепочек атомов кристалла. Механизм поворота этой части частиц пучка такой же, как и отрицательно заряженных частиц.

Обратим внимание на то, что если при переходе от одной ячейки к другой имеет место случайный разброс прицельных параметров (соседние цепочки сдвинуты одна относительно другой случайным образом), то столкновения частицы с различными цепочками атомов можно рассматривать как случайные. Эта модель соответствует так называемому приближению случайных столкновений с цепочками атомов. Первые расчеты прохождения частиц высоких энергий через кристалл по этой модели [89] показали возможность поворота положительно и отрицательно заряженных частиц изогнутым кристаллом при больших радиусах изгиба. Учет при моделировании реальной геометрии расположения цепочек атомов в кристалле [90] подтвердил этот результат. Кроме того моделирование показало, что учет реальной геометрии расположения цепочек атомов в кристалле важен при моделировании движения положительно заряженных частиц, когда возможны захваты частиц в плоскостные каналы.

Обсуждаемые выше результаты получены без учета аксиального каналирования (финитного движения) частиц в поле цепочек атомов и в пренебрежение процессом некогерентного рассеяния частиц в кристалле. Обсудим теперь влияние этих процессов на прохождение частиц высоких энергий через изогнутый кристалл.

Для решения данной задачи была развита усовершенствованная численная модель прохождения частиц через кристалл, которая учитывает реальную геометрию расположения цепочек атомов в кристалле и позволяет единым образом учесть основные динамические и кинетические эффекты [91]. В этой модели для исследования взаимодействия частицы с кристаллом траектория частицы разбивается на совокупность прямолинейных участков, в пределах которых учитываются изменения скорости частицы, связанные с некогерентными эффектами в рассеянии и непрерывным потенциалом цепочек атомов кристалла. Программа численных расчетов, основанная на этой модели, позволяет моделировать прохождение частиц высоких энергий ($\varepsilon \gtrsim 1$ ГэВ) через кристаллы толщиной до нескольких десятков сантиметров.

На рис. 21 представлены некоторые результаты такого моделирования, которое проводилось для пучков положительно и отрицательно заряженных частиц с энергиями $\varepsilon = 300$ ГэВ и $\varepsilon = 10^4$ ГэВ, движущихся в изогнутом кристалле кремния с радиусом изгиба $R = 10^4$ см и $R = 3 \cdot 10^5$ см вдоль оси $\langle 111 \rangle$. Статистика моделирования соответствует 100 частицам. По оси ординат и абсцисс на этом рисунке отложены угловые координаты частиц на выходе из кристалла. Моделирование проводилось для частиц, которые влетают в кристалл вдоль кристаллографической оси $\langle 111 \rangle$. При этом распределение падающих частиц по точкам их влета в кристалл x_0 и y_0 предполагалось равномерным.

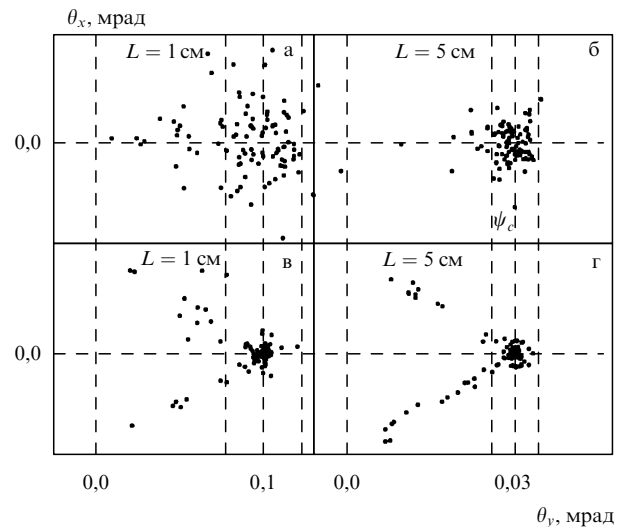


Рис. 21. Угловые распределения отрицательно (а, б) и положительно (в, г) заряженных частиц с энергией $\varepsilon = 300$ ГэВ (а, в) и $\varepsilon = 10^4$ ГэВ (б, г), проходящих через изогнутый кристалл кремния с $R = 10^4$ (а, в) и $R = 3 \cdot 10^5$ см вблизи оси $\langle 111 \rangle$

Полученные результаты показывают, что учет некогерентных эффектов в рассеянии и аксиального каналирования слабо сказывается на картине прохождения частиц через изогнутый кристалл, если средние значения квадрата угла многократного некогерентного рассеяния частиц в кристалле малы по сравнению со средним значением квадрата флуктуации углов рассеяния (5.16), обусловленного изгибом кристалла. Эти результаты также показывают, что при падении пучка на изогнутый кристалл вдоль кристаллографической оси значительные части как положительно, так и отрицательно заряженных частиц пучка могут отклоняться, следуя за изгибом кристаллографической оси, на углы, значительно превосходящие критический угол осевого каналирования (в случае рис. 21б, например, $\theta_y \sim 8\psi_c$).

На рис. 22 представлена зависимость от толщины кристалла доли отрицательно заряженных частиц

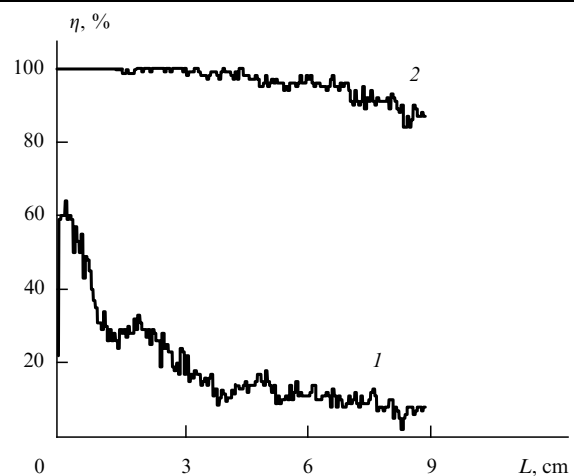


Рис. 22. Зависимость от толщины кристалла L доли отрицательно заряженных частиц, движущихся вдоль изогнутых цепочек атомов кристалла кремния в условиях аксиального каналирования (1) и частиц, отклоненных в интервал углов $\Delta\psi \leq \psi_c$ относительно текущего направления оси (2); $\varepsilon = 10^4$ ГэВ, $R = 3 \times 10^5$ см (рис. 21б)

пучка, движущихся вдоль изогнутой кристаллографической оси в условиях аксиального каналирования (финитного движения в поле одной из цепочек атомов), и частиц, отклоненных в интервал углов $\Delta\theta \lesssim \psi_c$ относительно текущего направления кристаллической оси. Сравнение этих двух кривых показывает, что определяющим механизмом поворота отрицательно заряженных частиц изогнутыми цепочками атомов кристалла является не аксиальное каналирование, а многократное азимутальное рассеяние надбарьерных частиц на цепочках атомов кристалла.

В [90] представлены угловые распределения положительно и отрицательно заряженных частиц с энергией $\varepsilon = 300$ ГэВ после прохождения пучка через изогнутый кристалл кремния при падении частиц под углом $\psi_{in} = \theta_{x,0} = \psi_c$, $\theta_{y,0} = 0$ к оси $\langle 111 \rangle$. Результаты моделирования показывают, что в этом случае для положительно заряженных частиц наряду с частью частиц пучка, которые следуют вдоль изогнутой кристаллической оси, появляется несколько фракций пучка, которые захватываются в плоскостные каналы и отклоняются, следуя изгибам этих плоскостей. В результате падающий пучок расщепляется на несколько разделенных по углам пучков. Для отрицательно заряженных частиц такое расщепление отсутствует.

Таким образом, периодичность расположения цепочек атомов в кристалле оказывает влияние на прохождение через изогнутый кристалл положительно заряженных частиц и не оказывает существенного влияния на прохождение пучка отрицательно заряженных частиц через изогнутый кристалл в области углов падения частиц на кристалл $\psi = \psi_{in}$, равных нескольким критическим углам осевого каналирования ψ_c .

Полученные результаты указывают на новые возможности управления параметрами пучков частиц высоких энергий в ускорителях, а именно, вывод пучков из ускорителей, расщепление пучка на несколько пучков и др. Отметим в заключение, что экспериментально механизм поворота пучка заряженных частиц высоких энергий при их движении вдоль кристаллографической оси изогнутого кристалла до настоящего времени не исследован.

Заключение

В обзоре рассмотрены проблемы, связанные с динамикой заряженных частиц высоких энергий в прямых и изогнутых кристаллах. При этом было показано, что если движение происходит под малым углом к одной из кристаллографических осей, то оно, в основном, определяется непрерывным потенциалом цепочек атомов кристалла, расположенных вдоль этой оси. Непрерывный потенциал естественным образом возникает при исследовании движения в рамках как борновского приближения квантовой электродинамики, так и классической электродинамики. Непрерывный потенциал цепочек атомов кристалла представляет собой сложную периодическую нелинейную функцию двух координат, поэтому задача о движении частицы в таком поле относится к теории нелинейных систем, в которых возможны и регулярный, и хаотический режимы движения. Важной при этом является проблема устойчивости движения. Все эти проблемы возникают как при финитном движении частиц (каналировании), так и при инфинитном (над-

барьерном) по отношению к цепочкам атомов кристалла. Задача о надбарьерном движении частицы в периодическом поле цепочек атомов кристалла может быть связана с задачей о движении частицы в бильярде, помещенном во внешнее поле, и с задачей об упругом рассеянии частицы от трех дисков, расположенных в одной плоскости.

Характер движения частиц в кристалле и условия реализации различных режимов движения весьма важны при выборе приближенных аналитических методов описания взаимодействия частиц с решеткой, в частности, в изогнутом кристалле. Таковыми являются, например, приближение непрерывного потенциала кристаллических плоскостей и приближение случайных столкновений частицы с цепочками атомов.

Приведенные в обзоре аналитические оценки и результаты численного моделирования прохождения частиц высоких энергий через изогнутый кристалл показывают, что при некоторых условиях значительная часть частиц пучка может следовать за изгибом кристаллической оси, вдоль которой пучок падает на кристалл. Такой механизм поворота пучка возможен как для положительно, так и для отрицательно заряженных частиц и обусловлен, в основном, особенностями многократного рассеяния частиц на цепочках атомов изогнутого кристалла. Детальное экспериментальное исследование возможностей этого механизма поворота пучка к настоящему времени отсутствует.

К сожалению, мы не смогли остановиться на многих других проявлениях различных режимов движения в физических процессах, сопровождающих прохождение частиц высоких энергий через изогнутый кристалл, таких, как когерентное излучение в условиях реальной динамики частиц в кристалле [92], влияние многократного рассеяния на процесс когерентного излучения в тонких и в толстых кристаллах [66], резонансное деканалирование [93] и др. Кроме того, здесь не рассматривались также общие теоретические проблемы, относящиеся к теории динамического хаоса, такие как хаос в квантовых системах, мера хаоса, энтропия. Эти понятия, несомненно, связаны с характеристиками пучков частиц, движущихся в кристалле.

Работа выполнена при поддержке Американского физического общества (проекты U661 и U93) и ГКНТ Украины (проект "Хаос").

Список литературы

1. Laue M *Ann.d.Phys.* **41** 971 (1913)
2. Bragg W L *Proc. Cambr. Phil. Soc.* **17** 43 (1913)
3. Williams E K *Dan. Vid. Sel.* **13** 4 (1935)
4. Ferretti B *Nuovo Cimento* **7** 118 (1950)
5. Тер-Микаелян М Л *ЖЭТФ* **25** 296 (1953)
6. Überall H *Phys. Rev.* **103** 1055 (1956); *Z. Naturforsch* **17a** 332 (1962)
7. Fomin S P, Shul'ga N F *Phys. Lett. A* **73** 131 (1979)
8. Neskovic N *Phys. Rev. B* **33** 6030 (1986)
9. Джеймс Р *Оптические принципы дифракции рентгеновских лучей* (М.: ИЛ, 1950)
10. Рязанов М И *Электродинамика конденсированного вещества* (М.: Наука, 1984)
11. Кривоглаз М А *Дифракция рентгеновских лучей и нейтронов в неидеальных кристаллах* (Киев: "Наукова думка", 1983)
12. Тер-Микаелян М Л *Влияние среды на электромагнитные процессы при высоких энергиях* (Ереван: Изд-во АН Арм. ССР, 1969)
13. Coherent radiation Sources (Edit. A.W. Saenz and H. Überall) (Berlin-Heidelberg: Springer-Verlag, 1985)

14. Ахиезер А И, Шульга Н Ф *Электродинамика высоких энергий в веществе* (М.: Наука, 1993)
15. Калашников Н П, Ремизович В С, Рязанов М И *Столкновения быстрых заряженных частиц в твердых телах* (М.: Атомиздат, 1980)
16. Ахиезер А И, Болдышев В Ф, Шульга Н Ф *ЭЧАЯ* **10** 52 (1979)
17. Stark J *Phys. Zs.* **13** 973 (1912)
18. Robinson M T, Oen O S *Phys. Rev.* **132** 2385 (1963)
19. Lindhard J *Dan. Vid. Sel. Mat.-Phys. Med.* **34** (1965); *УФН* **99** 297 (1969)
20. Томпсон М *УФН* **99** 297 (1969)
21. Gemmell D S *Rev. Mod. Phys.* **46** 129 (1974)
22. Тулинов А Ф *УФН* **87** 585 (1965)
23. Барышевский В Г *Каналирование, излучение и реакции в кристаллах при высоких энергиях* (Минск: Изд-во Бел. ГУ, 1982)
24. Оцуки Е-Х *Взаимодействие заряженных частиц с твердыми телами* (М.: Мир, 1985)
25. Базылев В А, Жеваго Н К *Излучение быстрых частиц в веществе и во внешних полях* (М.: Наука, 1987)
26. Кумахов М А, Ширмер Г *Атомные столкновения в кристаллах* (М.: Атомиздат, 1980)
27. Рябов В А *Эффект каналирования* (М.: Энергоатомиздат, 1994)
28. Болотин Ю Л, Гончар В Ю, Трутень В И, Шульга Н Ф *Тезисы 15 Всесоюзного совещания по физике взаимодействия заряженных частиц с кристаллами* (М.: Изд-во МГУ, 1985, с. 71); *Укр. физ. журн.* **31** 14 (1986)
29. Khodyrev V A *Phys. Lett. A* **111** 63 (1985)
30. Ellison J A in: *Local and Global Methods of Nonlinear Dynamics* (Eds. A W Saenz et al.) (Berlin: Springer-Verlag, 1986)
31. Akhiezer A I, Truten' V I, Shul'ga N F *Phys. Rep.* **203** 289 (1991)
32. Шульга Н Ф *Письма ЖЭТФ* **32** 179 (1980)
33. Kimball J C, Cue N *Phys. Rep.* **125** 71 (1985)
34. Барышевский В Г, Тихомиров В В *УФН* **159** 529 (1989)
35. Байер В Н, Катков В М, Страховенко В М *Электромагнитные процессы при высоких энергиях в ориентированных кристаллах* (Новосибирск: Наука, 1989)
36. Akhiezer A I, Shul'ga N F *Phys. Rep.* **234** 297 (1993)
37. Ахизер А И, Шульга Н Ф *Письма ЖЭТФ* **32** 318 (1980); *ЖЭТФ* **85** 94 (1983)
38. Байер В Н, Катков В М, Страховенко В М *Итоги науки и техники. Сер. "Пучки заряженных частиц и твердое тело"* **4** 57 1992; (М.: Изд-во ВИНТИ); *Nucl. Instr. Meth. B* **27** 360 (1987)
39. Tsyganov E N, Fermilab TM-682, TM-684 (Batavia, 1976)
40. Relativistic Channeling Edit. R.A. Carrigan Jr. and J.A. Ellison NATO Asi series B, vol. 165 (N.Y.: Plenum Press, 1987)
41. Moller S P *Crystal channeling or how to built a "1000 tesla magnet" CERN Accelerator school, CERN 94-05* (1994)
42. Bak J F et al *Nucl. Phys. B* **242** 1 (1984)
43. Бирюков В М, Котов В И, Чесноков Ю А *УФН* **164** 1017 (1994)
44. Ахизер А И, Берестецкий В Б *Квантовая электродинамика* (М.: Наука, 1981)
45. Сыщенко В В, Шульга Н Ф *Укр. физ. журн.* **40** (1) 15 (1995)
46. Ландау Л Д, Лифшиц Е М *Теория поля* (М.: Наука, 1973)
47. Ford K W, Wheeler I A *Ann. of Phys.* **7** 259 (1959)
48. Ньютон Р *Теория рассеяния волн и частиц* (М.: Мир, 1969)
49. Shul'ga N F, Truten' V I *Phys. Lett.* **96A** 307 (1983)
50. Шульга Н Ф, Трутень В И, Фомин С П *ЖЭТФ* **87** 250 (1984)
51. Лихтенберг А, Либерман М *Регулярная и стохастическая динамика* (М.: Мир, 1984)
52. Заславский Г М, Сагдеев Р З *Введение в нелинейную физику: От маятника до турбулентности и хаоса* (М.: Наука, 1988)
53. Henon M, Heiles C *Astron J.* **69** 73 (1964)
54. Болотин Ю Л, Гончар В Ю, Инопин Е В и др. *ЭЧАЯ* **20** 878 (1989)
55. Gaspard P, Rice S A J. *Chem. Phys.* **90** 2225 (1989)
56. *Фракталы в физике. Тр. VI Международного симпозиума по фракталам в физике (Триест, Италия, 1985)* (Под ред. Л. Пьетронено и Э. Тозатти) (М.: Мир, 1988).
57. Gaspard P, Rice S A J. *Chem. Phys.* **90** 2255 (1989)
58. Jensen R V *Chaos* **1** 101 (1991)
59. Gaspard P, *Scattering and Resonances: Classical and Quantum Dynamics* (Editrice Compositori-Bologna, 1993, CXIX Corso)
60. Eckhardt B J. *Phys. A* **20** 5971 (1987)
61. Eckhardt B, Jung C J. *Phys. A* **19** L829 (1986)
62. Jung C, Scholz H J J. *Phys.* **20** 3607 (1987)
63. Shul'ga N F, Bolotin Yu L, Gonchar V Yu, Truten' V I *Phys. Lett. A* **123** 357 (1987)
64. Арнольд В И *Математические методы классической механики* (М.: Наука, 1974)
65. Robnik M, Berry M V J. *Phys. A* **18** 1361 (1985)
66. Ахизер А И, Шульга Н Ф *УФН* **151** 385 (1987)
67. Белошицкий В В, Кумахов М А *ФТТ* **15** 1558 (1973)
68. Golovchenko I A *Phys. Rev. B* **13** 4672 (1976)
69. Шульга Н Ф, Трутень В И, Фомин С П *ЖТФ* **52** 796 (1982)
70. Greenenko A A, Shul'ga N F *Nucl. Instr. Meth. B* **90** 179 (1994)
71. Carrigan Jr R A, Dong Chen, Colestock P et al. *Nucl. Instr. Meth. B* **90** 128 (1994)
72. Ellison J A *Nucl. Phys. B* **206** 205 (1982)
73. Elishev A A et al. *Phys. Lett. B* **88** 387 (1979)
74. Sun C R et al. *Nucl. Instr. Meth.* **230** 60 (1984)
75. Андреев В А, Баублис В В, Дамаскинский Е А и др. *Письма ЖЭТФ* **36** 340 (1982); **38** 58 (1984)
76. Афонин А Г и др., Препринт ИФВЭ 87-121 (Протвино, 1987)
77. Галеев Н А и др. *Nucl. Instr. Meth. B* **69**, 247 (1992)
78. Biryukov V M et al. *Nucl. Instr. Meth. B* **86** 245 (1994)
79. Bak J F et al. *Phys. Lett. B* **93** 387 (1980)
80. Moller S P et al. *Phys. Lett. B* **256** 91 (1991)
81. Jensen B N et al. *Nucl. Instr. Meth. B* **71** 155 (1992)
82. Forster J S et al. *Nucl. Phys. B* **318** 301 (1989)
83. Baker S I et al. *Phys. Lett. B* **137** 129 (1984)
84. Gibson W M et al. *Nucl. Instr. Meth. B* **2** 54 (1984)
85. Baker S I et al. *Nucl. Instr. Meth. A* **248** 308 (1986)
86. Andersen S K, Fich O, Schiott H E, et al. *Nucl. Phys. B* **167** 1 (1980)
87. Chen D et al. *Phys. Rev. Lett.* **69** 3286 (1992)
88. Baublis V V, Carrigan Jr R A, Chen D et al. *Nucl. Instr. Meth. B* **90** 112 (1994)
89. Гриненко А А, Шульга Н Ф *Письма ЖЭТФ* **54** 520 (1991); *Nucl. Instr. Meth. B* **67** 212 (1992)
90. Greenenko A A, Shul'ga N F *Nucl. Instr. Meth. B* **90** 179 (1994)
91. Гриненко А А, Шульга Н Ф *Тезисы докладов 24 Межнационального совещания по физике взаимодействия заряженных частиц с кристаллами* (М.: Изд-во МГУ, 1993) с. 21
92. Шульга Н Ф, Трутень В И, Никифоров В И, Кирочкин А Ю Там же, с. 57
93. Похил Г П, Тулинов А Ф, в сб. *Итоги науки и техники. Сер. "Пучки заряженных частиц и твердое тело"* **1** 3 (1990) (М.: Изд-во ВИНТИ)
94. Shul'ga N F, Greenenko A A *Phys. Lett. B* **353** 373 (1995)

DYNAMICS OF HIGH-ENERGY CHARGED PARTICLES IN STRAIGHT AND BENT CRYSTALS

A.I. Akhiezer, N.F. Shul'ga, V.I. Truten', A.A. Greenenko, V.V. Syshchenko

National Science Centre Kharkov Institute of Physics and Technology,
ul. Akademicheskaya 1, 310108 Kharkov, Ukraine
Fax (7-057) 235-17 38. E-mail: kfti@kfti.kharkov.ua

The problems of the dynamics of high-energy charged particles in straight and bent crystals are dealt with. Various methods for describing particle scattering in crystals are considered: the Born approximation, classical electrodynamics, the eikonal approximation. The problems under consideration are encompassed by the theory of nonlinear systems, which takes account of both regular and chaotic motion. Various mechanisms of tunnelling and the motion of particles at energies above that of the barrier, in crystals along one of the crystal axes, are considered. The main focus of attention is on the study of particle motion in bent crystals, which may be used for deflecting high-energy particle beams.

PACS numbers: 03.65.Pm, **03.80.+r**, **05.45.+b**, 65.80.Mk

Bibliography — 94 references

Received 20 January 1995