

ОБЪЕДИНЕННЫЙ
ИНСТИТУТ
ЯДЕРНЫХ
ИССЛЕДОВАНИЙ
ДУБНА

Г-124

14/6-79
P17 - 12215

Г.М.Гавриленко, В.К.Федянин

1808/2-79

ДВИЖЕНИЕ БЫСТРЫХ ЗАРЯЖЕННЫХ ЧАСТИЦ

СКВОЗЬ КРИСТАЛЛЫ

В АДИАБАТИЧЕСКОМ ПРИБЛИЖЕНИИ

II. Плоскостное каналирование

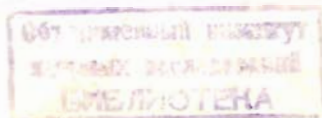
1979

P17 - 12215

Г.М.Гавриленко. В.К.Федянин

ДВИЖЕНИЕ БЫСТРЫХ ЗАРЯЖЕННЫХ ЧАСТИЦ
СКВОЗЬ КРИСТАЛЛЫ
В АДИАБАТИЧЕСКОМ ПРИБЛИЖЕНИИ
II. Плоскостное каналирование

Направлено в "Physica Scripta"



Гавриленко Г.М., Федянин В.К.

P17-12215

Движение быстрых заряженных частиц сквозь кристаллы в адиабатическом приближении. II. Плоскостное каналирование

В подходе, основанном на рассмотрении эволюции малых подсистем, находящихся в динамическом контакте с термостатом, рассмотрено движение энергетических частиц сквозь кристалл. Представлен случай плоскостного каналирования сквозь кристалл кубической симметрии. Рассчитаны параметры траектории каналируемой частицы в зависимости от индексов Миллера плоскости, вдоль которой движется каналируемая частица.

Работа выполнена в Лаборатории теоретической физики ОИЯИ.

Препринт Объединенного института ядерных исследований, Дубна 1979

Gavrilenko G.M., Fedyanin V.K.

P17-12215

Motion of Fast Charged Particles Through a Crystal in the Adiabatic Approximation, II, Plane 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 case of plane channeling through a cubic crystal is studied. The parameters of channeling trajectory are obtained as functions of Miller's indices of a crystal plane during of which channeling occur.

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

Preprint of the Joint Institute for Nuclear Research. Dubna 1979

В предыдущей работе^{/1/} рассмотрено движение быстрых частиц сквозь кристалл в случае направления канала движения частиц параллельно одной из главных осей кристалла с решеткой, обладающей кубической симметрией, так называемое осевое каналирование^{/2/}. Рассмотрим теперь ситуацию, когда направление канала движения частиц составляет произвольный угол с кристаллографической осью. Снова будем считать, что кристалл обладает кубической симметрией и применимо гармоническое приближение. Уравнение для функции распределения $f(zS_{\perp})$ в приближении $o(\epsilon)$, где $\epsilon = v_{\perp}/v_z \ll 1$, имеет вид:

$$\frac{\partial}{\partial z} f(zS_{\perp}) = -\sqrt{\frac{M}{2E_0}} \vec{V}_{\perp} \frac{\partial}{\partial R_{\perp}} f(zS_{\perp}) + \frac{1}{\sqrt{2E_0M}} \left[\frac{\partial}{\partial x} \times \right. \\ \left. \times \left\langle \sum_{i=1}^N U(\vec{R} - \vec{r}_i) \right\rangle_{\Sigma} \frac{\partial}{\partial V_x} f(zS_{\perp}) + \frac{\partial}{\partial y} \left\langle \sum_{i=1}^N U(\vec{R} - \vec{r}_i) \right\rangle_{\Sigma} \frac{\partial}{\partial V_y} f(zS_{\perp}) \right], \quad /1/$$

где

$$\left\langle \sum_{i=1}^N U(\vec{R} - \vec{r}_i) \right\rangle_{\Sigma} = \frac{1}{V} \sum_k v(k) \exp i\vec{k} \cdot \vec{R} < \frac{1}{N} \sum_{j=1}^N \exp -i\vec{k} \cdot \vec{r}_j \rangle_{\Sigma};$$

$$v = \frac{V}{N}.$$

В силу трансляционной симметрии решетки на средние вида

$$\left\langle \sum_{j=1}^N \exp -i\vec{k} \cdot \vec{r}_j \right\rangle_{\Sigma}$$

существуют определенные правила отбора по \vec{k} .

Однако, так как при плоскостном каналировании наша система координат расположена так, что оси симметрии кристалла не параллельны осям системы координат, правила отбора по \vec{k} будут несколько иными, чем в [1,3]. Обозначим через $0, x, y, z$ систему координат, в которой будем рассматривать движение частицы. Ось Oz направим вдоль канала движения частицы. Систему координат $0, x', y', z'$ выберем так, чтобы ее оси Ox', Oy', Oz' совпадали с направлениями главных кристаллографических осей кубического кристалла. Таким образом, как видно из рис. 1, направление каналирования Oz составляет угол α с направлением кристаллографической оси Oz' . Ось Ox совпадает с

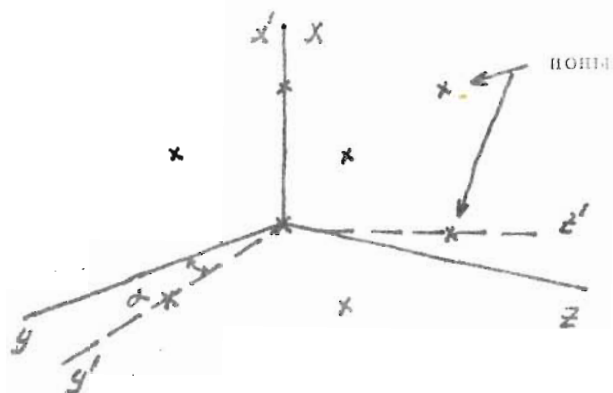


Рис. 1

осью Ox' . Уравнение /1/ записано в системе координат $0, x, y, z$. Правила же отбора на корреляционные средние по кристаллической подсистеме очень простым образом устанавливаются в системе координат $0, x', y', z'$, т.к. в ней главные оси симметрии группы трансляций кристалла совпадают с направлениями осей координат. Выразим значение $\vec{k}\vec{r}_j$ в системе координат $0, x', y', z'$. Имеем:

$$\begin{aligned} \vec{k}\vec{r}_j &= k_x x + k_y y + k_z z; \\ x &= x'; \quad y = y' \cos \alpha - z' \sin \alpha; \\ z &= z' \cos \alpha + y' \sin \alpha, \end{aligned} \quad /2/$$

откуда

$$\vec{k}\vec{r}_j = k_x x + y'(k_z \sin \alpha + k_y \cos \alpha) + z'(k_z \cos \alpha - k_y \sin \alpha) \quad /3/$$

и

$$\begin{aligned} \left\langle \sum_{j=1}^N \exp(-i\vec{k}\vec{r}_j) \right\rangle_{\Sigma} &= \left\langle \sum_{j=1}^N \exp[-ik_x x - y'(k_z \sin \alpha + k_y \cos \alpha) - \right. \\ &\quad \left. - z'(k_z \cos \alpha - k_y \sin \alpha)] \right\rangle_{\Sigma}. \end{aligned} \quad /4/$$

Так как оси Ox', Oy', Oz' совпадают с главными осями трансляционной симметрии кристалла, то среднее /4/ не должно измениться при трансляции в направлениях Ox', Oy', Oz' на величину, кратную постоянной решетки. Отсюда для k_x, k_y, k_z имеем:

$$\begin{aligned} k_z &= q_0(n \cos \alpha + l \sin \alpha); \\ k_y &= q_0(l \cos \alpha - n \sin \alpha); \\ k_x &= q_0 m. \end{aligned} \quad /5/$$

$q_0 = \frac{2\pi}{a}$; n, m, l - целые положительные числа от $-\infty$ до $+\infty$.

Квадрат вектора при поворотах оси координат является инвариантом, поэтому $(\vec{k}')^2 = (\vec{k})^2$. Учитывая это, а также явный вид выражения для фактора Дебая-Валлера [4], получим

$$\begin{aligned} \frac{1}{V} \sum_{\vec{k}} \nu(\vec{k}) \exp(i\vec{k}\vec{R}) \frac{1}{N} \left\langle \sum_{j=1}^N \exp(-i\vec{k}\vec{r}_j) \right\rangle_{\Sigma} &= \frac{1}{V} \sum_{n,m,l} \nu(q_0 \sqrt{n^2 + m^2 + l^2}) \times \\ &\times \exp[-(n^2 + l^2 + m^2)W_{\Theta}(q_0)] \exp[iq_0 n(z \cos \alpha - y \sin \alpha)] \exp[iq_0 m x] \\ &\exp[iq_0 l(z \sin \alpha + y \cos \alpha)]. \end{aligned} \quad /6/$$

В дальнейшем для описания эффекта каналирования будет удобно сдвинуть систему координат $0, x, y, z$ на вектор \vec{b} так, чтобы ось каналирования Oz совпала с линией минимума потенциальной энергии на энергетической поверхности, отвечающей данному направлению α

$$\vec{b} = (b_x, b_y, b_z) = (b_1, b_2 \cos \alpha - b_3 \sin \alpha, b_3 \cos \alpha + b_2 \sin \alpha). \quad /7/$$

В результате /6/ можно переписать в виде:

$$\begin{aligned}
 \langle \sum_{j=1}^N U(\vec{R} - \vec{r}_j) \rangle_{\Sigma} &= \frac{1}{v} \nu(0) + \frac{2}{v} \sum_{n=1}^{\infty} \nu(q_0 n) \exp(-n^2 W_{\Theta}(q_0)) \cos[n q_0 x + \\
 &\times (z \cos \alpha - y \sin \alpha) + n q_0 b_3] + \frac{2}{v} \sum_{m=1}^{\infty} \nu(m q_0) \exp(-m^2 W_{\Theta}(q_0)) \cos(m q_0 x + \\
 &+ m q_0 b_1) + \frac{2}{v} \sum_{\ell=1}^{\infty} \nu(\ell q_0) \exp(-\ell^2 W_{\Theta}(q_0)) \cos[\ell q_0 (z \sin \alpha + y \cos \alpha) + \\
 &+ \ell q_0 b_2] + \frac{4}{v} \sum_{n,m=1}^{\infty} \nu(q_0 \sqrt{n^2 + m^2}) \exp[-(\ell^2 + m^2) W_{\Theta}(q_0)] \times \\
 &\times \cos[m q_0 x + b_1 m q_0] \cdot \cos[n q_0 (z \cos \alpha - y \sin \alpha) + n q_0 b_3] + \\
 &+ \frac{4}{v} \sum_{\ell,m=1}^{\infty} \nu(q_0 \sqrt{\ell^2 + m^2}) \exp[-(\ell^2 + m^2) W_{\Theta}(q_0)] \times \\
 &\times \cos(m q_0 x + m q_0 b_1) \cos[\ell q_0 (y \cos \alpha + z \sin \alpha) + \ell q_0 b_2] + \\
 &+ \frac{2}{v} \sum_{n,\ell=1}^{\infty} \nu(q_0 \sqrt{\ell^2 + n^2}) \exp[-(\ell^2 + n^2) W_{\Theta}(q_0)] \{ \cos(n q_0 z \cos \alpha - \\
 &- n q_0 y \sin \alpha + \ell q_0 y \cos \alpha + \ell q_0 z \sin \alpha + n q_0 b_3 + \ell q_0 b_2) + \\
 &+ \cos(n q_0 y \sin \alpha + \ell q_0 y \cos \alpha + \ell q_0 z \sin \alpha - n q_0 z \cos \alpha - b_3 n q_0 + b_2 \ell q_0) \} + \\
 &+ \frac{4}{v} \sum_{n,m,\ell=1}^{\infty} \nu(q_0 \sqrt{n^2 + m^2 + \ell^2}) \exp[-(n^2 + \ell^2 + m^2) W_{\Theta}(q_0)] \times \\
 &\times \cos(m q_0 x + m q_0 b_1) \{ \cos(n q_0 z \cos \alpha - n q_0 y \sin \alpha + \ell q_0 y \cos \alpha + \\
 &+ \ell q_0 z \sin \alpha + n q_0 b_3 + \ell q_0 b_2) + \cos[n q_0 y \sin \alpha + \ell q_0 y \cos \alpha + \\
 &+ \ell q_0 z \sin \alpha - n q_0 z \cos \alpha - n q_0 b_3 + \ell q_0 b_2] \}.
 \end{aligned}$$

/8/

Полученное выражение /8/ надо использовать для нахождения коэффициентов в уравнении /1/. Случай $\alpha = 0$ соответствует осевому каналированию, рассмотренному в /1/. Так же, как и там, будем решать уравнение /1/ методом осреднения /5/, что будет соответствовать его решению с точностью до величин порядка $o(\epsilon)$ включительно. Так как операция осреднения коммутирует с операциями $\frac{\partial}{\partial U_x}$, $\frac{\partial}{\partial U_y}$, то можно сразу осреднять выражение /8/

$$\langle \sum_{j=1}^N U(\vec{R} - \vec{r}_j) \rangle_{\Sigma} = \lim_{T \rightarrow \infty} \int_0^T d\tau \langle \sum_{j=1}^N U_{\tau}(\vec{R} - \vec{r}_j) \rangle_{\Sigma} \quad /9/$$

Значок τ у выражения U_{τ} указывает на то, что в \vec{R} z-компонента заменена на τ . В результате для $\langle \sum_{j=1}^N U(\vec{R} - \vec{r}_j) \rangle_{\Sigma}$ имеем:

$$\begin{aligned}
 \langle \sum_{j=1}^N U(\vec{R} - \vec{r}_j) \rangle_{\Sigma} &= \frac{1}{v} \nu(0) + \frac{2}{v} \sum_{m=1}^{\infty} \nu(q_0 m) \exp[-m^2 W_{\Theta}(q_0)] \\
 &\times \cos(m q_0 x + m q_0 b_1) + \frac{2}{v} \sum_{\ell,n=1}^{\infty} \nu(q_0 \sqrt{\ell^2 + n^2}) \exp[-(\ell^2 + n^2) W_{\Theta}(q_0)] \times \\
 &\times \cos[(n q_0 \sin \alpha + \ell q_0 \cos \alpha) y + b_2 \ell q_0 - b_3 n q_0] \Lambda(\ell q_0 \sin \alpha - n q_0 \cos \alpha) + \\
 &+ \frac{4}{v} \sum_{n,m,\ell} \nu(q_0 \sqrt{n^2 + m^2 + \ell^2}) \exp[-(n^2 + \ell^2 + m^2) W_{\Theta}(q_0)] \cos(m q_0 x + m q_0 b_1) \\
 &\times \cos[(n q_0 \sin \alpha + \ell q_0 \cos \alpha) y + b_2 \ell q_0 - b_3 n q_0] \Lambda(\ell q_0 \sin \alpha - n q_0 \cos \alpha).
 \end{aligned}$$

/10/

В /10/ $\alpha \neq 0$, $\Lambda(x)$ - дельта-символ Кроннекера:

$$\Lambda(x) = \begin{cases} 1, & x = 0; \\ 0, & x \neq 0. \end{cases}$$

В формуле /10/ существенны те направления оси канала движения частицы, для которых выполнено равенство

$$\ell \sin \alpha - n \cos \alpha = 0;$$

$$\alpha = \arctg \frac{n}{\ell}.$$

/11/

Эти направления назовем каналами движения частиц. Свяжем индексы n, ℓ , определяющие направление каналирования с индексами Миллера ^{16/}. Для этого рассмотрим рис. 2, где α задает направление каналирования, $Ox'y'z'$ связана с главными осями трансляционной симметрии кристалла. Индексы Миллера

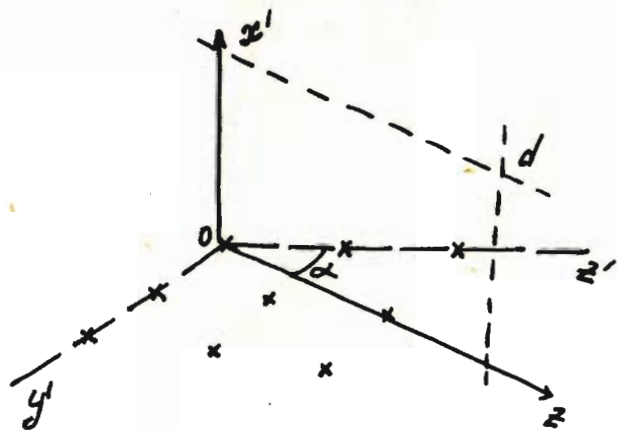


Рис. 2

плоскости $Ox'zd$ есть $(0, k', \ell')$. Заметим, что так же, как и индексы Миллера, направление n, ℓ мы задаем наименьшими числами. Итак, можно выразить n, ℓ через индексы Миллера плоскости, вдоль которой происходит каналирование частиц. Пусть ее индексы Миллера есть $(0, k', \ell')$. Заметим, что k' всегда отрицательно, что связано с нашим выбором системы координат, ось Oz направлена вдоль канала движения частиц. Тогда

$$\alpha = -\arctg \frac{\ell'}{k'}; \quad /12/$$

$$\Delta(\ell q_0 \sin \alpha - n q_0 \cos \alpha) = \Delta\left(\ell + \frac{k'}{\ell'} n\right). \quad /13/$$

В /13/ ℓ, n - всегда целые числа, строго бóльшие нуля. Отсюда следует, что $\frac{k'}{\ell'} n$ всегда также должно быть целым числом.

Поэтому сумма в /10/ всегда должна начинаться с члена ℓ' и справедливо следующее утверждение: в сумме /10/ отличными от нуля членами являются те, для которых выполнено требование:

$$\begin{aligned} n &= \ell' p; & p &= 1, 2, 3, \dots \\ \ell &= -k' p; \end{aligned} \quad /14/$$

Обратимся теперь к определению координат вектора \vec{b} . Нетрудно видеть, что из ранее сформулированных условий на \vec{b}

$$b_1 = \frac{a}{2}. \quad /15/$$

$$b_2 \ell q_0 - b_3 n q_0 = \pi n. \quad /16/$$

Уравнение /16/ относительно b_2, b_3 необходимо искать для наименьших возможных неотрицательных b_2, b_3 . Это следует из определения \vec{b} , откуда

$$b_3 = 0; \quad b_2 = \frac{\pi \ell'}{2k'}. \quad /17/$$

Выражение $n q_0 \sin \alpha + \ell q_0 \cos \alpha$, используя /13/, /14/, нетрудно представить в виде

$$n q_0 \sin \alpha + \ell q_0 \cos \alpha = p q_0 \sqrt{\ell'^2 + k'^2}. \quad /18/$$

Учитывая /12/, /13/, /17/, /18/ и переходя в /10/ от суммирования по n, ℓ к суммированию по p , имеем

$$\begin{aligned} < \sum_{j=1}^N U(\vec{R} - \vec{r}_j) >_{\Sigma} = \frac{1}{V} \nu(0) + \frac{2}{V} \sum_m \nu(q_0 m) \exp(-m^2 W_{\Theta}(q_0)) \times \\ & \times (-1)^m \cos m q_0 x + \frac{2}{V} \sum_{p=1}^{\infty} \nu(q_0 p \sqrt{\ell'^2 + k'^2}) \exp[-p^2 (\ell'^2 + k'^2) W_{\Theta}(q_0)] \times \\ & \times (-1)^p \cos[q_0 \sqrt{\ell'^2 + k'^2} p \cdot y] + \frac{4}{V} \sum_{m,p} \nu(q_0 \sqrt{m^2 + p^2 (k'^2 + \ell'^2)}) (-1)^m (-1)^p \times \\ & \times \exp\{-[m^2 + p^2 (\ell'^2 + k'^2)] W_{\Theta}(q_0)\} \cos m q_0 x \cdot \cos(q_0 \sqrt{\ell'^2 + k'^2} \cdot p y). \quad /19/ \end{aligned}$$

Гармоническое приближение

В случае малых колебаний частицы при ее следовании вдоль канала движения, т.е. при достаточно малых углах влета частицы, движение хорошо описывается в гармоническом приближении. В этом приближении движения в направлениях Ox и Oy можно считать независимыми. Оставим в ряде /19/ лишь первые по величине члены. Критерием гармонического движения, как и в /1/, выберем требование:

$$q_0 x \leq \frac{\pi}{6};$$

$$q_0 \sqrt{k'^2 + l'^2} y \leq \frac{\pi}{6}.$$

/20/

Итак, в гармоническом приближении:

$$\begin{aligned} \langle \sum_{j=1}^N U(\vec{R} - \vec{r}_j) \rangle_{\Sigma} &= \text{const} + \frac{q_0^2}{v} \nu(q_0) \exp[-W_{\Theta}(q_0)] x^2 + \\ &+ \frac{q_0^2}{v} \nu(q_0 \sqrt{k'^2 + l'^2}) \exp[-(k'^2 + l'^2) W_{\Theta}(q_0)] \cdot (k'^2 + l'^2) y^2 - \frac{2q_0}{v} \end{aligned}$$

$$\times \nu(q_0 \sqrt{1 + k'^2 + l'^2}) \exp[-(1 + k'^2 + l'^2) W_{\Theta}(q_0)] \cdot (x^2 + (k'^2 + l'^2) y^2),$$

/21/

откуда для коэффициентов уравнения /1/ имеем:

$$\frac{\partial}{\partial x} \langle \sum_{j=1}^N U(\vec{R} - \vec{r}_j) \rangle_{\Sigma} = k_x(q_0, \Theta) \sqrt{\frac{M}{2E_0}} x;$$

$$\frac{\partial}{\partial y} \langle \sum_{j=1}^N U(\vec{R} - \vec{r}_j) \rangle_{\Sigma} = k_y(q_0, \Theta) \sqrt{\frac{M}{2E_0}} y.$$

$$k_x(q_0, \Theta) = \frac{2q_0^2}{Mv} \nu(q_0) \exp[-W_{\Theta}(q_0)] - \frac{4q_0^2}{Mv} \nu(q_0 \sqrt{1 + k'^2 + l'^2}) \cdot$$

$$\times \exp[-(1 + l'^2 + k'^2) W_{\Theta}(q_0)] = \frac{2q_0^2}{Mv} \nu(q_0) \exp[-W_{\Theta}(q_0)],$$

$$k_y(q_0, \Theta) = \frac{q_0^2(k'^2 + l'^2)}{Mv} \nu(q_0 \sqrt{k'^2 + l'^2}) \exp[-(k'^2 + l'^2) W_{\Theta}(q_0)]$$

$$- \frac{2q_0^2}{vM} (k'^2 + l'^2) \nu(q_0 \sqrt{k'^2 + l'^2 + 1}) \exp[-(1 + k'^2 + l'^2) W_{\Theta}(q_0)].$$

Используя выражения для $k_x(\Theta, q_0)$, $k_y(\Theta, q_0)$, следуя /1/, можно легко определить оператор T_z , который в данном случае будет представлен в виде:

$$T_z = T_z^x \times T_z^y.$$

Знак \times означает тензорное умножение. Видно, что симметрия между x , y , наблюдаемая при осевом каналировании, здесь теряется. Приведем оценки на область S_{Σ}^{\square} :

$$x^2 k_x(\Theta, q_0) + V_x^2 = \left(\frac{a}{12}\right)^2 k_x(\Theta, q_0);$$

/24/

$$y^2 k_y(\Theta, q_0) + V_y^2 = \left(\frac{a}{12 \sqrt{k'^2 + l'^2}}\right)^2 k_y(\Theta, q_0).$$

Области S_{Σ}^{\square} соответствуют внутренним точкам эллипсов /24/. Оценки на критические углы влета /1/ α'_x , α'_y следующие:

$$\alpha'_x \approx \frac{\pi}{6a} \sqrt{\frac{\nu(q_0)}{aE_0}} \exp[-\frac{1}{2} W_{\Theta}(q_0)];$$

/25/

$$\alpha'_y \approx \frac{a}{12} \frac{\omega_y(\Theta)}{\sqrt{k'^2 + l'^2}} \sqrt{\frac{M}{2E_0}},$$

где $\omega_y(\Theta) = \nu k_y(\Theta, q_0)$.

Требование классичности системы:

$$\frac{M \omega_y a^2}{4h(k'^2 + l'^2)} \gg 1;$$

$$\frac{M \omega_x a^2}{4h} \gg 1.$$

Или же, поскольку второе неравенство мажорирует первое,

$$\frac{M \omega_y a^2}{4 h (k'^2 + l'^2)} \gg 1 \quad /26/$$

Из приведенных формул видно, что частота осцилляции при каналировании вдоль плоскостей с повышением индексов Миллера уменьшается. Ухудшаются с повышением индексов Миллера и условия классичности системы. В заключение заметим, что развиваемый подход⁷ позволяет описать единообразно как осевое, так и плоскостное каналирование.

Литература

1. Гавриленко Г.М., Федянин В.К. ОИЯИ, P17-11949, Дубна, 1978.
2. Gemmel D.S. Rev. Mod. Phys., 1974, 46, p.2.
3. Гавриленко Г.М., Федянин В.К. ОИЯИ P17-12214, Дубна, 1978.
4. Гуревич Н.И., Тарасов П.В. Физика нейтронов низких энергий. М., "Наука", 1965.
5. Боголюбов Н.Н., Митропольский Ю.А. Асимптотические методы в теории нелинейных колебаний. М., Физматгиз, 1963.
6. Киттель Р. Теория твердого тела. М., "Мир", 1977.
7. Fedyanin V.K. Gavrilenko G.M. JINR E17-12025, Dubna, 1978.

Рукопись поступила в издательский отдел
29 января 1979 года