05; 01

ДИНАМИКА ОБЪЕМНОГО ЗАХВАТА БЫСТРЫХ ЗАРЯЖЕННЫХ ЧАСТИЦ В КАНАЛЫ ИЗОГНУТОГО КРИСТАЛЛА

Н. А. Кудряшов, С. В. Петровский, М. Н. Стриханов

В данной работе предложены кинетические уравнения, описывающие динамику захвата быстрых положительно заряженных частиц в плоскостные каналы ИК и деканалирования, разработан алгоритм численного решения соответствующей краевой задачи. В единой модели учтены торцевой и объемный механизмы захвата. Проанализирована зависимость доли каналированных частиц от угловых параметров пучка и толщины кристалла. Показано, что зависимость захвата от заряда ионов Z_1 и их энергии обладает «масштабной инвариантностью» и определяется «масштабным параметром» $w=pv/Z_1$.

На возможность управления траекториями быстрых заряженных частиц (БЗЧ) с помощью изогнутого кристалла (ИК) было указано в [1]. Обсуждаются два механизма захвата БЗЧ в каналы изогнутых плоскостей (осей) ИК [2]. При падении пучка БЗЧ на переднюю поверхность кристалла часть частиц пучка «заселяет» каналированные состояния («торцевой» захват). Эффективность торцевого захвата ограничена требованием малости угла влета (угловой расходимости) пучка Θ_0 $(\Delta\Theta_0) \leqslant \Theta_L$ (где Θ_L — угол Линдхарда), что значительно снижает «светосилу» поворотных устройств на основе ИК. В экспериментах ЛИЯФ [3, 4] был предложен и экспериментально подтвержден механизм «объемного» захвата (ОЗ). Суть этого явления состоит в том, что условия захвата в режим каналирования могут возникнуть внутри объема кристалла — в областях, где траектория БЗЧ совпадает с касательной к изогнутой плоскости (оси). Из геометрических соображений очевидно, что угловой диапазон объемного захвата равен углу между крайними касательными и легко может достигать 1—10 мрад. Преобладающим механизмом (97 % в работе [5]) потерь поперечной энергии БЗЧ, приводящим к ОЗ, является, по-видимому, механизм многократного рассеяния (МР), рассмотренный в [2, 6], причем в [2] предложена кинематическая теория ОЗ. В [6] выполнено прямое компьютерное моделирование кинетики ОЗ в ИК.

В настоящее время, однако, актуальной является задача количественного расчета динамики ОЗ в каналы ИК с последующим вычислением эффективности использования ИК для поворота пучков релятивистских заряженных частиц.

Кинетические уравнения

Функция распределения (ФР) для БЗЧ, движущихся в поле изогнутых плоскостей кристалла, удовлетворяет уравнению Больцмана

$$\frac{\partial f(t,\ p_x,\ x)}{\partial t} + v_x \frac{\partial f}{\partial x} + F_x \frac{\partial f}{\partial p_x} = I_{st}, \tag{1}$$

где t — время (глубина); p_x, v_x — локальные поперечные к плоскостям импульс и скорость; $F_x = -\partial U_{\mathrm{eff}}/\partial x$ — поперечная сила; $U_{\mathrm{eff}}(x) = U(x) - pvx/R$ — эффективный потенциал ИК; $U(x)$ — межплоскостной потенциал в прямом кристалле; p, v — импульс и скорость частиц; R — радиус изгиба кристалла; $x=r-R$ — поперечная (радиальная) координата.

Производя стандартное разложение интеграла столкновений I_{st} [7], получим

$$I_{st} = \int dq_x [f(t,\ p_x - q_x,\ x)\, w(q_x,\ p_x - q_x,\ x) - f(t,\ p_x,\ x)\, w(q_x,\ p_x,\ x)] \approx$$

$$\approx \frac{\partial^2}{\partial p_x^2} [\langle q_x^2(x)\rangle f(t,\ p_x,\ x)], \qquad (2)$$

где q_x — передаваемый импульс; $w(q_x,\ p_x,\ x)$ — вероятность рассеяния в единицу времени; $\langle q_x^2(x)\rangle = \int dq_x q_x^2 w(q_x, p_x, x) = p^2 v \langle \Delta\Theta_x^2(x)/\Delta s\rangle$. Здесь $\langle \Delta\Theta_x^2(x)/\Delta s\rangle$ — средний квадрат угла МР, который можно представить в виде

$$\left\langle \frac{\Delta\Theta_x^2(x)}{\Delta s} \right\rangle = \left\langle \frac{\Delta\Theta_n^2(x)}{\Delta s} \right\rangle + \left\langle \frac{\Delta\Theta_e^2(x)}{\Delta s} \right\rangle, \qquad (3)$$

где $\left\langle \frac{\Delta\Theta_n^2(x)}{\Delta s} \right\rangle = \frac{1}{2} \left\langle \frac{\Delta\Theta_{am}^2}{\Delta s} \right\rangle \rho_n(x)\, d$ отвечает рассеянию на колеблющихся ядрах, $\rho_n(x)$ — усредненная вдоль плоскостей плотность ядер; $\langle \Delta\Theta_{am}^2/\Delta s\rangle = (E_s/pv)^2 L_{\text{рад}}^{-1}$ ($E_s = 21$ МэВ, $L_{\text{рад}}$ — радиационная длина). Аналогично $\langle \Delta\Theta_e^2(x)/\Delta s\rangle$ отвечает рассеянию на электронах и определяется усредненной вдоль плоскостей электронной плотностью.

Рассмотрим отдельно каналированную и неканалированную фракции пучка. Для каналирования БЗЧ переходим в (1), (2) к переменным $(t,\ \varepsilon_\perp,\ x)$, т. е. $f_1(t,\ \varepsilon_\perp,\ x) = f(p_x,\ x,\ t)$, где $\varepsilon_\perp = p_x^2/2E + U_{\text{eff}}(x)$ — поперечная энергия в ИК (причем $\varepsilon_\perp < \varepsilon_c$, ε_c — глубина потенциальной ямы $U_{\text{eff}}(x)$). Существенное упрощение уравнения возникает, если использовать условие «статистического равновесия» Линдхарда $\partial f_1/\partial x = 0$, достигаемого на глубинах $\sim 10^3$—10^6 Å [8, 9]. Имеем тогда

$$\frac{1}{v_x(x,\ \varepsilon_\perp)} \frac{\partial f_1(t,\ \varepsilon_\perp)}{\partial t} = \frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial \varepsilon_\perp} \left[v_x(x,\ \varepsilon_\perp) \langle q_x^2(x)\rangle \frac{\partial f_1(t,\ \varepsilon_\perp)}{\partial \varepsilon_\perp} \right], \qquad (4)$$

где $v_x(x,\ \varepsilon_\perp) = \sqrt{2E^{-1}(\varepsilon_\perp - U_{\text{eff}}(x))}$.

Заметим, что уравнение (4) определяет ФР в классически разрешенной области $\varepsilon_\perp > U_{\text{eff}}(x)$. В классически запрещенной области $\varepsilon_\perp < U_{\text{eff}}(x)$ имеем $f_1 = 0$ [9, 10]. Вводя ФР по поперечным энергиям (усредненную по поперечной координате)

$$\varphi_1(\varepsilon_\perp,\ t) = \frac{1}{d} \int_{x_1}^{x_2} \frac{dx}{v_x(x,\ \varepsilon_\perp)} f_1(t,\ \varepsilon_\perp) = \frac{T_1(\varepsilon_\perp)}{d} f_1(t,\ \varepsilon_\perp) \qquad (5)$$

(d — период межплоскостного потенциала, $T_1(\varepsilon_\perp) = \int dx/v_x(x,\ \varepsilon_\perp)$ — полупериод движения с энергией $\varepsilon_\perp$, $x_{1,2}$ — классические точки поворота), получим из (4) для ФР каналированных частиц уравнение диффузионного типа [9, 10]

$$\frac{\partial \varphi_1(\varepsilon_\perp,\ t)}{\partial t} = \frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial \varepsilon_\perp} \left\{ D_1(\varepsilon_\perp) \frac{\partial}{\partial \varepsilon_\perp} \left[\frac{\varphi_1(\varepsilon_\perp,\ t)}{T_1(\varepsilon_\perp)} \right] \right\}. \qquad (6)$$

Здесь

$$D_1(\varepsilon_\perp) = 2^{1/2} (pv)^{3/2} \int_{x_1}^{x_2} dx \sqrt{\varepsilon_\perp - U_{\text{eff}}(x)} \left\langle \frac{\Delta\Theta_x^2(x)}{\Delta s} \right\rangle \qquad (7)$$

— коэффициент диффузии каналированных частиц.

Для неканалированных частиц переходим в уравнении (1) к переменным $(t,\ p'_\perp,\ x)$, где $p'_\perp = \sqrt{2E\varepsilon'_\perp}$ — «поперечный импульс», $\varepsilon'_\perp = p_x^2/2E + U(x)$ — «поперечная энергия в прямом кристалле» ($\varepsilon'_\perp > U_0$, где U_0 — максимальное значение $U(x)$). Аналогично приведенному выше выводу получаем для ФР неканалированных частиц уравнение конвективно-диффузионного типа

$$\frac{\partial f_2(p'_\perp, t)}{\partial t} + \Delta U_0 \frac{\partial}{\partial p'_\perp}\left[\frac{f_2}{v'_\perp T_2(\varepsilon'_\perp)}\right] = \frac{1}{2}\frac{\partial}{\partial p'_\perp}\left[\frac{D_2(\varepsilon'_\perp)}{v'_\perp}\frac{\partial}{\partial p'_\perp}\left(\frac{f_2}{v'_\perp T_2}\right)\right], \tag{8}$$

где $v'_\perp = v(p'_\perp/p)$ — «поперечная скорость», $\Delta U_0 = pvd/R$.

Отметим, что выражения для периода движения неканалированных частиц $T_2(\varepsilon'_\perp)$ и коэффициента диффузии $D_2(\varepsilon'_\perp)$ могут быть получены из соответствующих выражений для $T_1(\varepsilon_\perp)$ и $D_1(\varepsilon_\perp)$ заменой $\varepsilon_\perp \to \varepsilon'_\perp$ и области интегрирования $[x_1, x_2] \to [0, d]$.

Для учета обмена частицами между каналированной и неканалированной фракциями пучка оценим изменение поперечной энергии иона вследствие МР (при $\varepsilon_\perp \sim \varepsilon_c$) за период движения

$$\Delta\varepsilon_\perp \sim pv\Theta_c \sqrt{\left\langle\frac{\Delta\Theta_{am}}{\Delta s}\right\rangle \frac{d}{\Theta_c}} \sim \left(\frac{2\varepsilon_c}{pv}\right)^{1/4}\left(\frac{d}{L_{\text{рад}}}\right)^{1/2} E_s, \tag{9}$$

где $\Theta_c = \sqrt{2\varepsilon_c/pv}$ — критический угол каналирования для ИК.

Рассмотрим в случае «интенсивного» МР $\Delta\varepsilon_\perp \gg \Delta U$, где ΔU — изменение потенциала ИК на межплоскостном периоде (для экспериментов [3, 4], например, имеем $\Delta\varepsilon_\perp \sim 16$ эВ, $\Delta U \sim 1$ эВ). В этом случае можно пренебречь влиянием упругого отражения неканалированных частиц от асимметричного потенциального барьера ИК [11] на процесс захвата в каналы ИК. Математически это означает соответствующую сшивку (с учетом различной нормировки) ФР и потоков каналированных (при $\varepsilon_\perp = \varepsilon_c$) и неканалированных (при $\varepsilon'_\perp = U_0$) частиц.

Получим начальные условия для уравнений (6), (8). Пусть $f_0(p_{0x})$ — распределение пучка частиц по поперечным импульсам (углам) до влета в ИК. Усредняя по поперечной координате, получим начальное условие для ФР каналированных частиц

$$\varphi_1(\varepsilon_\perp, 0) = \frac{1}{d}\left(\frac{E}{2}\right)^{1/2} \int\limits_{x_1}^{x_2} \frac{dx f_0\left(p_{0x} = \sqrt{2E(\varepsilon_\perp - U_{\text{eff}}(x))}\right)}{\sqrt{\varepsilon_\perp - U_{\text{eff}}(x)}}. \tag{10}$$

Аналогично можно получить начальное условие для ФР неканалированных частиц.

Зарядово-энергетическая «масштабная инвариантность»

Рассмотрим зарядовую и энергетическую зависимости параметров каналирования ионов. Введем «масштабный параметр» $w = pv/Z_1$. В прямом кристалле критический угол каналирования $\Theta_L = \sqrt{2U_0/pv} \sim w^{-1/2}$ убывает с ростом w. Убывает также средний квадрат угла МР в кристалле $\langle\Delta\Theta_x^2(x)/\Delta s\rangle \sim w^{-2}$. Длина деканалирования наоборот увеличивается $l_g \sim \Theta_L^2/\langle\Delta\Theta_x^2/\Delta s\rangle \sim w$. Нетрудно видеть, что подобная «масштабная инвариантность» имеет место и в ИК. Эффективный потенциал ИК имеет вид $U_{\text{eff}}(x) = Z_1[U_1(x) - wx/R]$, где $U_1(x)$ — межплоскостной потенциал для протонов. Глубина потенциальной ямы имеет вид $\varepsilon_c = Z_1 f(w)$. Отсюда следует, что критический угол каналирования для ИК $\Theta_c = \sqrt{2f(w)/w}$ и длина деканалирования $l_c \sim wf(w)$ являются функциями параметра w.

Уравнение (6) для ФР каналированных ионов в безразмерном виде имеет вид

$$\frac{\partial\psi_1(y, \tau)}{\partial\tau} = 2\frac{\partial}{\partial y}\left\{\Phi_1(y)\frac{\partial}{\partial y}\left[\frac{\psi_1(y, \tau)}{\varkappa_1(y)}\right]\right\}, \quad y \leqslant 1, \tag{6'}$$

где $y = \varepsilon_\perp/\varepsilon_c$, $\psi_1(y, \tau)\,dy = \varphi_1(\varepsilon_\perp, t)\,d\varepsilon_\perp$, $\tau = vt/l_c$, $u_{\text{eff}}(\xi, w) = U_{\text{eff}}(x)/\varepsilon_c$, $\xi = x/d$.

$$\Phi_1(y) = \int_{\xi_1}^{\xi_2} d\xi \sqrt{y - u_{\mathrm{eff}}(\xi,\ w)}\ d\,[\rho_n(\xi) + \beta Z_2^{-2}\rho_e(\xi)],$$

$$\varkappa_1(y) = \int_{\xi_1}^{\xi_2} \frac{d\xi}{\sqrt{y - u_{\mathrm{eff}}(\xi,\ w)}}.$$

Уравнение (6′) обладает требуемой «масштабной инвариантностью». В аналогичном виде можно записать уравнение (8) для неканалированных ионов и соответствующие начальные условия, что и доказывает «масштабную инвариантность» каналирования в ИК.

Результаты численных расчетов

Уравнения (6), (8) с соответствующими начальными условиями решались конечно-разностным способом на ЭВМ. Возникающая система сеточных уравнений решалась стандартным методом трехточечной прогонки. Размеры сетки

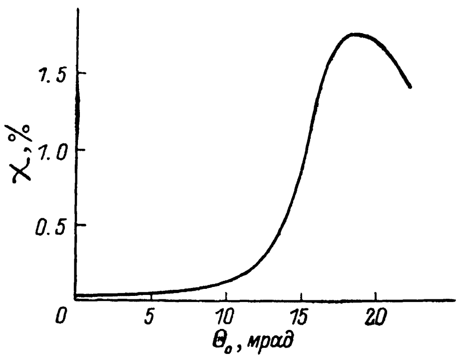

Рис. 1.

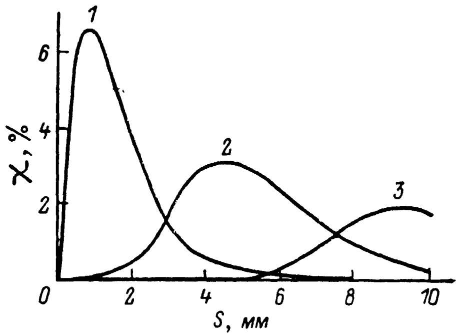

Рис. 2.

и число узлов варьировались в зависимости от параметров пучка и кристалла. Межплоскостной потенциал вычислялся по формуле

$$U(x) = \frac{Z_1 l}{\Omega_0} \sum_{G_x} \frac{4\pi\,[Z_2 - F(G_x)]}{G_x^2} S(G_x) \exp\left[-\frac{1}{2}K(G_x)\right] e^{iG_x x},$$

где Ω_0 — объем элементарной ячейки; $G_x = 2\pi n_x/d$ — вектора обратной решетки, перпендикулярные выбранной кристаллографической плоскости; $S(G_x)$ — структурный фактор; $K(G_x)$ — фактор Дебая—Валлера; атомные форм-факторы $F(G_x)$ брались из [12].

Аналогично вычислялись ядерная и электронная плотности. Численные расчеты проводились для изогнутых (111) плоскостей Si, что соответствует экспериментам ЛИЯФ [3, 4]. Доля каналированных частиц ДКЧ вычислялась по формуле

$$\chi = \int_{\varepsilon_\perp < \varepsilon_c} d\varepsilon_\perp \varphi_1(\varepsilon_\perp,\ t).$$

На рис. 1 представлена зависимость ДКЧ от угла влета пучка протонов в ИК кремния с энергией 1 ГэВ (угловая ширина пучка $\Delta\Theta_0 = 1$ мрад, толщина кристалла $S = 1$ см, радиус изгиба $R = 46$ см). Максимум распределения соответствует ОЗ вблизи задней границы кристалла, так как длина деканалирования в данном случае ($l_c \approx 1.3$ мм) меньше толщины кристалла. Ширина распределения на рис. 1 обусловлена в основном МР в кристалле.

На рис. 2 представлены зависимости $\chi(s)$ (s — глубина в кристалле для протонного пучка с $E_{\text{кин}} = 1$ ГэВ, $\Delta\Theta_0 = 1$ мрад, $R = 46$ см) для различных углов влета пучка (Θ_0, мрад: *1* — 2, *2* — 10, *3* — 20). Максимумы $\chi(s)$ соответствуют точкам ОЗ.

Заметим здесь, что оптимальные угловые параметры ОЗ можно получить из следующих соображений. Пучок БЗЧ с начальной шириной $W=p\,\Delta\Theta_0$ «дрейфует» в пространстве поперечных импульсов $p'_\perp$ со «скоростью» $\sim pv/R$ из начальной точки $-p\Theta_0$ по направлению к каналу. Характерное время пребывания в канале захваченных частиц $t_c\sim l_c/v$. Максимальное число частиц в канале достигается при условии $R\sqrt{W^2+(\Delta W)^2}/pv\leqslant t_c$, где $\Delta W=(E_s/pv)\sqrt{R\Theta_0/L_{\text{рад}}}$ — «дополнительная» ширина пучка, приобретенная в ИК

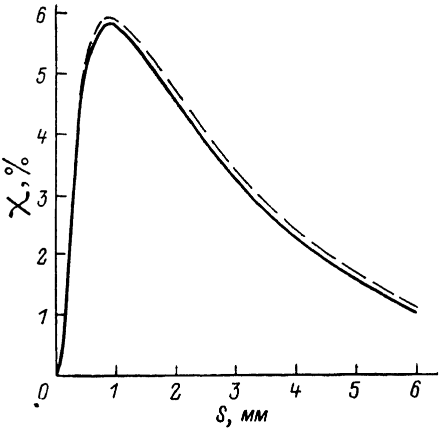

Рис. 3.

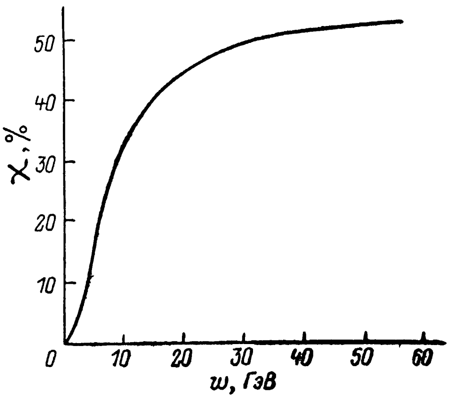

Рис. 4.

вследствие МР на пути к области захвата. Отсюда получим условие на оптимальные угловые параметры пучка

$$\sqrt{\Delta\Theta_0^2+\left(\frac{E_s}{pv}\right)^2\frac{R\Theta_0}{L_{\text{рад}}}}\leqslant\frac{l_c}{R}.$$

Для экспериментов [3, 4] имеем отсюда

$$\sqrt{\Delta\Theta_0^2+\Theta_0}\leqslant 2.61, \tag{11}$$

где $\Delta\Theta_0$, Θ_0 измеряются в мрад. Кривая *1* на рис. 2 удовлетворяет неравенству (11), кривые *2*, *3* — нет, что подтверждается их поведением.

Свойство «масштабной инвариантности» показано на рис. 3, где представлена зависимость $\chi(s)$ для релятивистских ядер в ИК кремния ($R=31$ см) для пучка ядер C^{+6} с $E_{\text{кин}}=8.4$ ГэВ (сплошная кривая) и пучка ядер Ba^{+56} с $E_{\text{кин}}=70$ ГэВ (штриховая кривая). Масштабные параметры равны соответственно $w_1=2.20$ ГэВ, $w_2=2.06$ ГэВ. Угол влета пучков $\Theta_0=1$ мрад, угловая ширина $\Delta\Theta_0=0.8$ мрад.

На рис. 4 приведена зависимость доли каналированных ядер от значения масштабного параметра в ИК кремния на глубине $s=10$ мм ($R=31$ мм) для узких пучков $\Delta\Theta_0=\Theta_c$, $\Theta_0=0$. При вычислениях пренебрегалось процессами подхвата электронов ядрами, так как энергия ядер выбиралась достаточно большой [13].

Литература

[1] *Tsyganov E. N.* Fermilab Preprint. TM-684. Batavia, 1976.
[2] *Сумбаев О. И.* // ЖТФ. 1987. Т. 57. Вып. 11. С. 2067—2077.
[3] *Андреев В. А., Баубис В. В., Дамаскинский Е. А.* и др. // Письма в ЖЭТФ. 19[illegible] Т. 36. Вып. 9. С. 340—343.
[4] *Андреев В. А., Баублис В. В., Дамаскинский Е. А.* и др. // Письма в ЖЭТФ. 1984. Т. 39. Вып. 12. С. 58—61.
[5] *Андреев В. А., Баублис В. В., Дамаскинский Е. А.* и др. // Письма в ЖЭТФ. 1986. Т. 44. Вып. 2. С. 101—103.

[6] *Таратин А. М., Воробьев С. А.* // ЖТФ. 1985. Т. 55. Вып. 2. С. 98—102.
[7] *Берестецкий В. Б., Лифшиц Е. М., Питаевский Л. П.* Физическая кинетика. М.: Наука, 1979. 527 с.
[8] *Линдхард Й.* // УФН. 1969. Т. 99, № 2. С. 249—296.
[9] *Кумахов М. А., Ширмер Г.* Атомные столкновения в кристаллах. М.: Атомиздат, 1980. 103 с.
[10] *Белошицкий В. В., Кумахов М. А.* // ДАН СССР. 1973. Т. 221. № 4. С. 846—849.
[11] *Taratin A. M., Vorobiev S. A.* // Phys. St. Sol. B. 1986. Vol. 133. P. 511—516.
[12] *Doyle P. A., Turner P. S.* // Acta Cryst. 1968. Vol. 24 A. P. 395—397.
[13] *Betz H. D.* // Rev. Mod. Phys. 1972. Vol. 44. N 3. P. 465—539.

Московский
инженерно-физический институт

Поступило в Редакцию
5 января 1988 г.