объединенный
институт
ядерных
исследований
дубна

Р17 - 12599

Г.М.Гавриленко, В.К.Федянин

ТЕРМОЛИЗАЦИЯ ПУЧКОВ ВЫСОКОЭНЕРГЕТИЧЕСКИХ ЗАРЯЖЕННЫХ ЧАСТИЦ ПРИ КАНАЛИРОВАНИИ ЧЕРЕЗ КРИСТАЛЛЫ

1979

Гавриленко Г.М., Федянин В.К. P17 - 12599

Термолизация пучков высокоэнергетических заряженных частиц при каналировании через кристаллы

Показано, что при каналировании протонов и тяжелых ионов наблюдается эффект термолизации пучков частиц, состоящей в том, что на определенных глубинах проникновения в кристалл устанавливается состояние статистического равновесия в плоскости фазовых переменных, трансверсальной движению частиц. Вследствие этого, начиная с некоторых глубин проникновения, происходит фокусировка и протонов, и ионов. Из-за разницы воздействия кристаллического поля на них характер фокусировки различается: для протонов налицо однородное распределение в трансверсальной плоскости, для ионов - резкое сужение пучка.

Работа выполнена в Лаборатории теоретической физики ОИЯИ.

Препринт Объединенного института ядерных исследований. Дубна 1979

Gavrilenko G.M., Fedyanin V.K. P17 - 12599

Thermolization of High Energy Charged Particle Beams in Channeling through Crystals

It is shown that in channeling of protons and heavy ions the effect of thermalization of particle beams is observed, i.e., at certain depths of penetration in crystal there sets in the state of stationary equilibrium in the plane of phase variables. As a result, at certain penetration depths the focusing of protons and ions takes place.

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

Preprint of the Joint Institute for Nuclear Research. Dubna 1979

При каналировании сквозь кристаллы высокоэнергетических заряженных частиц [1,2] они испытывают "нерегулярное динамическое" воздействие со стороны ионов кристалла, которое обусловливает процессы взаимной передачи энергии между пучком каналируемых частиц и кристаллом и оказывает на них формирующее влияние. При изучении последнего требуется учет взаимного влияния и изменения состояний систем S / S - пучок частиц/ и Σ / Σ - кристалл/. Это особенно существенно при изучении соответствующих явлений, возникающих на больших глубинах проникновения частиц в кристалл как в эффектах каналирования, так и деканалирования [3]. Обычно при построении статистических теорий рассматриваемого круга явлений взаимным измененнем подсистем полностью пренебрегают [4-6], что приводит к локальным по времени уравнениям для одночастичной функции распределения каналируемой частицы фоккер-планковского типа, и изменение состояния частицы в данный момент времени полностью определяется состоянием ее в тот же момент. Учет некоторых эффектов памяти системы /существование поляризаций и т.д./ только с помощью коэффициентов этих уравнений представляется не вполне последовательным. В связи с этим необходимо рассмотреть проблему на основе полного гамильтониана системы $H_S + H_\Sigma + H_{int}$. Существование в проблеме каналирования малого эффективного параметра ϵ, каким является отношение средней величины трансверсальной составляющей скорости каналируемой частицы к ее продольной компоненте $\epsilon = V_\perp / V_z$, позволяет развивать по нему теорию возмущения для редуцированной функции распределения S-системы $f(z\, S_\perp)$, последовательно изучая появляющиеся эффекты в каждом порядке разложения по ϵ. $S_\perp = (\vec{V}_\perp, \vec{R}_\perp)$, $\vec{V}_\perp$, $\vec{R}_\perp$ - трансверсальные составляющие скорости и положения каналируемой частицы. Взаимнооднозначное соответствие между положением частицы z вдоль канала движения и временем ее движения позволяет использовать z в качестве эволюционного параметра, при этом уравнения формулируются в удобном для разложения по ϵ виде. Используя формализм проекционных операторов [7,8] и следуя работе [9], можно получить для редуцированной функции распределения $f(z,S_\perp)$ замкнутое, формально точное уравнение [10], описывающее z-"эволюцию" системы S при каналировании. $o(\epsilon)$-приближение соответствует адиабатическому приближению и позволяет поэтому описать только энергетические характеристики захвата частиц в каналы движения [11,12]. Роль кристалла при этом сводится лишь к формированию эффективных стенок потенциальной энергии, определяющих возможные направления каналирования, что полностью согласуется с описанием, даваемым "continuum potential" моделью Линдхарда [1]. Эффекты, связанные с учетом взаимного влияния S и Σ систем, появляются в $o(\epsilon^2)$-приближении. Уравнение для $f(z,S_\perp)$ имеет в этом случае вид:

$$\frac{\partial}{\partial z} f(z,S_\perp) = [-\frac{\vec{V}_\perp}{V_0}\cdot\vec{\nabla}_{R_\perp} + \frac{1}{V_0}\langle \sum_{j=1}^{N}\vec{\nabla}_{R_\perp}\overline{U(\vec{R}-\vec{r}_j)}\rangle\cdot\frac{1}{M}\vec{\nabla}_{V_\perp}]f(z,S_\perp)$$

$$+\frac{1}{MV_0^2\Omega^2}\int_0^z d\tau \sum_{k_\perp,k'_\perp}\nu(k_\perp)\nu(k'_\perp)\exp[i(\vec{k}_\perp+\vec{k}'_\perp)\cdot\vec{R}_\perp]\, i\vec{k}_\perp\cdot\vec{\nabla}_{V_\perp}$$

$$\times(\Phi_{kk'}(T)\frac{1}{M}i\vec{k}'_\perp\cdot\vec{\nabla}_{V_\perp} + \frac{1}{\Theta}\frac{\partial}{\partial T}\Phi_{kk'}(T))f(\tau z). \qquad /1/$$

Здесь $V_0 = V_z = \sqrt{\frac{2E_0}{M}}$, M - масса каналируемой частицы, Ω - объем кристалла, N - число узлов решетки, $U(\vec{R})$ - потенциал взаимодействия частицы с ионом решетки, $\Theta = k_Б T^\circ$, $k_Б$ - постоянная Больцмана, T° - абсолютная температура, $\nu(k)$ - фурье-образ функции $U(\vec{R})$, $\nu(k_\perp) = \nu(k)|_{k_z=0}$, $T = \frac{z-\tau}{V_0}$, скобки $\langle\dots\rangle_\Sigma$ означают усреднение по распределению Гиббса для кристалла,

$$\Phi_{kk'}(T) = \langle \sum_{j=1}^{N}\exp(-i\vec{k}_\perp\cdot\vec{r}_j^{\,\perp})\exp(T\text{Л}(\Sigma))\cdot\sum_{j=1}^{N}\exp(-i\vec{k}'_\perp\cdot\vec{r}_j^{\,\perp})\rangle_\Sigma$$

$$-\langle\sum_{j=1}^{N}\exp(-i\vec{k}_\perp\cdot\vec{r}_j^{\,\perp})\rangle_\Sigma\langle\sum_{j=1}^{N}\exp(-i\vec{k}'_\perp\cdot\vec{r}_j^{\,\perp})\rangle_\Sigma ,$$

$$\text{Л}(\Sigma) = \{H(\Sigma),\dots\},$$

$H(\Sigma)$ - гамильтониан кристалла, $\{\dots,\dots\}$ - классические скобки Пуассона. Черта сверху над функцией означает операцию осреднения ее по z [13]

$$\overline{\langle\sum_{j=1}^{N}U(\vec{R}-\vec{r}_j)\rangle_\Sigma} = \lim_{T\to\infty}\frac{1}{T}\int_0^T dz\langle\sum_{j=1}^{N}U(\vec{R}-\vec{r}_j)\rangle_\Sigma \equiv \Psi(\vec{R}).$$

Осреднение уравнения по z проведено затем, чтобы не учитывать в данном приближении неколлективизированного влияния ионов кристалла на систему S.

Для больших z уравнение /1/ можно привести к виду

$$\frac{\partial}{\partial z} f(z,S_\perp) = [-\frac{\vec{V}_\perp}{V_0}\cdot\vec{\nabla}_{R_\perp} + \frac{1}{V_0}\int(d\Sigma)P_0(S\Sigma)\overline{\text{Л}^{\perp}_{int}}]f(z,S_\perp) + Q(f(\tau S_\perp)),$$

$$Q(f(\tau S_\perp)) = \frac{1}{V_0^2 M}\int_0^z d\tau\vec{\nabla}_{V_\perp}\cdot\langle\vec{F};\vec{F}(T)\rangle\cdot(\frac{1}{M}\vec{\nabla} + \frac{\vec{V}_\perp}{\Theta})f(\tau S_\perp),$$

где

$$\overline{\text{Л}^{\perp}_{int}} = \sum_j\vec{\nabla}_{R_\perp}\overline{U(\vec{R}-\vec{r}_j)}\cdot\frac{1}{M}\vec{\nabla}_{V_\perp},\quad P_0(S\Sigma) = \exp[-\frac{1}{\Theta}\sum_{j=1}^{N}\times \qquad /2/$$

$$\times\overline{U(\vec{R}-\vec{r}_j)}]\cdot D_0(\Sigma)/\langle\exp[-\frac{1}{\Theta}\sum_{j=1}^{N}\overline{U(\vec{R}-\vec{r}_j)}]\rangle ,$$

$$\langle\vec{F};\vec{F}(T)\rangle = \int(d\Sigma)\sum_j\vec{\nabla}_{R_\perp}\overline{U(\vec{R}-\vec{r}_j)}\exp(T\text{Л}(\Sigma))\times$$

$$\times P_0(S\Sigma)[\sum_j\vec{\nabla}_{R_\perp}\overline{U(\vec{R}-\vec{r}_j)} - \int(d\Sigma)P_0(S\Sigma)\sum_j\vec{\nabla}_{R_\perp}\overline{U(\vec{R}-\vec{r}_j)}].$$

$D_0(\Sigma)$ - функция распределения Гиббса для кристалла, $\int(d\Sigma)$ означает интегрирование по всему фазовому пространству состояний кристалла. Уравнение /2/ есть асимптотический аналог уравнения /1/, отвечающий пренебрежению в системе $S+\Sigma$ при больших z корреляций типа G_n:

$$G_n - \Big\langle \prod_{\ell=1}^{m} \sum_j \exp(-i\vec{k}_{\perp}^{\ell} \cdot \vec{r}_j^{\perp}) \exp[z Л(\Sigma)] \prod_{\ell=1}^{p} \sum_j \exp \times$$

$$\times (-i\vec{k}_{\perp}^{\ell} \cdot \vec{r}_j^{\perp}) \Big\rangle_{\Sigma} - \Big\langle \prod_{\ell=1}^{m} \sum_j \exp(-i\vec{k}_{\perp}^{\ell} \cdot \vec{r}_j^{\perp}) \Big\rangle_{\Sigma} \Big\langle \prod_{\ell=1}^{p} \sum_j \exp(-i\vec{k}_{\perp}^{\ell} \cdot \vec{r}_j^{\perp}) \Big\rangle_{\Sigma},$$

$$n = m+p, \quad m,p = 1,2,3,\ldots$$

и членов в уравнении /1/, "пропорциональных" функциям $G_n f(oS)$, содержащих в себе информацию о состоянии S системы при $z=0$. Равновесное решение уравнения /2/ находится при дополнительных условиях " z-стационарности" $\frac{\partial}{\partial z} f(zS_{\perp})$ и обращения в нуль "интеграла столкновения" $Q(f(r S_{\perp}))=0$

$$f_0(S_{\perp}) = \frac{1}{Z} \exp[-\frac{M\vec{V}_{\perp}^2}{2\Theta}] \Big\langle \exp - \frac{1}{\Theta} \overline{\sum_{j=1}^{N} U(\vec{R}-\vec{r}_j)} \Big\rangle_{\Sigma}, \qquad /3/$$

где Z - нормировочная константа. Функция $f_0(S)$ описывает равновесное состояние пучка каналируемых высокоэнергетических частиц, к которому стремится система при " z-эволюции". По "скорости забывания" системой начального состояния $f(oS_{\perp})$ можно грубо оценить порядок величины z_c, на которой происходит " z-релаксация" системы S к состоянию /3/, или ее "термолизации". Для протонов с энергией $E_{\perp 0}$ = 0,5 *МэВ* и для кристаллов с характерным значением E_c ~ 5 *эВ*, что отвечает энергетическому условию захвата протона в канал движения[1], z_c составит $\sim 10^6$ Å. Для тяжелых ионов с $E_c^{\perp} \sim 10^2$ *эВ*, $E_0 \sim 5$ *МэВ*, $z_c \sim 10^4$ Å. Таким образом, релаксация системы к состоянию равновесия происходит на глубинах проникновения порядка 10^4 - 10^6 ионных слоев. В силу того, что для каналирования $\Psi(\vec{R}_0)/\Theta \gg 1$ энергетические условия захвата частиц в канал движения выполнены для пучков частиц с начальными дисперсионными характеристиками, $\langle \vec{V}_{\perp}^2 \rangle \gg \frac{2\Theta}{M}$, $\vec{R}_0 = (\frac{q}{2}, \frac{q}{2})$. Поэтому /3/ показывает, что в результате " z-эволюции" при каналировании пучков частиц сквозь кристаллы должно наблюдаться значительное улучшение их дисперсионных характеристик. При анализе пространственного распределения частиц в плоскости $\vec{R}_{\perp}$ при термолизации пучка отличие ситуации с ионами и протонами обусловлено различным характером поведения для них функции $\Psi(\vec{R}_{\perp})$ в кристалле. Для тяжелых ионов функция $\Psi(\vec{R}_{\perp})$ характеризуется быстрым ростом потенциальной энергии частицы при удалении ее от оси канала движения[2]. При этом уже при незначительных ударениях $\vec{R}_{\perp}$ от оси канала движения $\vec{R}_{\perp}=0$ отношение $\Psi(\vec{R}_{\perp})/\Theta \gg 1$, так что, согласно /3/, вероятность обнаружения иона вне оси канала движения будет подавляюще мала, т.е. при каналировании тяжелых ионов должна наблюдаться их пространственная фокусировка к оси канала движения. /Везде оценки для осевого каналирования в кубическом кристалле/. Для протонов функция $\Psi(\vec{R}_{\perp})$ имеет ярко выраженный короткодействующий характер[2], так что, начиная с некоторых z, налицо формирование однородного по сечению пучка.

В заключение отметим, что указанный формирующий механизм носит в каком-то смысле термодинамический характер, т.к. обусловлен процессами "теплообмена" между пучком высокоэнергетических частиц и кристаллами. Это позволило нам не рассматривать в качестве третьей подсистемы свободные электроны проводимости, так как известно, что при обычных температурах кристалла[14] она в процессах теплообмена в кристаллах невелика. Нам представляется при этом, что учет эффекта потерь энергии при каналировании на излучение только уменьшит глубины "термолизации" для каналируемых частиц.

Авторы выражают глубокую благодарность Э.Н.Цыганову, Т.Туиху, И.-Дж.Киму за полезное обсуждение результатов работы.

ЛИТЕРАТУРА

1. *Lindhard J.K. Dan Vidersk. Selsk. Mat-Fys. Medd., 1965, v.34, No.12, p.*
2. *Thompson M.W. Contemp. Phys., 1968, v.9, p.375.*

3. Gemmell D.S. Rev.Mod.Phys., 1974, v.46, No.1.
4. Beloshitsky V.V., Kumachov M.A. JETP, 1972, v.62, p.1144.
5. Kumachov M.A. Radiat. eff., 1975, v.25, No.1-2, p.43-48.
6. Ohtsnki Y.H., et al. Nucl.Instr. Meth., 1978, v.149, No.1-3, p.361.
7. Tohugama M., Mori H. Progr. Theor. Phys., 1976, v.56, p.1073.
8. Gavrilenko G.M., Fedyanin V.K. JINR, P17-11948, Dubna, 1978.
9. Bogolubov N.N. JINR, E17-10514, Dubna, 1978.
10. Fedyanin V.K., Gavrilenko G.M. JINR, E17-12075, Dubna, 1978 (in print DAN SSSR).
11. Gavrilenko G.M., Fedyanin V.K. JINR, P17-12214, Dubna, 1978.
12. Gavrilenko G.M., Fedyanin V.K. JINR, P17-12215, Dubna, 1978.
13. Боголюбов Н.Н., Митропольский Ю.А. Асимптотические методы в теории нелинейных колебаний. Физматгиз, М., 1963.
14. Ziman J.M. Principles of the Theory of Solids. Cambridge University, 1972.

Рукопись поступила в издательский отдел
27 июня 1979 года.