

ОБЪЕДИНЕННЫЙ  
ИНСТИТУТ  
ЯДЕРНЫХ  
ИССЛЕДОВАНИЙ  
ДУБНА

G-124

14/2-79

P17 - 12214

Г.М.Гавриленко, В.К.Федянин

1807/2-79

ДВИЖЕНИЕ БЫСТРЫХ ЗАРЯЖЕННЫХ ЧАСТИЦ

СКВОЗЬ КРИСТАЛЛ

В АДИАБАТИЧЕСКОМ ПРИБЛИЖЕНИИ

I. Осевое каналирование

1979

P17 - 12214

Г.М.Гавриленко, В.К.Федянин

ДВИЖЕНИЕ БЫСТРЫХ ЗАРЯЖЕННЫХ ЧАСТИЦ  
СКВОЗЬ КРИСТАЛЛ  
В АДИАБАТИЧЕСКОМ ПРИБЛИЖЕНИИ  
I . Осевое каналирование

Направлено в *"Physica Scripta"*

Гавриленко Г.М., Федянин В.К.

P17 - 12214

Движение быстрых заряженных частиц сквозь кристалл  
в адиабатическом приближении. I. Осевое каналирование

В подходе, основанном на рассмотрении эволюции малых подсистем, находящихся в динамическом контакте с термостатом, рассмотрено движение энергетических заряженных частиц сквозь кристалл в адиабатическом приближении. Получены уравнение для одночастичной функции распределения каналируемой частицы, траектория каналируемой частицы в этом приближении при достаточно малых углах падения к кристаллографической оси. Обсуждены пределы классического описания этого явления. Рассмотрен случай осевого каналирования.

Работа выполнена в Лаборатории теоретической физики ОИЯИ.

Препринт Объединенного института ядерных исследований, Дубна 1979

Gavrilenko G.M., Fedyanin V.K.

P17 - 12214

Motion of Fast Charged Particles Through a Crystal  
in the Adiabatic Approximation. I. Axial Channeling

The energetic charged particle motion through a crystal is considered within the adiabatic approximation using the approach based on the consideration of the evolution of a small subsystem weakly interacting with the thermostat. The equation for the one-particle distribution function is obtained in this approximation. The trajectory of channeling particle with the quite small incoming angle to the crystal axes and the validity of the classical description of channeling are studied. The case of axes channeling is considered here.

The investigation has been performed at the Laboratory of Theoretical Physics, JINR.

Preprint of the Joint Institute for Nuclear Research. Dubna 1979

В работе <sup>1/</sup> был предложен подход к описанию движения быстрых частиц сквозь кристалл, в котором основой теоретического исследования являлась одночастичная функция распределения  $f(z, V_z, S_{\perp})$  для падающей на кристалл частицы. В настоящей работе исследуется полученное в <sup>1/</sup> замкнутое, но формальное уравнение в адиабатическом приближении, суть которого будет пояснена ниже.

Уравнение для  $f(z, V_z, S_{\perp})$  по <sup>1/</sup>

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial z} f(z, V_z, S_{\perp}) &= \frac{V_z}{V_z} \dot{V}_R f(z, V_z, S_{\perp}) \dots \frac{\partial}{\partial z} \sum_{j=1}^N U(R - r_j) \Sigma \cdot \frac{1}{V_z} \cdot \\ &= \frac{1}{M} \frac{\partial}{\partial V_z} f(z, V_z, S_{\perp}) \cdot \frac{1}{V_z} \sum_{j=1}^N \dot{V}_R U(R - r_j) \cdot \frac{1}{M} \dot{V}_V f(z, V_z, S_{\perp}) \cdot \\ &= \frac{1}{V_z} \int d(\Sigma) \sum_{j=1}^N \dot{V}_R U(R - r_j) \frac{1}{M} \dot{V}_V \Lambda(z, V_z, S_{\perp}, \Sigma). \end{aligned} \quad /1/$$

где  $\Lambda(z, V_z, S_{\perp}, \Sigma)$  определялось формулой

$$\Lambda(z, V_z, S_{\perp}, \Sigma) = f(z, V_z, S_{\perp}, \Sigma) - f(z, V_z, S_{\perp}) D_0(\Sigma) \quad /2/$$

/все обозначения даются по <sup>1/</sup> /.

Предположим, что за время пролета частицы сквозь кристалл состояние кристаллической подсистемы не изменилось.

Тогда полную функцию распределения всей системы естественно искать в виде:

$$f(z, V_z, S_{\perp}, \Sigma) = f(z, V_z, S_{\perp}) D_0(\Sigma) \quad /3/$$

где  $D_0(\Sigma)$  - распределение Гиббса для кристалла.

Из /3/ следует, что  $\ln f(z, V_z, S_{\perp}, \Sigma) = 0$ , и уравнение /1/, дополненное рецептом вычисления равновесных средних  $\dots \Sigma$ , становится замкнутым относительно функции  $f(z, V_z, S_{\perp})$ :

$$\frac{\partial}{\partial z} f(z, V_z, S_{\perp}) = \frac{V_{\perp}}{V_z} \frac{\partial}{\partial V_z} f(z, V_z, S_{\perp}) + \frac{1}{V_z} \sum_{i=1}^N \frac{\partial}{\partial z} U(R_i, r_i) \Sigma \quad /4/$$

$$\times \frac{1}{M} \frac{\partial}{\partial V_z} f(z, V_z, S_{\perp}) + \frac{1}{V_z} \sum_{i=1}^N \frac{\partial}{\partial z} U(R_i, r_i) \Sigma + \frac{1}{M} \frac{\partial}{\partial V_z} f(z, V_z, S_{\perp})$$

Уравнение /4/ еще нельзя рассматривать как уравнение "z-эволюции" функции  $f(z, V_z, S_{\perp})$ , т.е. нельзя считать, что /4/ определяет некий стохастический "z-процесс" на фазовом пространстве событий  $S_{\perp}, V_z$ . Это обусловлено несохранением нормировки функции распределения  $f(z, V_z, S_{\perp})$ :

$$\int dV_z dS_{\perp} f(z, V_z, S_{\perp}) = \phi(z). \quad /5/$$

В справедливости /5/ можно убедиться, если непосредственно интегрировать /4/ по  $V_z, S_{\perp}$ . Этот факт является следствием первоначальной нормировки полной функции распределения  $f(z, V_z, S_{\perp}, \Sigma)$ . Чтобы прийти к уравнению, описывающему "z-эволюцию" малой подсистемы, сузим фазовое пространство событий:  $V_z, S_{\perp} \rightarrow S_{\perp}$ . Для этого будем считать, что зависимость  $f(z, V_z, S_{\perp})$  от  $V_z$  полностью определяется эволюционным, детерминированным параметром  $z$  и стохастическими переменными  $S_{\perp}$ , т.е.  $V_z$  является не независимой переменной, а наблюдаемой "z-эволюционного" процесса на фазовом пространстве событий  $S_{\perp}$ . Отсюда имеем:

$$\frac{\partial}{\partial z} f(z, V_z, S_{\perp}) = \frac{d}{dz} f(z, V_z, S_{\perp}) = \frac{\partial}{\partial V_z} f(z, V_z, S_{\perp}) \frac{\partial V_z}{\partial z} \quad /6/$$

Подставляя /6/ в левую часть уравнения /4/ и приравнявая коэффициенты при членах  $\frac{\partial}{\partial V_z} f(z, S_{\perp})$ , получим уравнение на  $\frac{\partial}{\partial z} V_z$ :

$$\frac{\partial}{\partial z} V(z) = - \left\langle \sum_{j=1}^N \frac{\partial}{\partial z} U(\dot{R}_j - \dot{r}_j) \right\rangle \frac{1}{V_z M} \quad /7/$$

или

$$V_z(S_{\perp}) = \sqrt{(V_0)^2 - \frac{2}{M} \int_0^z \left\langle \sum_{j=1}^N \frac{\partial}{\partial r} U_r(\dot{R}_j - \dot{r}_j) \right\rangle dr} \quad /8/$$

Аналогичные соображения сокращения описания были использованы Боголюбовым для перенормировки теории возмущения и устранения "секулярной" зависимости от времени в работах по кинетической теории <sup>22</sup>. После указанных преобразований уравнение /4/ принимает вид:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial z} f(z, S_{\perp}) &= \frac{1}{\sqrt{V_0^2 - \frac{2}{M} \int_0^z \left\langle \sum_{j=1}^N \frac{\partial}{\partial r} U_r(\dot{R}_j - \dot{r}_j) \right\rangle dr}} \cdot \sqrt{\frac{M}{2E_0}} \cdot \\ &\cdot (-\dot{V}_{\perp} \dot{V}_{R_{\perp}} f(z, S_{\perp}) + \frac{1}{M} \sum_{j=1}^N \dot{V}_{R_{\perp}} U(\dot{R}_j - \dot{r}_j) \cdot \dot{V}_{V_{\perp}} f(z, S_{\perp})). \end{aligned} \quad /9/$$

Нетрудно убедиться в том, что для  $f(z, S_{\perp})$ , подчиняющейся уравнению /9/, нормировка функции  $f(z, S_{\perp})$  сохраняется. Заметим, что сделанные над уравнением /4/ преобразования тождественны в том смысле, что любое решение /9/ является решением /4/, и наоборот, любое решение /4/ с дополнительным условием /7/ есть решение /9/. Таким образом, наше предположение /6/ о характере зависимости  $f(z, V_z, S_{\perp})$  от  $V_z$  эквивалентно сужению интегрального многообразия /4/. Полученное приближение /9/ естественно назвать адиабатическим.

### Приближение $\alpha(\epsilon)$

Обезразмерим уравнение /9/. Введем с этой целью величины  $R = \{R_j\}$ ;  $U = \Phi U^*$ ;  $V_z = V_0 V_z$ ;  $\dot{V}_\perp = V_0 \dot{V}_\perp$ . При этом малым параметром, характерным в случае движения быстрых частиц через кристалл, будет величина отношения  $V_\perp / V_0 = 1/\alpha$ . В результате /9/ запишется в виде:

$$\frac{\partial}{\partial z} f(z, S_\perp) = \frac{1}{\left(1 - \frac{\Phi}{E_0} \int_0^z \sum_{j=1}^N \frac{\partial}{\partial r} U(r - r_j) \sum_{\Sigma} d\tau\right)^{1/2}} \left\{ \epsilon \sqrt{\frac{M}{2E_0}} \dot{V}_\perp \dot{V}_{R_\perp} f(z, S_\perp) + \frac{\Phi}{V_0 M V_\perp} \sqrt{\frac{M}{2E_0}} \sum_{j=1}^N \dot{V}_{R_\perp} U(R - r_j) \sum_{\Sigma} \dot{V}_{V_\perp} f(z, S_\perp) \right\} \quad /10/$$

Значок  $r$  в /10/ в  $U_r$  означает, что в  $R$   $z$ -компонента заменена на  $r$ . Для явления каналирования характерны соотношения

$$\frac{V_\perp}{V_0} = \frac{\Phi}{V_0 M V_\perp} \sqrt{\frac{\Phi}{2E_0}} \epsilon; \quad \frac{\Phi}{M V_\perp^2} = 1. \quad /11/$$

Учитывая /8/, получим, что  $\Phi = E_0 \alpha^2$ . Учитывая /11/ и оставляя в /9/ величины порядка  $\alpha$ , получаем для  $f(z, S_\perp)$  следующее простое уравнение

$$\frac{\partial}{\partial z} f(z, S_\perp) = \sqrt{\frac{M}{2E_0}} \dot{V}_\perp \dot{V}_{R_\perp} f(z, S_\perp) + \frac{1}{\sqrt{2E_0 M}} \sum_{j=1}^N \dot{V}_{R_\perp} U(R - r_j) \sum_{\Sigma} \dot{V}_{V_\perp} f(z, S_\perp). \quad /12/$$

### Осевое каналирование

Обратимся к расчету величины  $\sum_{j=1}^N U(R - r_j) \sum_{\Sigma}$ . Для простоты будем считать, что кристалл имеет симметрию кубической

\*Заметим, что в  $\Phi$  входит некий эффективный множитель, связанный с числом, одновременно взаимодействующим с частицей ионов.

решетки, и ограничимся гармоническим приближением. Тогда, согласно [3], имеем

$$\begin{aligned}
 \langle \sum_{j=1}^N U(\vec{R}_j - \vec{r}_j) \rangle_{\Sigma} &= \frac{1}{V} \nu(0) + \sum_{n=1}^{\infty} \nu(q_0 n) \exp[-n^2 W_{\Theta}(q_0)] \cos(nq_0 z) \cdot \frac{2}{V} + \\
 &+ \frac{2}{V} \sum_{m=1}^{\infty} \nu(q_0 m) \exp[-m^2 W_{\Theta}(q_0)] \cos(mq_0 x) + \frac{2}{V} \sum_{\ell=1}^{\infty} \nu(q_0 \ell) \times \\
 &\times \exp[-\ell^2 W_{\Theta}(q_0)] \cos(\ell q_0 y) + \frac{4}{V} \sum_{m,n=1}^{\infty} \nu(q_0 \sqrt{m^2 + n^2}) \times \\
 &\times \exp[-(m^2 + n^2) W_{\Theta}(q_0)] \cos(nq_0 z) \cos mq_0 x + \frac{4}{V} \sum_{n,\ell=1}^{\infty} \nu(q_0 \sqrt{n^2 + \ell^2}) \times \\
 &\times \exp[-(n^2 + \ell^2) W_{\Theta}(q_0)] \cos(\ell q_0 y) \cos(nq_0 z) + \frac{4}{V} \sum_{\ell,m=1}^{\infty} \nu(q_0 \sqrt{\ell^2 + m^2}) \times \\
 &\times \exp[-(\ell^2 + m^2) W_{\Theta}(q_0)] \cos(\ell q_0 y) \cos(mq_0 x) + \frac{8}{V} \sum_{\ell,m,n=1}^{\infty} \nu(q_0 \sqrt{\ell^2 + m^2 + n^2}) \times \\
 &\times \exp[-(\ell^2 + m^2 + n^2) W_{\Theta}(q_0)] \cos(\ell q_0 y) \cos(mq_0 x) \cos(nq_0 z), \quad /13/
 \end{aligned}$$

где  $v = V/N$ ,  $V$  - объем кристалла,  $n, m, \ell$  - целые положительные числа,  $N$  - число узлов,  $q_0 = 2\pi/a$ ,  $a$  - постоянная решетки,  $\nu(x)$  - фурье-образ потенциала взаимодействия частицы с ионом.  $W_{\Theta}(q_0)$  - фактор Дебая-Валлера, в данном частном случае он дается выражением [4,3]:

$$\nu_{\Theta}(q_0) = \frac{v_{\Theta}(q_0)^2}{6(2\pi)^3 m} \sum_{S=1}^3 \int_0^{q_0} \frac{1}{\omega_S^2(q)} dq \quad /14/$$

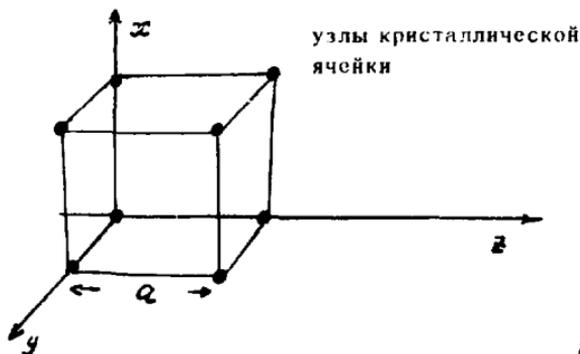


Рис. 1

Конкретный вид /13/ для  $\sum_{i=1}^N U(R_i - r_i)$  связан с частным выбором системы координат, приведенным на рис. 1.

Удобно в случае осевого каналирования выбрать систему координат так, как указано на рис. 2. Ось каналирования совпадает с осью z. Такой выбор системы координат связан со следующей заменой в формуле /13/

$$\cos m q_0 x \rightarrow (-1)^m \cos m q_0 x \quad \cos l q_0 y \rightarrow (-1)^l \cos l q_0 y \quad /15/$$

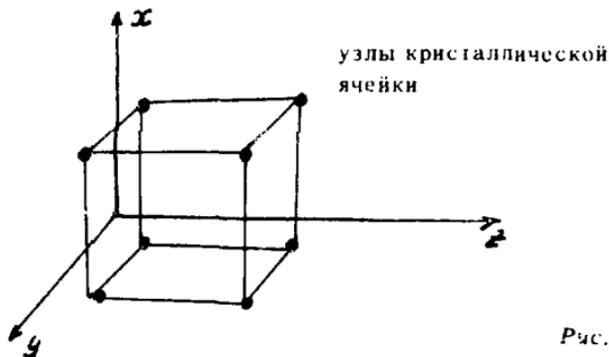


Рис. 2

Тогда для  $\sum_{R_i=1}^N U$  имеем выражения

$$\frac{\partial}{\partial x} \sum_{i=1}^N U(R_i - r_i) \approx -\frac{2q_0}{v} \sum_{m=1}^{\infty} i(q_0 m) \exp[-m^2 W_{\Theta}(q_0)] (-1)^{m-1} m \sin(q_0 m x) -$$

$$-\frac{4q_0}{v} \sum_{m,n=1}^{\infty} i(q_0 \sqrt{m^2 + n^2}) \exp[-(m^2 + n^2) W_{\Theta}(q_0)] (-1)^{m-1} m \sin(q_0 m x) \cos(q_0 n z) -$$

$$-\frac{4q_0}{v} \sum_{m,l=1}^{\infty} i(q_0 \sqrt{m^2 + l^2}) \exp[-(m^2 + l^2) W_{\Theta}(q_0)] (-1)^{m-1} (-1)^l m \sin(q_0 m x) \cos(q_0 l y) -$$

\* В общем случае произвольного положения системы координат относительно решетки надо выражение  $\exp(iq_0 n x + iq_0 m y + iq_0 l z)$  умножить на величину  $\exp(iq_0 n b_z + iq_0 l b_y + iq_0 m b_x)$ , где числа  $b_x, b_y, b_z$  подбираются из анализа рельефа энергетической поверхности в кристалле, т.е. решения соответствующей вариационной задачи.

$$\cdot \frac{S}{V} \cdot q_0 \sum_{m,n,l} (q_0 \sqrt{m^2 + n^2} \cdot l^2) \exp[-(l^2 \cdot m^2 \cdot n^2) W_{\Theta}(q_0)] \cdot \\ \cdot m(1)^{m-1} (1)^l \sin(mq_0 x) \cos(nq_0 z) \cos(lq_0 y) :$$

$$\frac{\partial}{\partial y} \cdot \sum_{j=1}^N U(\dot{R}_j - \dot{r}_j) \sum_{x,y} \frac{\partial}{\partial x} \cdot \sum_{j=1}^N U(\dot{R}_j - \dot{r}_j) \sum_{y+x} \quad /16/$$

Вернемся к уравнению /12/. Оно имеет структуру

$$\frac{\partial}{\partial z} f(z, S_{\pm}) = \hat{A}(S_{\pm}) f(z, S_{\pm}) + \hat{B}(S_{\pm}) f(z, S_{\pm}), \quad /17/$$

где  $\hat{A}(S_{\pm})$  - операторнозначная функция, не зависящая от  $z$ ,  $\hat{B}(S_{\pm})$  - быстро осциллирующая операторнозначная функция эволюционного параметра  $z$ ,  $\epsilon$  - малая величина. Уравнения такого вида можно решать методом осреднения<sup>5/</sup>, впервые примененного в задачах нелинейной механики. Суть этого метода заключается в том, что с точностью до величин порядка  $o(\epsilon^2)$  уравнение /17/ можно заменить уравнением вида<sup>6</sup>

$$\frac{\partial}{\partial z} f(z, S_{\pm}) = \hat{Q}(S_{\pm}) f(z, S_{\pm}),$$

где

$$\hat{Q}(S_{\pm}) = \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{T} \int_0^T [\hat{A}(S_{\pm}) + \hat{B}(S_{\pm})] dt = \hat{A}(S_{\pm}).$$

Итак, после осреднения по  $z$  уравнение для  $f(z, S_{\pm})$  имеет вид

$$\frac{\partial}{\partial z} f(z, S_{\pm}) = -\sqrt{\frac{M}{2E_0}} \dot{V}_{R_1} \dot{V}_{R_1} f(z, S_{\pm}) + \frac{1}{\sqrt{2E_0 M}} \left( \frac{\partial}{\partial x} \sum_j U \right) \sum_{x,y} \times \\ \times \frac{\partial}{\partial V_x} f(z, S_{\pm}) + \frac{1}{\sqrt{2E_0 M}} \left( \frac{\partial}{\partial y} \sum_j U \right) \sum_{x,y} \frac{\partial}{\partial V_y} f(z, S_{\pm}), \quad /19/$$

<sup>6</sup> Заметим, что применение данного метода к решению уравнения /12/ в строгом математическом смысле не оправдано, т.к. в случае<sup>5/</sup> уравнений в частных производных этот метод строго математически обоснован лишь для некоторых конкретных классов операторов  $\hat{A}$ ,  $\hat{B}$ . Несмотря на это, он широко используется в математической физике<sup>6/</sup>.

где

$$\frac{\partial \sum U}{\partial x} \approx \sum_{m, l} \frac{2q_0}{v} r(q_0, m) \exp[-m^2 W_{\Theta}(q_0)] m (-1)^{m-1} \sin(mq_0 x).$$

$$\frac{4q_0}{v} \sum_{m, l} r(q_0, m^2, l^2) \exp[-(m^2 + l^2) W_{\Theta}(q_0)] m (-1)^{m-1} \sin(mq_0 x) \cos(lq_0 y) (-1)^l;$$

$$\frac{\partial}{\partial y} \sum_{l=1}^N U \approx \sum_{m, l} \frac{2q_0}{v} r(q, l) \exp[-l^2 W_{\Theta}(q_0)] l (-1)^{l-1} \sin(q_0 l y).$$

$$\frac{4q_0}{v} \sum_{m, l} r(q_0, l^2, m^2) \exp[-(l^2 + m^2) W_{\Theta}(q_0)] l (-1)^{l-1} \sin(q_0 l y) \cos(q_0 m x).$$

Из уравнения /19/ видно, что оно описывает "z-эволюцию" свободной частицы во внешнем поле  $U^*$ .

$$U^* \lim_{T \rightarrow T_0} \frac{1}{T} \int_0^T \sum_{i=1}^N U(\dot{R} - \dot{r}_i) \approx dz \quad /20/$$

/роль времени здесь играет параметр  $\sqrt{\frac{M}{2E_0}} z /$ .

Но /20/ есть не что иное, как "continuum model", предложенная Линдхардом для классического описания явлений каналирования<sup>7</sup>. Центральной идеей этой модели явилось предположение о том, что каналируемая частица не чувствует отдельного иона решетки, а взаимодействует при движении вдоль канала сразу с рядами ионов. Так называемый "continuum potential" определяется равенством

$$V(\rho) = \frac{1}{a} \int_{-\infty}^{\infty} U[(\rho^2 + x^2)^{1/2}] dx, \quad /21/$$

где  $\rho$  - трансверсальная составляющая  $\dot{R}$ ,  $U$  - функция, моделирующая взаимодействие частицы с ионом. Учет влияния "гребенки" ионов можно производить, решая /12/ методом теории возмущения, используя в качестве нулевого приближения среднее решение.

\* При этом в /20/ произведено дополнительное усреднение по фонновым колебаниям кристаллической решетки.

### Гармоническое приближение

Решение уравнения /19/, отвечающее начальной функции распределения  $\rho(S_-)$  можно записать в виде

$$\Gamma(z, S_-) = \rho(T_{z-}, S_-), \quad /22/$$

где  $T_z$  - оператор "z-эволюции", определенный на фазовом пространстве  $S_-$  уравнениями:

$$\frac{\partial}{\partial t} \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} V_x \\ V_y \end{pmatrix} + (1 - \lambda) \frac{M}{2E_0} z,$$

$$\frac{\partial}{\partial t} V_x = \frac{\partial}{\partial x} \sum_{l=1}^N V_l(R_l, l_1) \sum_{m=1}^M 1, \quad /23/$$

$$\frac{\partial}{\partial t} V_y = \frac{\partial}{\partial y} \sum_{l=1}^N V_l(R_l, l_1) \sum_{m=1}^M 1.$$

Из /23/ легко получить:

$$\ddot{x} = \frac{2q_0}{M\nu} \sum_{m=1}^M m_l(q_0, m) (-1)^{m-1} \sin(q_0 x) \exp(-m^2 W_{\Theta}(q_0))$$

$$\frac{4q_0}{M\nu} \sum_{l=1}^N l(q_0 \lambda m^2 - l^2) \exp(-l^2 - m^2) W_{\Theta}(q_0) (-1)^{m-1} (-1)^{l-1} \sin(q_0 x) \cos(l q_0 y),$$

$$\ddot{y} = \frac{2q_0}{M\nu} \sum_{l=1}^N l_l(q_0, l) (-1)^{l-1} \sin(q_0 y) \exp(-l^2 W_{\Theta}(q_0))$$

$$\frac{4q_0}{M\nu} \sum_{m=1}^M m_l(q_0 \lambda m^2 - l^2) \exp(-l^2 - m^2) W_{\Theta}(q_0) (-1)^{l-1} (-1)^{m-1} \sin(q_0 y) \cos(q_0 mx), \quad /24/$$

где точка над  $x, y$  означает дифференцирование по параметру  $t$ .

Из формулы /24/ видно, что ряды по  $l$  и  $m$  очень хорошо сходятся. Ограничимся в этих рядах первыми по величине членами. Это мы сделаем с целью упрощения аналитических расчетов:

$$\ddot{x} \approx \frac{2q_0}{M\nu} l(q_0) \sin(q_0 x) \exp - W_{\Theta}(q_0);$$

$$\ddot{y} \approx \frac{2q_0}{M\nu} l(q_0) \sin(q_0 y) \exp - W_{\Theta}(q_0).$$

/25/

Система уравнений /25/ хорошо изучена; при известных ограничениях на начальные условия она описывает колебания около "положения равновесия", которые могут быть описаны в гармоническом приближении, при  $q_0 x \ll \frac{\pi}{2}$ ,  $q_0 v \ll \frac{\pi}{2}$ . С хорошей степенью точности для гармонического приближения можно использовать следующие требования к  $x$ ,  $y$ :  $q_0 x \ll \frac{\pi}{6}$ ,  $q_0 v \ll \frac{\pi}{6}$ . Относительная ошибка при этом составит 4%. Итак, в гармоническом приближении /25/ переписывается в виде:

$$\begin{aligned} \ddot{x} &= -k(\theta, q_0)x, & k(\theta, q_0) &= \frac{2q_0^2}{Mv} \operatorname{erfc}(q) \exp(-W_\theta(q)) \omega_\theta^2, \\ \ddot{y} &= -k(\theta, q_0)y, & & \end{aligned} \quad /26/$$

Из /26/ легко найти оператор  $T_z$ :

$$T_z \begin{pmatrix} x \\ v_x \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} y \\ v_y \end{pmatrix} = T_z \begin{pmatrix} x \\ v_x \end{pmatrix} \otimes T_z \begin{pmatrix} y \\ v_y \end{pmatrix} :$$

$$T_z \left( \begin{array}{cc} \cos\left(\sqrt{\frac{M}{2E_0}} \omega_\theta z\right) & -\frac{1}{\omega_\theta} \sin\left(\sqrt{\frac{M}{2E_0}} \omega_\theta z\right) \\ -\omega_\theta \sin\left(\sqrt{\frac{M}{2E_0}} \omega_\theta z\right) & \cos\left(\sqrt{\frac{M}{2E_0}} \omega_\theta z\right) \end{array} \right) \quad /26'/$$

Здесь знак  $\otimes$  означает декартово произведение двух столбцов. Заметим, что в силу приближенного решения задачи /23/ оператор  $T_z$ , приведенный формулой /26'/, определен не на всем фазовом пространстве частицы  $S_\perp$ . Найдем область определения оператора  $T_z$ ,  $z \in (0, \infty)$ . Это важно, так как представление решений в виде /23/ будет справедливо только для тех начальных функций распределения, носитель которых сосредоточен в  $S_\perp$ . В основу оценки области  $S_\perp^0 \subset S_\perp$  можно положить неравенства:

$$q_0 x \leq \frac{\pi}{6}, \quad q_0 v \leq \frac{\pi}{6}. \quad /27/$$

Оценим  $x, V^x$ . Оценки для  $y, V^y$  в силу симметрии будут те же. Из /27/ следует, что

$$x \cos(\omega \Theta) \sqrt{\frac{M}{2E_0}} z) - \frac{V_x}{\omega \Theta} \sin(\omega \Theta) \sqrt{\frac{M}{2E_0}} z) = \frac{\pi}{6q} \quad /28/$$

Значение  $x^*$ , при котором в /28/ достигается равенство на границе разрешенной области, дается выражением:

$$\cos(\omega \Theta) \sqrt{\frac{M}{2E_0}} z^* = \arctg \frac{V_x^*}{\omega \Theta x^*} \quad /29/$$

Сама граница области определяется уравнением

$$x \cos(\omega \Theta) \sqrt{\frac{M}{2E_0}} z^* - \frac{V_x^*}{\omega \Theta} \sin(\omega \Theta) \sqrt{\frac{M}{2E_0}} z^* = \frac{\pi}{6q_0} \quad /30/$$

Из /30/, используя /29/, можно получить, что разрешенная  $x, V_x$ -область, т.е. область, на которой определен оператор  $T_x$ , есть внутренность эллипса, задаваемого уравнением:

$$x^2 \omega^2 \Theta^2 + V_x^2 = \left( \frac{\omega \Theta}{12} a \right)^2 \quad /31/$$

Совершенно аналогично, для  $V_y, y$ :

$$y^2 \omega^2 \Theta^2 + V_y^2 = \left( \frac{\omega \Theta}{12} a \right)^2 \quad /32/$$

Из рассмотренного выше ясно, что функция  $f(z, S_{\perp}) = g(T_x, S_{\perp})$ , где  $g(S_{\perp})$  - функция начального распределения частиц с носителем в  $S_{\perp}$ , описывает распределение частиц в канале движения в плоскости  $S_{\perp}$  в зависимости от координаты  $z$ .

Траектория каналируемой частицы с начальными условиями при  $z=0, V_x^0, x^0, V_y^0, y^0$  есть:

$$\begin{pmatrix} x(z) \\ y(z) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} x^0 \\ y^0 \end{pmatrix} \cos\left(\sqrt{\frac{M}{2E_0}} \omega \Theta z\right) + \frac{1}{\omega \Theta} \begin{pmatrix} V_x^0 \\ V_y^0 \end{pmatrix} \sin\left(\sqrt{\frac{M}{2E_0}} \omega \Theta z\right) \quad /33/$$

Найдем критический угол влета  $\alpha_c$  частицы к кристаллографической оси при углах влета, меньше которого справедливо описание /26/. Учтем, что

$$V_0^x = \sqrt{\frac{M}{2E_0}} \operatorname{tg} \alpha_c = \sqrt{\frac{M}{2E_0}} \alpha_c \quad /34/$$

откуда

$$\alpha_c = \omega \Theta \sqrt{\frac{m}{2E} \sqrt{\left(\frac{a}{12}\right)^2 - x^2}} \quad /35/$$

В общем случае  $\alpha_c$  является функцией  $x_0$ . При  $x_0 = 0$

$$\alpha_c = \frac{\omega \Theta^2}{12} \sqrt{\frac{M}{2E_0}} \frac{\pi}{6a} \sqrt{\frac{\nu(q_0)}{aE_0}} \exp\left(-\frac{1}{2} W_{\Theta}(q_0)\right) \quad /36/$$

В случае кулоновского взаимодействия между частицей с зарядом  $eZ_1$  и ионом кристалла с зарядом  $eZ_2$  вместо /36/ имеем:

$$\alpha_c = \frac{e}{12} \sqrt{\frac{Z_1 Z_2}{aE_0}} \exp\left(-\frac{1}{2} W_{\Theta}(q_0)\right) \quad /37/$$

Оценим пределы классического описания движения быстрых частиц сквозь кристалл. Чтобы данное явление можно было описать классической механикой, необходимо, чтобы наибольшее расстояние к кристаллической плоскости, на которое приближается частица во время движения, было больше квантово-механической неопределенности положения частицы. Тогда эффектами туннелирования сквозь потенциальный барьер данной кристаллической плоскости можно пренебречь /см. рис. 3/.

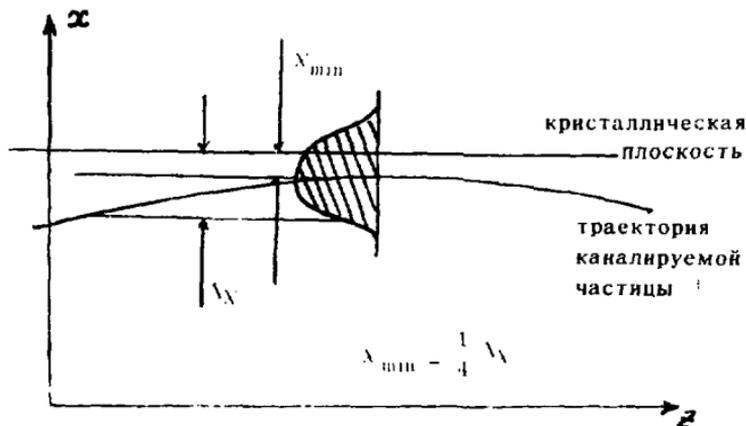


Рис. 3.

отсюда

$$a_{\pm} = \sqrt{\frac{2E_0}{M}} a_c \pm \frac{\pi}{4\sqrt{M2E_0}} a_c. \quad /38/$$

Из /38/ следует, что

$$a_{\pm} = \frac{\omega_{\Theta} a}{4} \sqrt{\frac{M}{2E_0} (1 \pm \sqrt{1 - \frac{4\pi}{M\omega_{\Theta} a^2}})}; \quad /39/$$

$$\frac{M\omega_{\Theta} a}{4\pi} \approx 1.$$

Чем лучше будет выполнено /39/-2, тем для более широкого диапазона углов влета частицы к кристаллографической оси справедливо классическое описание. Итак, для условия классического описания необходимо, чтобы выполнялось следующее требование:

$$\frac{\pi}{2\hbar} \exp(-\frac{1}{2} W_{\Theta}(q_0)) \sqrt{\frac{2r(q_0)M}{a}} \gg 1 \quad /40/$$

В случае кулоновского взаимодействия /40/ представится в виде

$$\frac{e}{\hbar} \sqrt{2aMZ_1Z_2} \exp(-\frac{1}{2} W_{\Theta}(q_0)) \gg 1.$$

Так как  $a_c \approx a_{\pm}$ , то условия гармонического приближения будут определяться  $a_c$ . Из /39/-1, однако, видно, что существует угол  $a_c^-$ , при углах влета меньше которого нарушается классическое описание. Оценим  $a_c^-$ , с учетом /39/:

$$a_c^- = \frac{\pi}{2a\sqrt{2E_0}M} \approx o(\hbar^2). \quad /41/$$

**Приближение  $o(\hbar^2)$**

Приближение  $o(\hbar^2)$  будет заключаться в том, что мы учтем по теории возмущения члены, отброшенные в результате осреднения уравнения /12/, используя в качестве нулевого прибли-

жения осредненное решение. При этом так же, как и в приближении  $o(\epsilon)$ , речь будет идти об описании распределения частиц внутри канала движения. Запишем уравнение /12/ в виде

$$\frac{\partial}{\partial z} f(S_{\perp}, z) - \sqrt{\frac{M}{2E_0}} \dot{V}_{\perp} \dot{V}_{R_{\perp}} f(S_{\perp}, z) + [k(\Theta, q_0) \sqrt{\frac{M}{2E_0}} (x \frac{\partial}{\partial V_x} + y \frac{\partial}{\partial V_y}) + h(\Theta, z, q_0) \sqrt{\frac{M}{2E_0}} (x \frac{\partial}{\partial V_x} + y \frac{\partial}{\partial V_y})] f(S_{\perp}, z), \quad /42/$$

где

$$h(\Theta, z, q_0) = \frac{4q_0^2}{Mv} \nu(q_0 \sqrt{2}) \exp[-2W_{\Theta}(q_0)] \cos q_0 z - \frac{8q_0^2}{Mv} \nu(q_0 \sqrt{3}) \exp[-3W_{\Theta}(q_0)] \cos q_0 z.$$

В /42/ использовано гармоническое приближение для коэффициентов уравнения /12/, в которых оставлен первый по величине член в соответствующих рядах. Введем оператор  $S_z$  по формуле:

$$S_z f(S_{\perp}) = f(T_{-z} S_{\perp}). \quad /43/$$

Тогда решение /42/ с точностью до членов  $o(\epsilon^2)$  включительно есть

$$f(z, S_{\perp}) = S_z g(S_{\perp}) - \int_0^z d\tau \sqrt{\frac{M}{2E_0}} S_{z-\tau} h(\Theta, q_0, \tau) [x \frac{\partial}{\partial V_x} + y \frac{\partial}{\partial V_y}] S_{\tau} g(S_{\perp}), \quad /44/$$

где  $g(S_{\perp})$  - начальное распределение частиц в пучке при  $z = 0$ . Рассчитаем  $x(z)$ ,  $y(z)$  в  $o(\epsilon^2)$  приближении. В силу симметрии кристалла достаточно рассчитать  $x(z)$ . Учитывая, что  $x(z) = \int dS_{\perp} x f(z, S_{\perp})$ , имеем

$$x(z) = \int dS_{\perp} x S_z g(o S_{\perp}) - \int_0^z d\tau \sqrt{\frac{M}{2E_0}} h(\Theta, q_0, \tau) \int dS_{\perp} (S_{\tau-z} x) x \frac{\partial}{\partial V_x} S_{\tau} g(o S_{\perp}). \quad /45/$$

Выражение  $(S_z, \dots)$  означает, что оператор  $S_z$  действует только на функцию, стоящую в скобках. При получении /45/ использовалась инвариантность инфинитезимального объема  $dS_{\perp}$  относительно "z-эволюции". Выберем в качестве начальных условий для /45/ функцию  $\psi(S_{\perp}) \delta(x-x_0) \delta(y-y_0) \delta(V_x - V_x^0) \delta(V_y - V_y^0)$ , где  $\delta(x)$  есть дельта-функция Дирака. Тогда /37/ можно привести к виду

$$\psi(z) = A(z) \cos(\omega_{\Theta} \sqrt{\frac{M}{2E_0}} z) + B(z) \sin(\omega_{\Theta} \sqrt{\frac{M}{2E_0}} z), \quad /46/$$

где

$$A(z) = x_0 \cdot \sqrt{\frac{M}{2E_0}} \int_0^z d\tau h(\Theta \tau q_0) \left\{ \frac{x_0}{\omega_{\Theta}} \sin(2\omega_{\Theta} \sqrt{\frac{M}{2E_0}} \tau) - \frac{V_x^0}{\omega_{\Theta}^2} \sin^2(\omega_{\Theta} \sqrt{\frac{M}{2E_0}} \tau) \right\},$$

$$B(z) = \frac{V_x^0}{\omega_{\Theta}} + \sqrt{\frac{M}{2E_0}} \int_0^z d\tau h(\Theta \tau q_0) \left\{ \frac{V_x^0}{2\omega_{\Theta}^2} \sin(2\omega_{\Theta} \sqrt{\frac{M}{2E_0}} \tau) - \frac{x_0}{\omega_{\Theta}} \sin^2(\omega_{\Theta} \sqrt{\frac{M}{2E_0}} \tau) \right\}.$$

Мы видим, что учет осцилляционных членов приводит к модуляции амплитуды каналлируемой частицы. Совершенно аналогичное выражение можно найти для  $\psi(z)$ :

$$\psi(z) = A(z) \cos(\omega_{\Theta} \sqrt{\frac{M}{2E_0}} z) + B(z) \sin(\omega_{\Theta} \sqrt{\frac{M}{2E_0}} z);$$

$$A(z) = y^0 + \sqrt{\frac{M}{2E_0}} \int_0^z d\tau h(\Theta \tau q_0) \left\{ \frac{y^0}{\omega_{\Theta}} \sin(2\omega_{\Theta} \sqrt{\frac{M}{2E_0}} \tau) - \right.$$

$$\left. - \frac{V_y^0}{\omega_{\Theta}^2} \sin^2(\omega_{\Theta} \sqrt{\frac{M}{2E_0}} \tau) \right\}, \quad /47/$$

$$B(z) = \frac{V_y^0}{\omega_{\Theta}} + \sqrt{\frac{M}{2E_0}} \int_0^z d\tau h(\Theta \tau q_0) \left\{ \frac{V_y^0}{2\omega_{\Theta}^2} \sin(2\omega_{\Theta} \sqrt{\frac{M}{2E_0}} \tau) - \frac{y^0}{\omega_{\Theta}} \sin^2(\omega_{\Theta} \sqrt{\frac{M}{2E_0}} \tau) \right\}.$$

### *Литература*

1. Fedyanin V.K., Gavrilenko G.M. JINR, E17-12025, Dubna, 1978.
2. Боголюбов Н.Н. Проблемы динамической теории в статистической механике. Физиздат, М., 1949.
3. Гавриленко Г.М., Федянин В.К. ОИЯИ, P17-11949, Дубна, 1978.
4. Гуревич И.И., Тарасов Л.В. Физика нейтронов низких энергий. "Наука", М., 1965.
5. Боголюбов Н.Н., Митропольский Ю.А. Асимптотические методы в теории нелинейных колебаний. Физматгиз, М., 1963.
6. Боголюбов Н.Н. О некоторых статистических методах в математической физике. Изд. АН УССР, Киев, 1945.
7. Lindhard L., Dan K. Vidensk. Selsk. Mat.-Fys. Medd., 1968, v.36, No. 10.

Рукопись поступила в издательский отдел  
29 января 1979 года.