ОБЪЕДИНЕННЫЙ ИНСТИТУТ ЯДЕРНЫХ ИССЛЕДОВАНИЙ

17 - 13045

ГАВРИЛЕНКО
Григорий Михайлович

СТОХАСТИЧЕСКИЕ ПРОЦЕССЫ ПРИ КАНАЛИРОВАНИИ

Специальность 01.04.02 - теоретическая и математическая физика

Автореферат диссертации на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук

Дубна 1980

Работа выполнена в Лаборатории теоретической физики Объединенного института ядерных исследований.

Научный руководитель -
доктор физико-математических наук
профессор В.К.ФЕДЯНИН

Официальные оппоненты:

доктор физико-математических наук
профессор
член корреспондент АН УССР С.В.ПЕЛЕТМИНСКИЙ

доктор физико-математических наук
профессор Ф.М.КУНИ

Ведущее научно-исследовательское учреждение:

МИАН СССР им. Стеклова, Москва

Автореферат разослан " " ____________ 1980 года.
Защита диссертации состоится " " ________ 1980 года на заседании специализированного Ученого совета К 047.01.01 Лаборатории теоретической физики Объединенного института ядерных исследований, г. Дубна, Московской области.

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке ОИЯИ.

Ученый секретарь Совета
В.И.ЖУРАВЛЕВ

ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

Актуальность проблемы. Использование проекционного формализма Цванцига-Мори /1,2/ для построения замкнутых уравнений относительно функций распределения (или для статистического оператора в случае квантовой механики) является удобным инструментом в изучении неравновесной эволюции открытых систем S, взаимодействующих с большими системами Σ. В динамических системах, где все динамические свойства можно задать посредством гамильтониана H, или же в системах, где динамика на фазовом пространстве микросостояний задается системой уравнений движения в случае негамильтоновой формы механики, проекционные операторы позволяют получить замкнутое, формально точное уравнение относительно рассматриваемой функции или статистического оператора. Коэффициенты полученных в этом случае уравнений явно выражаются через гамильтониан или спектральные характеристики действующих сил. Если удается выделить эффективный малый параметр, составленный из размерных величин, являющихся характерными масштабами измерения физических величин, описывающих проблему, то по нему можно развивать теорию возмущения данного формально точного уравнения и получать приближенные, но физически содержательные уравнения. Это позволяет последовательно развивать теорию в виде теории возмущения, изучая получающиеся уравнения и связанные с ними эффекты в каждом порядке разложения по малому параметру. Основополагающими в этом направлении являются идеи Боголюбова, впервые высказанные в работе /3/. Указанные выше обстоятельства дают возможность сформулировать динамико-статистический микроскопический подход к описанию широкого класса неравновесных явлений, развиваемых на полуфеноменологической основе. Открываются также и новые, не традиционные для статистической механики области исследования, какими являются, например, ядерная физика /4/, физика взаимодействия заряженных высокоэнергетических частиц с веществом /5/ и т.д.

Получающиеся уравнения (для классической механики - это обычно уравнения фоккер-планковского вида) определяются не только динамическими параметрами, как это было указано выше, но и видом условий, налагаемых на полную систему $S+\Sigma$ в начальный момент эволюции. Это проявляется в зависимости от начальных условий проекционных операторов. Поэтому важным моментом в изучении неравновесных процессов в открытых системах является изучение и классификация эволюций при различных ограничениях на классы начальных условий. В свете всего изложенного намечается два актуальных направления исследования:

(i) Изучение и классификация эволюции неравновесной подсистемы, взаимодействующей с большой системой на основе уравнений фоккер-планковского вида, отвечающих различным классам начальных условий. Впервые изучение этой проблемы было начато в работе /6/.

(ii) Поиск новых, не традиционных приложений изложенной выше методологии к изучению неравновесных процессов физических систем, позволяющих построить их микроскопическую теорию.

В этом плане строго динамическая постановка задачи и существование в проблеме малого эффективного параметра, каким

является отношение средней величины трансверсальной составляющей скорости каналируемой частицы к ее продольной компоненте ($\upsilon_\perp/\upsilon_0 = \varepsilon << 1$), открывают уникальную возможность для изучения стохастических процессов, возникающих при движении высокоэнергетической заряженной частицы сквозь кристаллы. На этом пути можно обосновать и уточнить область применения ранее используемых модельных представлений, а также изучать новые физические эффекты. Исследования в данном направлении стимулируются быстрым ростом экспериментальных возможностей физики высоких энергий, а также возможностью использования кристаллов для эффективного формирования и управления пучками высокоэнергетических частиц /7/.

По этим двум направлениям и проводились исследования, результаты которых изложены в диссертации.

<u>Цель работы</u>. Исследование неравновесной эволюции S-системы, слабо связанной с термостатом (Σ-система). Разработка динамико-статистического подхода к исследованию неравновесных стохастических процессов, возникающих при каналировании.

<u>Научная новизна и практическая ценность</u>. В диссертации впервые получено в явном виде уравнение для описания неравновесной релаксации слабо связанной с трансляционно-инвариантным термостатом системы. Изучены предельные случаи эволюции при $t\to\infty$. Разработано модельное представление интеграла столкновений через корреляционные функции Ван-Хова /8/.

Разработан новый динамико-статистический подход для описания движения высокоэнергетических заряженных частиц сквозь кристалл. Эта техника может быть использована как на пути дальнейшего исследования разложений по малому параметру и выяснению связанных с ними эффектов, так и для изучения наблюдаемых в эксперименте измеряемых величин в уже рассмотренных приближениях.

Впервые в $o(\varepsilon^2)$ -приближении последовательно изучены стохастические процессы, управляющие изменением функции распределения частиц в зависимости от глубины проникновения ее в кристалл и отвечающие двум различным реализациям фазового пространства состояний частицы: $\{S_\perp = \vec{R}_\perp, \vec{V}_\perp\}$ - набор поперечных координат и скоростей каналируемой частицы; $E_\perp$ - набор поперечной энергии каналируемой частицы, эволюционный параметр z - глубина проникновения частицы в кристалл. Им соответственно отвечают распределения $f(z, S_\perp)$, $g(z, E_\perp)$.

На базе полученных результатов удалось впервые показать, что на определенных глубинах проникновения в кристалл наступает равновесное "z-стационарное" распределение частиц (в рамках рассмотренного $o(\varepsilon^2)$-приближения), которое не зависит от начального распределения частиц на входе в кристалл и полностью определяется термодинамическим состоянием кристалла и характером взаимодействия каналируемых частиц с ионами решетки. Тенденция к данному равновесному распределению приводит к формирующему влиянию кристаллов на пучки каналируемых заряженных частиц, что указывает на возможность использования кристаллов для формирования пучков заряженных энергетических частиц.

Следующие результаты выдвигаются для защиты:

I. Получение немарковского уравнения, описывающего релаксацию слабо связанной с трансляционно-инвариантным термостатом системы, которому функция Максвелла удовлетворяет тождественно для всех t.

2. Представление интеграла столкновений через функции Ван-Хова.

3. Разработанные в диссертации методы и полученные уравнения для описания стохастических процессов, возникающих при каналировании.

4. Получение представления „continuum“ потенциала Линдхарда через термодинамические характеристики кристалла, затравочное взаимодействие каналируемой частицы с ионом кристалла и индексы Миллера, задающие направление каналирования.

5. Анализ и отличительные черты формирующего влияния кристаллов на пучки каналируемых высокоэнергетических легких и тяжелых ионов.

Апробация работы. Результаты диссертации докладывались на IX Всесоюзном совещании по физике взаимодействия заряженных частиц с веществом (Москва, 1979), на семинарах ЛТФ ОИЯИ, 4 школе молодых ученых ЕрФИ (1979), семинаре Математического института АН СССР им. Стеклова.

Публикации. По результатам диссертации опубликовано шесть статей.

Объем работы. Диссертация состоит из введения, трех глав, заключения, четырех приложений. Объем диссертации 115 страниц машинописного текста. Список библиографии содержит 125 наименований.

СОДЕРЖАНИЕ РАБОТЫ

Во введении дан кратикий исторический обзор развития метода проекционных операторов и построение уравнений типа Фоккера-Планка для описания эволюции подсистемы. Отмечены широкие его возможности применения к описанию неравновесной релаксации физических систем. Обрисованы возникающие в этой связи задачи. Указано, какие аспекты этой общей проблемы исследуются в диссертации. Кратко изложено содержание диссертации.

В первой главе исследуются процессы, возникающие в динамической системе S, слабо взаимодействующей с трансляционно-инвариантным термостатом при классе начальных условий $S+\Sigma$ системы, задаваемых соотношением

$$\mathcal{D}(tS\Sigma)_{t=0} = \mathcal{D}_0(S\Sigma)\, f(0S) \Big/ \int (d\Sigma)\, \mathcal{D}_0(S\Sigma), \tag{I}$$

где $\mathcal{D}_0(S\Sigma)$ – распределение Гиббса для $S+\Sigma$ системы, $f(0S)$ – произвольная функция.

В § I изложен общий формализм получения замкнутых уравнений для функции $f(tS)$. Относительно этой функции получено формально точное замкнутое уравнение.

В § 2 рассматривается $o(\varepsilon^2)$-аппроксимация по константе связи полученного точного уравнения при начальных условиях (I).

В § 3 данное уравнение выводится в явном виде в случае трансляционно-инвариантного термостата. Полученное уравнение имеет вид: $\frac{\partial}{\partial t} f(tS) = -\vec{V}\cdot\vec{\nabla}_R f(tS) + \frac{1}{M}\vec{\nabla}_V\cdot\vec{G}(t\, f(\tau S))$,

$$\vec{G}(t\, f(\tau S)) = \frac{\rho}{(2\pi)^3\theta}\int_0^t d\tau \int d\vec{K}\, \vec{K}\, \nu^2(K) \exp[i\vec{K}\cdot\vec{R}] \times R_{KK'}(T) \exp[T\Lambda(S)] \exp[-i\vec{K}\cdot\vec{R}]\, \vec{K}\cdot\Big[\vec{V} + \frac{\theta}{M}\vec{\nabla}_V\Big] f(\tau S), \quad \rho = \frac{N}{\Omega}, \tag{2}$$

N – число частиц в термостате, Ω – его объем, $T = t-\tau$,

$\Lambda(S) = [H(S), \ldots]$, $\Lambda(\Sigma) = [H(\Sigma), \ldots]$,

$$R_{KK}(T) = \Big\langle \exp(-i\vec{K}_1\cdot\vec{z}_1) \exp(T\Lambda(\Sigma)) \sum_{j=1}^{N} \exp[+i\vec{K}\cdot\vec{z}_j] \Big\rangle_\Sigma ,$$

$H(\Sigma)$, $H(S)$ – гамильтонианы соответствующих систем, $[\cdot\cdot, \cdot]$ – классические скобки Пуассона, θ – температура термостата, M – масса частицы S-системы, $\langle\ldots\rangle_\Sigma$ – усреднение по распределению Гиббса для кристалла.

В § 4 исследуется марковский предел уравнения (2).

В § 5 развивается модельное представление интегралов столкновений типа $\vec{G}(t\, f(\tau S))$ через функции Ван-Хова [8]. Полученному уравнению, несмотря на его немарковский вид, функция распределения Максвелла удовлетворяет тождественно для всех t. Оно описывает релаксацию слабо возмущенной системы к этому распределению.

Вторая глава посвящена развитию динамико-статистического подхода к описанию движения быстрых заряженных частиц сквозь кристалл [5].

В § I описана постановка задачи и некоторые необходимые предварительные сведения.

В § 2 получено замкнутое формально точное уравнение для описания изменения функции распределения числа частиц $f(zS_\perp)$ в плоскости фазовых переменных $S_\perp$ в зависимости от глубины проникновения числа частиц в кристалл z.

В § 3 сформулирована теория возмущения по $\varepsilon = v_\perp/v_0$ и изучено $o(\varepsilon)$-приближение данного уравнения. Установлена его эквивалентность с „*continuum potential*" моделью Линдхарда [5].

В § 4 получено $o(\varepsilon^2)$-приближение, учитывающее процессы обмена энергией между кристаллом и каналируемой частицей. Уравнение для $f(zS_\perp)$ в этом приближении имеет вид:

$$\frac{\partial}{\partial(z)} f(zS_\perp) = \frac{1}{V_0}\Big[-\vec{V}_\perp\cdot\vec{\nabla}_{R_\perp} + \Big\langle \sum_{j=1}^{N} \vec{\nabla}_{R_\perp} \overline{U(R-Z_j)} \Big\rangle_\Sigma \cdot \frac{1}{M}\vec{\nabla}_{V_\perp}\Big] f(zS_\perp) + \frac{1}{MV_0^2\Omega^2}\int_0^z d\tau\, \vec{\nabla}_{V_\perp}\cdot \sum_{K_\perp K'_\perp} i\vec{K}\, \nu(K_\perp)\nu(K'_\perp) \exp[i(\vec{K}_\perp + \vec{K}'_\perp)\cdot\vec{R}_\perp] \times \Big[\Phi_{KK'}(T)\frac{i\vec{K}}{M}\cdot\vec{\nabla}_{V_\perp} + \frac{1}{\theta}\frac{\partial}{\partial T}\Phi_{KK'}(T)\Big] f(\tau S_\perp), \tag{3}$$

где $T = \frac{z-\tau}{V_0}$, черта над функцией означает осреднение по z.

$$\overline{f(\dots)} = \lim_{T\to\infty} \frac{1}{T}\int_0^T dz\, f(\dots),$$

$$\Phi_{kk'}(\tau) = \left\langle \sum_{j=1}^{N} \exp\left[-i\vec{K}_\perp\cdot\vec{z}_j^{\,\perp}\right] \exp(\tau\Lambda(\Sigma)) \sum_{j=1}^{N} \exp\left[i\vec{K}_\perp'\times\vec{z}_j^{\,\perp}\right]\right\rangle_\Sigma - \left\langle \sum_{j=1}^{N} \exp\left[-i\vec{K}_\perp\cdot\vec{z}_j^{\,\perp}\right]\right\rangle_\Sigma \left\langle \sum_{j=1}^{N} \exp\left[-i\vec{K}_\perp'\cdot\vec{z}_j^{\,\perp}\right]\right\rangle_\Sigma .$$

В § 5 изучено асимптотическое представление уравнения (3) при $z\to\infty$. Продемонстрировано действие диссипативного фононного механизма, обуславливающего релаксацию $f(z\,S_\perp)$ к "z-стационарному" распределению. Показано, что при $z\to\infty$ уравнение (3) трансформируется в уравнение вида

$$\frac{\partial}{\partial z} f(z\,S_\perp) = \frac{1}{V_0}\left[-\vec{V}_\perp\cdot\vec{\nabla}_{R_\perp} + \hat{P}_0 P_0(S_\perp\Sigma)\,\overline{\Lambda^{\perp}_{S\Sigma}}\right] f(z\,S_\perp) + Q(f(z\,S_\perp)), \quad Q(f(z\,S_\perp)) = \frac{1}{MV_0^2}\int_0^z d\tau\, \vec{\nabla}_{V_\perp}\cdot\langle\vec{F};\vec{F}(\tau)\rangle \times \left[\frac{1}{M}\vec{\nabla}_{V_\perp} + \frac{1}{B}\vec{V}_\perp\right] f(\tau\,S_\perp), \tag{4}$$

где

$$\hat{P}_0 = \int (d\Sigma)\dots, \quad P_0(S_\perp\Sigma) = \exp\left[-\frac{1}{B}\sum_{j=1}^{N}\overline{U(\vec{R}-\vec{z}_j)}\right] \times \mathcal{D}_0(\Sigma) \Big/ \left\langle \exp\left[-\frac{1}{B}\sum_{j=1}^{N}\overline{U(\vec{R}-\vec{z}_j)}\right]\right\rangle_\Sigma ,$$

$\mathcal{D}_0(\Sigma)$ – распределение Гиббса для кристалла.

$$\langle\vec{F};\vec{F}(\tau)\rangle = \hat{P}_0 \sum_{j=1}^{N} \overline{U(\vec{R}-\vec{z}_j)} \exp[\tau\Lambda(\Sigma)]\, P_0(S_\perp\Sigma) \times \left[\sum_{j=1}^{N}\vec{\nabla}_{R_\perp}\overline{U(\vec{R}-\vec{z}_j)} - \hat{P}_0 P_0(S_\perp\Sigma)\sum_{j=1}^{N}\vec{\nabla}_{R_\perp}\overline{U(\vec{R}-\vec{z}_j)}\right].$$

В § 6 найдено равновесное, "z-стационарное" решение (4), обсуждены формирующее действие кристалла на пучки каналируемых частиц, отличительные черты этого формирующего воздействия на пучки каналируемых тяжелых и легких ионов.

В третьей главе строится марковская аппроксимация разобранного во второй главе стохастического процесса.

В § I получен марковский аналог уравнений (2)-(3) в $o(\varepsilon^2)$-приближении.

В § 2 делается функциональная замена переменных и в описании от функции $f(z\,S_\perp)$ – к $g(z\,E_\perp)$ описанию. Обобщается схема Хакена /9/.

В § 3 исследуется уравнение для $g(z\,E_\perp)$ в $o(\varepsilon^2)$-приближении, получены уравнения, отличающиеся от уравнения типа Линдхарда диффузионного вида наличием членов чисто термодинамического характера, пропорциональных $\frac{1}{B}$. Рассмотрен предел больших z.

В § 4 полученное в §3 уравнение применяется к описанию каналирования ионов, характеризующихся короткодействующей $U(\vec{R})$ /I0/. Построен пропагатор данного уравнения, выписаны его решения.

В § 5 обсужден физический смысл интеграла столкновений полученных уравнений.

В Заключении приведена краткая сводка полученных результатов.

В Приложения I,2,3,4 вынесены вопросы, необходимые для последовательного и логического изложения содержания диссертации, но требующие громоздких математических вычислений. В приложениях I,2 обсуждается „continuum potential" Линдхарда для осевого и плоскостного каналирования, его связь с индексами Миллера, которыми задается направление каналирования. В приложении 3 выводятся некоторые вспомогательные формулы. В приложении 4 устанавливается принцип ослабления корреляции для определенного вида корреляционных функций по кристаллу.

Основные результаты, полученные в диссертации

1. Получено уравнение, описывающее релаксацию слабо связанной с термостатом системы для определенного класса начальных условий.

2. Развито полуфеноменологическое представление интеграла столкновения через функции Ван-Хова.

3. Развита последовательная схема динамико-статистического описания движения быстрых заряженных частиц сквозь кристаллы. Изучены $o(\varepsilon)$, $o(\varepsilon^2)$-приближения уравнения для функции $f(z\,S_\perp)$. Найдено представление „continuum" потенциала через индексы Миллера направления каналирования.

4. Показано, что учет обмена энергией между пучком частиц и кристаллом приводит к уравнениям типа Фоккера-Планка для $f(z\,S_\perp)$. Проиллюстрировано действие диссипативного фононного механизма, обуславливающего релаксацию $f(z\,S_\perp)$ к "z -стационарному" распределению.

5. Изучены качественно отличительные черты формирующего фононного механизма на пучки тяжелых и легких ионов.

6. Построена марковская аппроксимация данных стохастических процессов. Построено их $E_\perp$, z -представление. Изучены фоккер-планковские уравнения $o(\varepsilon^2)$ -приближения этого представления. Найдены некоторые решения этих уравнений, описывающие процесс "z -релаксации".

Результаты диссертации опубликованы в работах:

Г.М.Гавриленко, В.К.Федянин. Препринт ОИЯИ, Р17-11948, Дубна, 1978;
V.K.Fedyanin, G.M.Gavrilenko. Physica A, v. 99, No.1,1979.
V.K.Fedyanin, G.M.Gavrilenko. Preprint JINR, E17-12025, Dubna, 1978.

Г.М.Гавриленко, В.К.Федянин. ДАН СССР, 1978, т.245, № 5, с. 1091.

Г.М.Гавриленко, В.К.Федянин. Препринт ОИЯИ, Р17-12214, Дубна, 1978.

Г.М.Гавриленко, В.К.Федянин. Препринт ОИЯИ, Р17-12215, Дубна, 1978.

Г.М.Гавриленко, В.К.Федянин. Препринт ОИЯИ, Р17-12599, Дубна, 1979;
V.K.Fedyanin, G.M.Gavrilenko. Phys.Lett. v. 73 A, No.5,6, p. 420, 1979.

Г.М.Гавриленко, В.К.Федянин. Предварительная программа и тезисы докладов X совещания по проблемам применения пучков заряженных частиц для изучения состава и свойств вещества. Издательство МГУ, 1979.

Литература

1. Zwanzig R. Phys.Rev., 1961, v. 124, p. 983.
2. Mori H. Progr.Theor.Phys., 1965, v. 34, p. 395.
3. Боголюбов Н.Н. Избр.:Труды в трех томах. "Наукова думка", 1974.
4. Harp G.D., Miller J.M. Phys.Rev., 1971, C3, p. 1847.
5. Lindhard J., Dan Vidensk K. Selsk.Mat.Pys.Medd., 1965, v. 39, No. 14.
6. Bogolubov N.N. Communication JINR, E17-10514, Dubna, 1977.
7. Elishev A.F., Filatova N.A. et al. Preprint JINR, D1-12716, Dubna, 1979.
8. Van Hove L, Physica., v. 24, 404 (1958).
9. H.Haken, Rev.Mod.Phys., v.47, 67 (1975).
10. M.W.Thompson. Contempt.Phys. v. 9, 378 (1968).

Рукопись поступила в издательский отдел
27 декабря 1979 года.