

ГОУ ВПО «Сургутский государственный университет  
Ханты - Мансийского автономного округа – Югры»

На правах рукописи

**Холодов Андрей Константинович**

**Моделирование плоскостного каналирования  
в фазовом пространстве поперечных энергий**

05.13.18. – Математическое моделирование, численные методы  
и комплексы программ

Диссертация на соискание учёной степени кандидата  
физико-математических наук

Научный руководитель  
доктор физико-математических наук, профессор  
Кощев Владимир Петрович

Сургут 2007

# СОДЕРЖАНИЕ

<b>Введение.....</b>	<b>4</b>
 <b>1 глава Движение заряженных частиц в плоскостных каналах кристалла</b>	
1.1 Потенциал кристалла.....	14
1.2 Усреднение электрического потенциала кристалла по тепловым колебаниям.....	17
1.3 Непрерывный потенциал атомной плоскости кристалла.....	18
1.4 Коэффициент диффузии.....	25
1.5 Потенциал переходной области ось-плоскость.....	36
 <b>2 глава Функция распределения каналированных частиц в пространстве поперечных энергий</b>	
2.1 Уравнение Фоккера-Планка в пространстве поперечных энергий .....	42
2.2 Уравнение эволюции среднего квадрата флуктуаций поперечной энергии.....	45
2.3 Уравнение Фоккера-Планка в пространстве поперечных координат и скоростей .....	46
2.4 Функция распределения частиц в пространстве поперечных энергий....	49
2.5 Исследование уравнения эволюции среднего квадрата флуктуаций поперечной энергии.....	52
 <b>3 глава Компьютерная программа расчета траекторий каналированных частиц</b>	
3.1 Компьютерное моделирование и компьютерная программа STE.....	55

3.2	Основные модули и возможности программы STE .....	60
3.3	Дополнительные модули программы STE.....	66
3.4	Модели деканализации в программе STE.....	68
 <b>4 глава Компьютерное моделирование каналирования частиц</b>		
4.1	Сравнение результатов расчета по программе STE с другими программами.....	71
4.2	Потери энергии ионов свинца в кристалле кремния.....	77
4.3	Расчет эффективности отклонения протонов с энергией 200 и 450 ГэВ в изогнутом кристалле германия.....	80
<b>Заключение.....</b>		<b>90</b>
<b>Список литературы.....</b>		<b>92</b>
<b>Приложение.....</b>		<b>101</b>

## ВВЕДЕНИЕ

Проблема взаимодействия быстрых заряженных частиц с кристаллами представляет значительный интерес с различных точек зрения. Прежде всего при прохождении частиц высоких энергий через кристалл проявляются когерентные и интерференционные эффекты, обусловленные взаимодействием частицы с различными атомами решетки. Благодаря таким явлениям вероятности процессов взаимодействия частицы с атомами решетки могут сильно возрастать по отношению к вероятностям аналогичных процессов, связанных с отдельными атомами. Кристалл представляет собой уникальную систему с большими внутренними электрическими полями. Средние значения внутрикристаллических полей могут на несколько порядков быть выше существующих макроскопических внешних полей, создаваемых внешними источниками. При движении частиц в таких полях может возникнуть явление – каналирование, при котором частица движется в каналах образованных атомами кристалла, если траектория частицы заключена между двумя атомными плоскостями, то говорят о плоскостном каналировании (рис. 1), в отличие от осевого каналирования (рис. 2), при котором частица движется между соседними рядами атомов. При осевом каналировании поперечное движение происходит в двух направлениях, перпендикулярных оси [2].

Интерес к прохождению заряженных частиц через кристаллы впервые возник еще в начале XX века, вслед за экспериментами по дифракции рентгеновских лучей на кристаллической решетке, доказавшими упорядоченное расположение атомов в кристалле. Штарком в 1912 г. было высказано предположение, что кристалл в определенных направлениях должен быть относительно прозрачен для заряженных частиц. Проверить свое предположение он предла-

гал в экспериментах с протонными пучками. Эти первые идеи о каналировании заряженных частиц в кристаллах были забыты и вновь возродились лишь в начале 60-х годов, когда эффект каналирования был заново открыт американскими физиками М. Т. Робинсоном и О. С. Оуэном и, независимо, Билером и Веско путем численного моделирования движения заряженной частицы на ЭВМ, обнаруживших аномально большие пробеги ионов, влетающих в монокристалл вдоль его главных кристаллографических направлений [4].

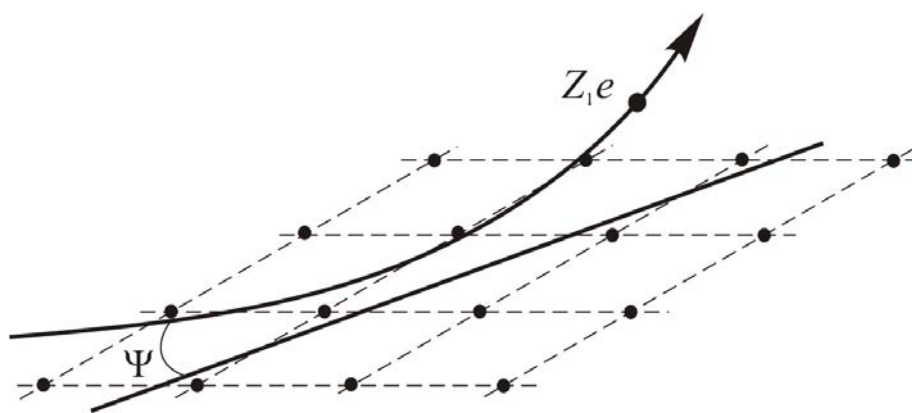


Рис. 1. Плоскостное каналирование [1]

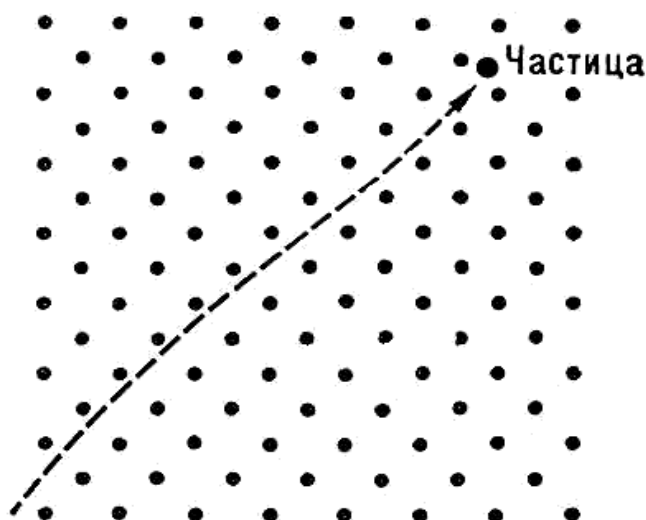


Рис. 2. Осевое каналирования [3]

Основы теории каналирования были развиты в фундаментальной работе Линдхарда [6], в которой были разработаны основы теории каналирования. Особое значение этой работы в том, что в ней определены критерии выхода частиц из режима каналирования, являющиеся и по сегодняшний день константами, на которых проверяются те или иные теоретические модели и экспериментальные результаты. Эти критерии широко применяются при интерпретации результатов, полученных с использованием эффекта каналирования при решении прикладных задач. Для описания процесса рассеяния заряженных частиц в упорядоченных структурах Линдхард использовал представления классической механики, а для расчета конкретных параметров применил статистическое описание. При построении теории каналирования им было сделано следующее основное предположение: процесс рассеяния заряженных частиц представляет собой совокупность коррелированных скользящих столкновений с отдельными атомами цепочек или плоскостей, потенциал которых непрерывен и равномерно распределен [7].

Для плоскостного и осевого каналирования Линдхардом были введены предельные углы захвата. Так для плоскости (110) кремния в случае протонов с энергией 70 ГэВ могут захватываться в режим каналирования те частицы, для которых угол с плоскостью не превышает  $0,0014^\circ$  [12]. На рис. 3 схематично изображена траектория частицы, падающей под углом к атомной плоскости (или атомной цепочки). Для углов меньше критического угла Линдхарда  $\Psi_L$  наблюдается каналирование, частицы же, которые падают под большими углами, рассеиваются.

Траектория каналированных частиц проходит дальше от ядер атомов кристаллической решётки, чем траектория не каналированных частиц, т.к. рассеяние на ядрах быстро выводит частицу из режима каналирования. Это приво-

дит к важным следствиям: 1) длина пробега частиц в канале значительно увеличивается, так как электронная плотность в каналах меньше, чем в среднем в кристалле, что уменьшает энергетические потери каналированных частиц на электронное торможение. В состоянии каналирования частица может пройти в кристалле сантиметры (в ГэВ – ной области энергий). Увеличение длины пробега ионов при каналировании используется при ионном легировании полупроводников. 2) Поскольку каналированные частицы движутся сравнительно далеко от ядер и близких к нему электронных оболочек, вероятность ядерных реакций и возбуждения рентгеновского излучения под действием каналированных частиц намного меньше [2].

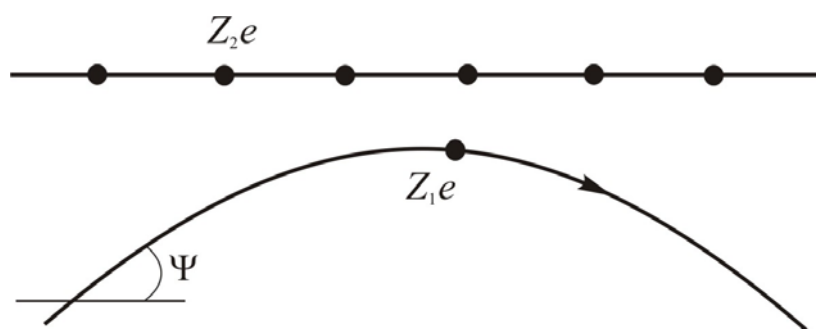


Рис. 3. Траектория частицы [1]

Эффект каналирования обеспечивает способ исследования структуры кристаллов и явлений, связанных с взаимодействием излучения с веществом. Частицы, движущиеся в каналах, могут выходить из канала в результате рассеяния на дефектах в кристалле, что используется для изучения дефектов. На основе принципов каналирования могут быть созданы новые источники рентгеновского и гамма-излучения, состоящие из ускорителей электронов или позитронов и точно ориентированных кристаллов германия, кремния или других элементов. Подобные кристаллы, поглощающие высокоэнергетическое излуче-

ние, могут служить детекторами гамма-излучения, угловое разрешение которых намного лучше, чем у устройств, применяемых в настоящее время [2].

Интересными представляются обнаруженные эффекты нагрева и охлаждения [8,9], а также когерентного возбуждения каналированных ионов [10,11].

Тот факт, что сам эффект каналирования был обнаружен в результате компьютерного моделирования, обуславливает важность и эффективность применения методов компьютерного моделирования для расчета параметров, движущихся в кристалле частиц.

В настоящее время в мире разработаны различные модели, позволяющие описывать движение каналированной частицы. Остановимся более подробно на некоторых из них. Описание процесса каналирования в них производится в фазовом пространстве поперечных координат и скоростей.

BINCOL [13] – программа расчета траекторий частиц по модели парных столкновений частиц и атомов, то есть учитывается взаимодействие частицы с каждым атомом кристалла. Не учитывается взаимодействие с электронами.

CATCH (Capture And Transport of Charged particles in a crystal, В.М. Бирюков, 1993 г.) [14] – программа моделирования каналирования в изогнутых кристаллах с учетом процессов рассеяния на электронах и ядрах, а также с учетом потерь энергии. Используется приближение Мольер для потенциала взаимодействия заряженной частицы и атомов кристалла. Для численного решения уравнения движения используется алгоритм Верле.

Программа К. Saitoh [16] – здесь предлагается теоретическая модель описания плоскостных колебаний, основанная на методе Монте-Карло, с переопределением поперечной скорости частиц.

Программа А.М. Таратина [17] – в модели для группировки столкновений используется модель отрезков. Путь частицы разбивается на отрезки опреде-



ленной длины, изменение состояния частицы в конце отрезка определяется многократным рассеянием.

В настоящее время теоретические и экспериментальные исследования процесса отклонения пучков релятивистских частиц изогнутыми кристаллами продолжают оставаться одним из актуальных научных направлений. В цикле работ [18,19,20], выполненных в ПИЯФ, ИФВЭ и ЦЕРН был обнаружен эффект объемного отражения релятивистских протонов изогнутым кристаллом кремния, предсказанный в работе [21]. В начале 90х годов в ЦЕРН была достигнута высокая эффективность отклонения протонов с энергиями 200 и 450 ГэВ кристаллом германия, изогнутого устройством с тремя точками опоры. Компьютерное моделирование результатов этого эксперимента так и не было выполнено. Одна из причин такого положения дел состояла в том, что применение метода компьютерного моделирования в фазовом пространстве поперечных координат и скоростей требует больших затрат компьютерного времени. Кроме того, перспективным является использование кристаллов с большим атомным номером  $Z$ , но расчет в таких кристаллах приведет к еще большим затратам на компьютерный расчет. Известно, что для сокращения машинного времени счета описание процесса каналирования производят не в фазовом пространстве поперечных координат и скоростей, а в пространстве поперечных энергий. Существуют различные подходы к построению кинетического уравнения Фоккера-Планка в пространстве поперечных энергий. В рамках кинетического подхода к теории осевого [22] и плоскостного каналирования [23,24] рассматривают диффузионное приближение для интегро-дифференциального уравнения переноса в пространстве поперечных энергий. В работе [25] было показано, что кинетическое уравнение диффузионного типа [22] не описывает результаты эксперимента с релятивистскими протонами в  $\langle 110 \rangle$  осевом канале кристалла гер-

мания. Причина несогласия между теорией и экспериментом до сих пор не установлена.

### **Цель работы:**

1. Поиск решения уравнения Фоккера-Планка в пространстве поперечных энергий.
2. Разработка компьютерной программы на основе нового подхода к решению уравнения Фоккера-Планка. В программе должны быть предусмотрены возможности по варьированию начальных условий, в том числе возможность изменять начальную расходимость пучка, использовать различные аппроксимации потенциала отдельного атома. Также должны быть предусмотрены различные варианты моделей деканализирования.
3. Исследование с помощью компьютерного моделирования динамики потока заряженных частиц в прямых и изогнутых алмазоподобных кристаллах при плоскостном каналировании.

**Метод исследования** – компьютерное моделирование. На основании нового подхода к описанию движения заряженных частиц в фазовом пространстве поперечных энергий была создана математическая модель, реализованная в виде компьютерной программы STE (the Space of Transversal Energy). Математическая модель основана на решении кинетического уравнения Фоккера-Планка в фазовом пространстве поперечных энергий, решение которого сводится к численному решению системы дифференциальных уравнений методом Рунге-Кутты 4 порядка точности. Для учета обратного влияния многократного рассеяния на движение частицы применяется метод Монте-Карло.

## **Обоснованность и достоверность полученных результатов**

В качестве исходных уравнений были выбраны известные уравнения Фоккера-Планка и Ньютона, описывающие движение заряженных частиц в кулоновском потенциале электронов и ядер атомов кристалла. Флуктуации потенциала и корреляционные функции флуктуаций потенциала были определены в рамках общепринятой теории. Решение уравнений движения искались с помощью метода малого шума [28] и метода многих масштабов [29]. Также хорошее согласие полученных результатов компьютерного моделирования по программе STE в сравнении с экспериментальными данными и результатами по другим программам [45,46] позволяет говорить об обоснованности и достоверности полученных результатов.

## **Научная и практическая значимость работы**

Описанную в работе программу моделирования плоскостного каналирования заряженных частиц, основанную на решении уравнения Фоккера-Планка в пространстве поперечных энергий, можно использовать для анализа и планирования новых экспериментальных исследований по прохождению заряженных частиц в прямых и изогнутых ориентированных алмазоподобных кристаллах. Компьютерное моделирование, исследуя те же физические процессы, что и эксперимент, имеет ряд преимуществ, такие как относительная дешевизна компьютерного эксперимента и возможность широкого варьирования параметров задачи. Известно, что использование изогнутых кристаллов для вывода пучков заряженных частиц из ускорителей экономит значительное количество энергии. Компьютерное моделирование, таким образом, дополняет теорию и эксперимент.

### **Научная новизна и результаты, вынесенные на защиту:**

1. Предложен и реализован метод численного решения уравнения Фоккера-Планка в фазовом пространстве поперечных энергий с помощью компьютерного моделирования траекторий каналированных частиц.
2. В тонком кристалле построено уравнение диффузии, описывающее эволюцию флуктуаций поперечной энергии каналированных частиц вдоль отрезков траектории в плоскостном канале, и найдено его решение.
3. Предложены комплекс алгоритмов и программа STE моделирования траекторий, представляющая собой алгоритмическое наполнение модели движения заряженных частиц в плоскостных каналах алмазоподобных кристаллов.
4. Впервые с помощью метода компьютерного моделирования исследована эффективность отклонения высокоэнергетических протонов в изогнутом кристалле германия.

### **Апробация работы**

Основные результаты работы докладывались на следующих научных конференциях:

- 34-37 Международные конференции по физике взаимодействия заряженных частиц с кристаллами (Москва, НИИЯФ МГУ, 2004-2007 гг.);
- Sixth International Symposium on Swift Heavy Ions in Matter (Aschaffenburg, Германия, 2005 г.);
- 17 Международной конференции “Взаимодействие ионов с поверхностью” (Звенигород, 2005 г.);
- 4-6 Открытых окружных конференциях молодых ученых “Наука и инновации XXI века” (Сургут, 2003-2005 гг.);

Количество работ по диссертации – 18.

В работах [32-34] рассматриваются общие подходы к описанию движения заряженных частиц в пространстве поперечных энергий. Потенциальная энергия взаимодействия многозарядных ионов с атомами кристалла строится в [35,36,37]. В работах [38,39] приводится вывод потенциала переходной области. Описанию расчета потерь энергии каналированных частиц посвящены работы [40-43]. Описание математической модели составляющей основу созданной компьютерной программы и ее сравнение с другими программами можно найти в [44,45,46]. В работе [46] исследуется эффект уменьшения скорости деканалирования релятивистских протонов. В [47-48] рассматриваются потери энергии при движении релятивистских ионов свинца в плоскостных каналах кремния. Работа [49] посвящена компьютерному моделированию движения протонов в изогнутых кристаллах.

### **Структура и объем работы.**

Диссертационная работа состоит из введения, четырех глав и заключения, включает 36 рисунков, 6 таблиц, а также содержит список литературы из 75 наименований и приложение на 195 страницах. Общий объем работы 295 страниц.

# ГЛАВА 1. ДВИЖЕНИЕ ЗАРЯЖЕННЫХ ЧАСТИЦ В ПЛОСКОСТНЫХ КАНАЛАХ КРИСТАЛЛА

## 1.1 Потенциал кристалла

Электрический потенциал кристалла складывается из кулоновских потенциалов атомных ядер, расположенных в узлах кристаллической решетки и кулоновских потенциалов атомных электронов

$$U(|\vec{r}|) = U_{nuc l}(|\vec{r}|) + U_{el}(|\vec{r}|). \quad (1.1)$$

$$U_{nuc l}(|\vec{r}|) = \sum_n \frac{Z_2 e^2}{|\vec{r} - \vec{r}_n|},$$

где  $\vec{r}$  – вектор, определяющий положение заряженной частицы движущейся в кристалле, в окрестности некоторой атомной цепочки;  $\vec{r}_n = \vec{r}_{n0} + \delta\vec{r}_n$  – вектор, определяющий положение  $n$  – го атомного ядра с зарядом  $Z_2 e$ ; вектор  $\vec{r}_{n0}$  определяет положение  $n$ -го узла кристаллической решетки, а вектор  $\delta\vec{r}_n$  описывает смещение ядра  $n$ -го атома кристалла из узла кристаллической решетки благодаря тепловым колебаниям.

$$U_{el}(|\vec{r}|) = - \sum_n \sum_{j=1}^{Z_2} \frac{e^2}{|\vec{r} - \vec{r}_{nj}|},$$

где  $\vec{r}_{nj}$  – вектор, определяющий положение  $j$  – го электрона, принадлежащего  $n$  – му ядру;  $\vec{r}_{nj} = \vec{r}_n + \delta\vec{r}_{nj}$ ; вектор  $\delta\vec{r}_{nj}$  определяет положение  $j$ -го электрона по отношению к положению  $n$ -го атомного ядра.

Тогда потенциал кристалла запишем следующим образом

$$U(|\vec{r}|) = \sum_n \left( \frac{Z_2 e^2}{|\vec{r} - \vec{r}_n|} - \sum_{j=1}^{Z_2} \frac{e^2}{|\vec{r} - \vec{r}_{nj}|} \right).$$

В случае взаимодействия быстрого иона с атомами кристалла, потенциал взаимодействия можно представить как

$$U(|\vec{r}|) = \sum_n \left( \frac{Z_1 Z_2 e^2}{|\vec{r} - \vec{r}_n|} - \sum_{j=1}^{Z_2} \frac{Z_1 e^2}{|\vec{r} - \vec{r}_{nj}|} \right),$$

где  $Z_1 e$  - заряд иона.

Усреднение потенциала кристалла, по квантовым флуктуациям местоположения атомных электронов будем осуществлять с помощью метода [50], который Бете использовал для вычисления атомного форм-фактора и обозначать  $\langle \dots \rangle_e$ .

$$\langle U(r) \rangle_e = \sum_n V(|\vec{r} - \vec{r}_n|),$$

где  $V(|\vec{r} - \vec{r}_n|)$  – потенциал  $n$  – го изолированного атома.

Существуют следующие хорошо известные приближения для потенциалов изолированных атомов [5]:

- приближение Томаса-Ферми с аналитической аппроксимацией по Мольеру;
- приближение Томаса-Ферми – Дирака с аналитической аппроксимацией по Фирсову;
- приближение Хартри – Фока с учетом, когда это необходимо, релятивистских поправок (аналитическая аппроксимация дана Дойлем и Тернером, Коксом и Бонхемом, а также Барреттом).

При численных расчетах в данной работе использовалась аппроксимация атомного потенциала  $V(r)$  в приближении Дойля – Тернера и Мольер. Атомный потенциал в приближении Дойля – Тернера имеет вид

$$V(r) = 2a_0 e^2 Z_1 \sum_{i=1}^4 \frac{a_i}{\sqrt{2\pi B_i^3}} \exp\left(-\frac{r^2}{B_i}\right), \quad (1.2)$$

где  $a_0 = 0.529 \text{ \AA}$  – радиус Бора;  $Z_1$  – атомный номер налетающей частицы;  $B_i = \frac{b_i}{(2\pi)^2}$ . Значения  $a_i$ ,  $b_i$  для кристаллов кремния и германия приведены в таблице 1.1.

Кремний		Германий	
$a_i, \text{ \AA}$	$b_i, \text{ \AA}^2$	$a_i, \text{ \AA}$	$b_i, \text{ \AA}^2$
2.1293	57.7748	2.4467	55.893
2.5333	16.4756	2.7015	14.393
0.8349	2.8796	1.6157	2.4461
0.3216	0.3860	0.6009	0.3415

Таблица 1.1. Значения  $a_i$ ,  $b_i$  кристаллов кремния и германия

Атомный потенциал в приближении Мольер имеет вид

$$V(r) = \frac{Z_1 Z_2 e^2}{r} \sum_{i=1}^3 \alpha_i \exp\left(-\frac{r \beta_i}{a}\right), \quad (1.3)$$

где  $Z_2$  – атомный номер атомов кристалла;  $a = 0.88534 a_0 (Z_1^{2/3} + Z_2^{2/3})^{-1/2}$  – радиус экранирования Томаса – Ферми;  $\alpha_i$ ,  $\beta_i$  – коэффициенты, значения которых представлены в таблице 1.2.

Также можно привести вид аппроксимации атомного потенциала в приближении Фирсова [5]

$$V(r) = \frac{Z_1 Z_2 e^2}{r} \frac{sh^2 \beta C}{sh^2 \beta (C + r/a)},$$

где  $\beta = 0.4 (Z_1^{2/3} + Z_2^{2/3})^{-1/2}$ ;  $C \approx 1.7$ .



$\alpha_i$	$\beta_i$
0.35	0.3
0.55	1.2
0.10	6.0

Таблица 1.2.  $\alpha_i$ ,  $\beta_i$  – коэффициенты в приближении Мольер  
потенциала изолированного атома

## 1.2 Усреднение электрического потенциала кристалла по тепловым колебаниям

Известно, что флуктуации потенциала  $U(r)$  вызываются тепловыми колебаниями атомных ядер и квантовыми флуктуациями, которые испытывают атомные электроны. Тепловые колебания атомов изменяют потенциал статической решетки вблизи плоскости на расстояниях порядка амплитуды тепловых колебаний [26]. Потенциал изолированного атома может быть разложен в интеграл Фурье

$$V(|\vec{r} - \vec{r}_n|) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\vec{g}}{(2\pi)^3} V(\vec{g}) \exp[-i\vec{g}(\vec{r} - \vec{r}_{n0})],$$

где  $V(\vec{g})$  – Фурье компонента потенциала изолированного атома;  $\vec{r}_{n0}$  – вектор определяющий положение  $n$  – го узла кристаллической решетки;  $\vec{g}$  – одномерный вектор обратной решетки,  $g^2 = g_x^2 + g_y^2 + g_z^2$ .

Фурье компонента потенциала изолированного атома в приближении Мольер имеет вид

$$V(\vec{g}) = 4\pi Z_1 Z_2 e^2 \sum_{i=1}^3 \frac{\alpha_i}{(\beta_i/a)^2 + g^2} . \quad (1.4)$$

Фурье компонента потенциала изолированного атома в приближении Дойля-Тернера имеет вид

$$V(\vec{g}) = 2\pi Z_1 a_0 e^2 \sum_{i=1}^4 a_i \exp(-B_i g^2 / 4) . \quad (1.5)$$

Усреднение по независимым тепловым колебаниям атомов кристалла осуществляется с помощью функции распределения Гаусса и обозначается символом  $\langle \dots \rangle_T$

$$\langle U(r) \rangle_{T,e} = \sum_n \langle V(|\vec{r} - \vec{r}_n|) \rangle_T ,$$

Тогда электрический потенциал изолированного атома через интеграл Фурье усредненного по тепловым колебаниям представим в следующем виде

$$\langle V(|\vec{r} - \vec{r}_n|) \rangle_T = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\vec{g}}{(2\pi)^3} V(\vec{g}) \exp \left[ -i\vec{g}_x (\vec{r} - \vec{r}_{n0}) - \frac{\sigma^2 g^2}{2} \right] ,$$

где  $\sigma$  – амплитуда тепловых колебаний атома, в случае кристалла кремния, при температуре  $293^\circ K$ ,  $\sigma = 0.075 \text{ \AA}$  [27].

### 1.3 Непрерывный потенциал атомной плоскости кристалла

Основная идея, упрощающая теоретический анализ эффекта каналирования в целом, состоит в замене истинного потенциала атомов кристалла потенциалом, усредненным по координатам атомов в кристаллографической оси или плоскости. Такое приближение особенно эффективно, если угол падения частицы на ось или плоскость достаточно мал. Линдхардом и было показано, что

при малом угле падения заряженной частицы по отношению к кристаллографической оси или плоскости последовательные столкновения частицы с атомами решетки скоррелированы между собой, и следует рассматривать взаимодействие заряженной частицы с атомной цепочкой или атомной плоскостью, то есть когда частица, рассеиваясь на малый угол после взаимодействия с одним атомом, попадает в область действия следующего и, поскольку силы притяжения этими атомами (или силы отталкивания, если частица положительно заряжена) направлены в одну сторону, происходит сравнительно плавный поворот импульса частицы вследствие столкновений с большим числом атомов оси или плоскости. Тогда в малоугловом приближении можно заменить потенциалы отдельных атомов усредненным непрерывным потенциалом. По отношению к заряженной частице, движущейся в кристалле вдоль одной из его осей симметрии, атомы в кристалле расположены приблизительно так, как бусинки на натянутой нитке. Если частица проходит близко к одному из атомов, то она пройдет также близко и к соседним атомам той же цепочки, в результате цепочка атомов действует как единое целое, отклоняя заряженную частицу так, словно потенциалы атомов однородно распределены по ее длине. Также и атомные плоскости, в кристалле действуя подобно плоским ограничивающим поверхностям, дают возможность наблюдать каналирование заряженных частиц. В этом случае частица движется, совершая колебания между соседними плоскостями кристалла [4]. Движение каналированных частиц в плоскостных каналах кристалла происходит в потенциале, который можно представить в следующем виде

$$U(r) = U(x, y, z) = \bar{U}(x) + \delta U, \quad (1.6)$$

где  $U(x, y, z)$  – электрический потенциал кристалла (см. (1.1));  $\bar{U}(x)$  – непрерывный плоскостной потенциал, учитывающий влияние всех атомных плоско-

стей, причем будем обозначать  $\overline{\dots} = \langle \dots \rangle_{e,T}$ ;  $\delta U$  – флуктуация непрерывного потенциала атомной плоскости. В случае малоуглового рассеяния каналированных частиц флуктуация потенциала не превышает его среднего значения

$$\delta U < \overline{U}.$$

Тогда понятно, что немногочисленные случаи рассеяния на большой угол не оказывают значительного влияния на динамику потока, потому как эти частицы выбывают из режима каналирования и соответственно из области действия непрерывных потенциалов. Непрерывный потенциал изолированной кристаллографической плоскости, полученный усреднением по двум координатам в плоскости, представим как

$$\overline{U}_1(x) = Nd_p \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} V\left(\sqrt{x^2 + (y - y_m)^2 + (z - z_n)^2}\right) dy dz,$$

где  $y_m, z_n$  – координаты атомов, которые и создают данный потенциал;  $N$  – объемная плотность атомов, количество атомов в единице объема. Примерный вид движения заряженной частицы движущейся параллельно атомной плоскости показан на рис. 1.1, в плоскости  $XZ$ . Видно, что непрерывный потенциал является функцией расстояния между частицей и атомной плоскостью. Поскольку положение атомов в атомной плоскости является периодическим, то

$\sum_{m,n} V(\sqrt{x^2 + (y - y_m)^2 + (z - z_m)^2})$  – электрический потенциал изолированной

атомной плоскости можно разложить в ряд Фурье. Непрерывный потенциал атомной плоскости имеет смысл нулевого члена разложения в ряд Фурье по продольным координатам  $Y, Z$  потенциала атомной плоскости, усредненного по независимым тепловым колебаниям. Далее под усреднением потенциала, которое будем обозначать чертой, будем понимать усреднение, проводимое как

по независимым квантовым флуктуациям, так и по квантовым флуктуациям атомных электронов.

Приближение непрерывного потенциала получило широкое распространение как общий метод исследования прохождения через кристаллы быстрых частиц. Это позволяет исследовать многие вопросы связанные движением каналированных частиц в непрерывных потенциалах [5].

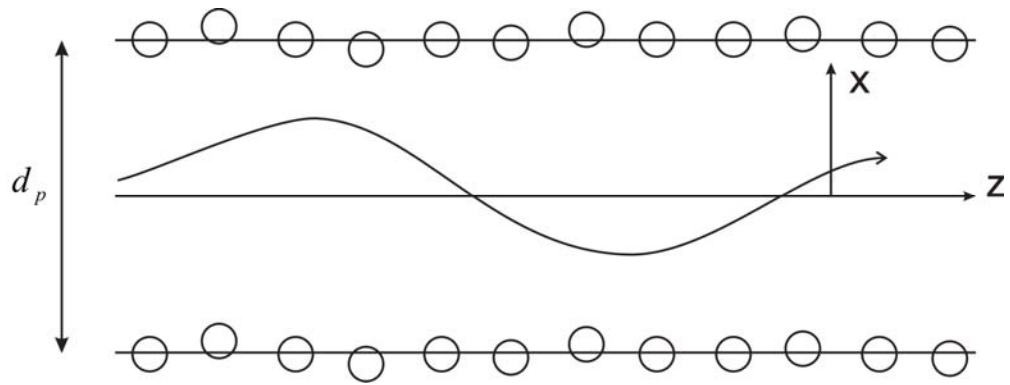


Рис. 1.1. Траектория частиц в  $XZ$  плоскости параллельно атомной плоскости

Получим непрерывный потенциал атомной плоскости для кристалла кремния, при использовании потенциала изолированного атома в приближении Мольер. Перепишем Фурье компоненту потенциала изолированного атома

$V(\vec{g})$  (см. 2.6), используя соотношение  $\frac{1}{p} = \int_0^\infty e^{-pt} dt$ , следующим образом

$$V(\vec{g}) = 4\pi Z_1 Z_2 e^2 \sum_{i=1}^3 \alpha_i \int_0^\infty \exp\left(-t \left[ \left(\frac{\beta_i}{a}\right)^2 + g^2 \right]\right) dt,$$

тогда потенциал изолированной атомной плоскости, усредненный по тепловым колебаниям в приближении Мольер, получим следующим образом:

$$\bar{U}_1(x) = \langle V(x - x_n) \rangle_T =$$

$$\begin{aligned}
&= \frac{4\pi Z_1 Z_2 e^2}{2\pi S} \sum_{i=1}^3 \alpha_i \int_0^\infty dt \cdot e^{-t \left( \frac{\beta_i}{a} \right)^2} \cdot \frac{\pi}{t + \frac{\sigma^2}{2}} \cdot \int_{-\infty}^\infty dg_x \cdot e^{-g_x^2 \left( \frac{\sigma^2}{2} + t \right) - ig_x (x - x_{n0})} = \\
&= \frac{4\pi Z_1 Z_2 e^2}{2\pi S} \sum_{i=1}^3 \alpha_i \int_0^\infty dt \cdot \exp \left[ -t \left( \frac{\beta_i}{a} \right)^2 \right] \cdot \left( \frac{\pi}{t + \frac{\sigma^2}{2}} \right)^{\frac{1}{2}} \exp \left[ -\frac{(x - x_{n0})^2}{4 \left( t + \frac{\sigma^2}{2} \right)} \right] = \\
&= \frac{2\sqrt{\pi} Z_1 Z_2 e^2}{S} \sum_{i=1}^3 \alpha_i \int_0^\infty \frac{dt}{\left( t + \frac{\sigma^2}{2} \right)^{\frac{1}{2}}} \exp \left\{ -t \left( \frac{\beta_i}{a} \right)^2 - \frac{(x - x_{n0})^2}{4 \left( t + \frac{\sigma^2}{2} \right)} \right\},
\end{aligned}$$

где  $x_{n0} = \begin{cases} ndp, & \text{для } e^-; \\ \left( n + \frac{1}{2} \right) dp, & \text{для } e^+; \end{cases} \quad n = 0; \pm 1; \pm 2 \dots$

$S = 1/(Nd_p)$  – площадь, приходящаяся на один атом в атомной плоскости;

$d = 5,431 \text{ \AA}$  – период элементарной решетки кремния;  $d_p = d/\sqrt{8}$  – расстояние

между соседними атомными плоскостями в случае плоскости (110);  $N = 8/d^3$ ,

$e^2 = 14,4 \text{ эВ} \cdot \text{\AA}$ .

Аналогично можно получить выражение для изолированной атомной плоскости, усредненной по тепловым колебаниям, в приближении Дойля-Тернера

$$\bar{U}_1(x) = 2\sqrt{\pi} e^2 Z_1 Z_2 N d_p a_0 \sum_{i=1}^4 \frac{a_i}{\sqrt{b_i/(2\pi)^2 + 2\sigma^2}} \exp \left( -\frac{(x - x_{n0})^2}{b_i/(2\pi)^2 + 2\sigma^2} \right),$$

где  $a_i$ ,  $b_i$  – коэффициенты, которые определены в таблице 1.

Рассмотрим непрерывный плоскостной потенциал с учетом вклада от 4-х атомных плоскостей

$$\bar{U}(x) = \bar{U}_1(x + \frac{d_p}{2}) + \bar{U}_1(x - \frac{d_p}{2}) + \bar{U}_1(x + \frac{3d_p}{2}) + \bar{U}_1(x - \frac{3d_p}{2}), \quad (1.7)$$

По рис. 1.2 можно оценить какой вклад вносят в непрерывный потенциал плоскостного канала потенциалы от 4-х отдельных изолированных плоскостей.

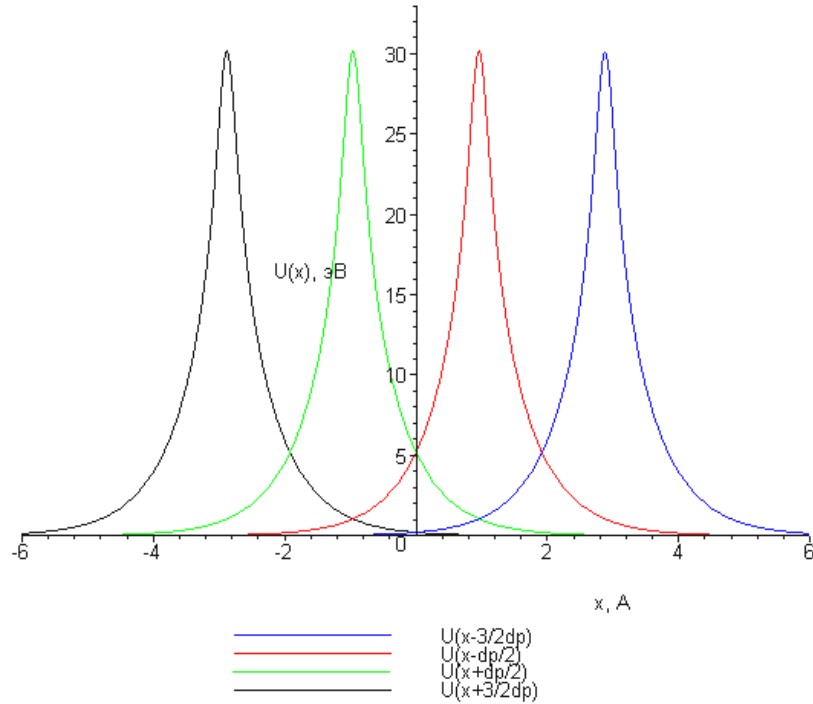


Рис. 1.2. Слагаемые из формулы (1.7) в приближении Мольер

Потенциальную энергию взаимодействия частицы с атомами образующими кубическую кристаллическую решетку, можно представить в следующем виде

$$U(r) = \sum_{\vec{g}} U(\vec{g}) \exp(i\vec{g} \vec{r}),$$

где  $\vec{g} = \{2\pi n_x / d; 2\pi n_y / d; 2\pi n_z / d\}$  – вектор обратной решетки;  $d$  – постоянная решетки.

$$U(\vec{g}) = \frac{1}{d^3} \sum_j V_j(g) \exp \left[ -\frac{\vec{g} \sigma_j^2}{2} - i\vec{g} \vec{r}_j \right], \quad (1.8)$$

где  $\exp(-\vec{g}\sigma_j^2/2)$  – фактор Дебая-Валлера, учитывает тепловые колебания ядер атомов кристалла;  $\vec{r}_j$  – координаты атомов в элементарной ячейке, а  $\sigma_j^2$  – средний квадрат амплитуды тепловых колебаний атомов кристалла;  $V_j(g)$  – компонента Фурье потенциальной энергии взаимодействия атома j-го сорта с ионом.

В нашем случае потенциальная энергия взаимодействия быстрого иона с непрерывным потенциалом плоскостного канала кристалла имеет вид

$$U(x) = \sum_{g_x} U(g_x) \exp(ig_x x). \quad (1.9)$$

$$U(x) = \frac{1}{d^3} \sum_{n_x} \sum_{j=1}^8 V(g_x) \cdot \exp(-\sigma^2 g_x^2 / 2) \cdot \cos[2\pi n_x (x - x_j)]. \quad (1.10)$$

где  $V(g_x)$  – Фурье компонента потенциала атома, в приближении Мольер см. (1.4), в приближении Дойля-Тернера см. (1.5).

Примеры непрерывных потенциалов, рассчитанные с помощью различных приближений потенциала изолированного атома в случае плоскостного каналирования (111) протонов в кристалле кремния и германия, приведены на рис. 1.3.

Глубина потенциальной ямы образованной плоскостями (111) кристалла кремния в случае приближения Мольер приблизительно равна 25,2 эВ, в приближении Дойля-Тернера 23,13 эВ, для кристалла германия в приближения Мольер 40,72 эВ, в приближении Дойля-Тернера 32,16 эВ. В приближении Дойля-Тернера высота непрерывного потенциала меньше, чем в приближении Мольер.



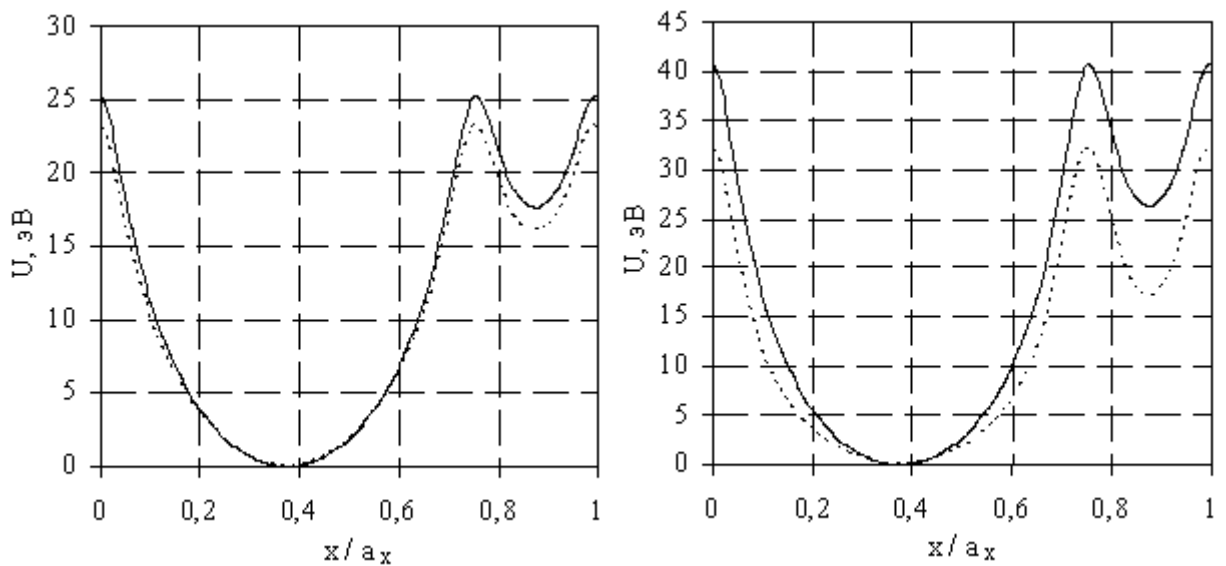


Рис. 1.3. Непрерывные плоскостные потенциалы для протонов в (111) канале кристалла кремния и германия. Сплошная линия – потенциал изолированного атома в приближении Мольер, пунктирная – в приближении Дойля-Тернера

#### 1.4 Коэффициент диффузии

Движение одной быстрой заряженной частицы описывается классическим уравнением движения:

$$m \frac{d^2 \vec{r}}{dt^2} = \vec{f}, \quad (1.11)$$

где  $\vec{f} = -\text{grad}U$ ;  $m = \gamma \cdot m_0 = (1 - \beta^2)^{-1/2} m_0$  – масса частицы;  $\gamma = (1 - \beta^2)^{-1/2}$ ;  $\beta = v/c$ ;  $m_0$  – масса покоя частицы;  $v$  – скорость частицы в направлении оси  $OZ$ .

Перепишем формулу (1.6) представив слагаемое, учитывающее флуктуацию электрического потенциала в виде суммы 2-х слагаемых:

$$U(r) = \bar{U} + \delta U_z + \delta U, \quad (1.12)$$

где  $\bar{U} = \bar{U}(x, y)$  – непрерывный потенциал плоскостного (осевого) канала кристалла;  $\delta U_z(r) = \langle U(x, y, z) \rangle_{e,T} - \bar{U}$  – поправка к непрерывному потенциалу плоскостного канала, которая связана с дискретностью расположения атомов кристалла;  $\delta U(r)$  – флуктуация потенциала, вызванная тепловыми колебаниями атомных ядер и квантовыми флуктуациями местоположения атомных электронов.

Далее перепишем уравнение движения:

$$m\ddot{x} + \frac{\partial}{\partial x} [\bar{U} + \delta U_z] = \frac{\partial}{\partial x} (\delta U),$$

$$m\ddot{y} + \frac{\partial}{\partial y} [\bar{U} + \delta U_z] = \frac{\partial}{\partial y} (\delta U).$$

$$m\ddot{x} + \frac{\partial \bar{U}}{\partial x} + \frac{\partial (\delta U_z)}{\partial x} = \delta f_x,$$

$$m\ddot{y} + \frac{\partial \bar{U}}{\partial y} + \frac{\partial (\delta U_z)}{\partial y} = \delta f_y.$$

(1.13)

где  $\delta f_x = -\frac{\partial (\delta U)}{\partial x}$ ,  $\delta f_y = -\frac{\partial (\delta U)}{\partial y}$  – флуктуация поперечной силы, силы с которой кристалл вдоль направления  $x$  и  $y$  действует на каналированную заряженную частицу.

Систему координат выберем таким образом, чтобы ось  $OX$  была перпендикулярна, а ось  $OY$  была параллельна атомным плоскостям, но перпендикулярна направлению падения ионов на кристалл, которое происходит в направлении оси  $OZ$ . В случае плоскостного каналирования ось  $OZ$  направим параллельно плоскостям, а в случае осевого – атомным цепочкам кристалла. Решение уравнения (1.13) будем искать в малоугловом приближении, которое имеет вид

$$f_z = 0.$$

Данное условие обеспечивает движение иона с постоянной скоростью на небольших отрезках в направлении оси  $OZ$ , то есть

$$\beta \approx (\dot{z}/c) = \text{const},$$

где  $z = v \cdot t$ .

В [6] было показано, что можно пренебречь влиянием поправки  $\delta U_z(r)$  к непрерывному потенциалу на движение каналированной частицы в осевом канале. Анализ этой поправки будет произведен позже в параграфе 1.5 посвященном рассмотрению потенциала переходной области ось-плоскость.

Нелинейное стохастическое уравнение (1.11) может быть линеаризовано с помощью разложения в ряд по малому параметру (метод малого шума [28]), роль которого играет флуктуация потенциала. Решение уравнения (1.11) представим в виде суммы независимых движений по регулярной траектории, то есть без учета флуктуаций, и малой флуктуирующей добавки

$$\begin{aligned} x &= \bar{x} + \delta x, \\ y &= \bar{y} + \delta y. \end{aligned} \tag{1.14}$$

Разложим далее в ряд по степеням  $\delta x$  и  $\delta y$  потенциал  $\bar{U}$  из выражения (1.12) в окрестности регулярной траектории и будем учитывать только линейные по  $\delta x$  и  $\delta y$  члены, тогда

$$\begin{aligned} \bar{U}(x, y) &= \bar{U}(\bar{x} + \delta x, \bar{y} + \delta y) \cong \bar{U}(\bar{x}, \bar{y}) + \bar{U}_x(\bar{x}, \bar{y})\delta x + \bar{U}_y(\bar{x}, \bar{y})\delta y, \\ \delta U(x, y) &= \delta U(\bar{x} + \delta x, \bar{y} + \delta y) \cong \delta U(\bar{x}, \bar{y}), \\ \delta f(x, y, t) &= \delta f(\bar{x} + \delta x, \bar{y} + \delta y, t) \cong \delta f(\bar{x}, \bar{y}, t). \end{aligned} \tag{1.15}$$

Подставим (1.14) и (1.15) в (1.13)

$$m\ddot{x} + m\delta\ddot{x} + \bar{U}_x + \bar{U}_{xx}\delta x + \bar{U}_{xy}\delta y = \delta f_x,$$

$$m\ddot{\bar{y}} + m\delta\ddot{y} + \bar{U}_y + \bar{U}_{yx}\delta x + \bar{U}_{yy}\delta y = \delta f_y.$$

Данные уравнения можно представить в виде 2-х систем уравнений, одна из которых описывала бы движение частиц по регулярной траектории, а другая по хаотической

$$\begin{cases} m\ddot{\bar{x}} = \bar{f}_x, \\ m\ddot{\bar{y}} = \bar{f}_y. \end{cases} \quad (1.16)$$

$$\begin{cases} m\delta\ddot{x} + \bar{U}_{xx}\delta x + \bar{U}_{xy}\delta y = \delta f_x, \\ m\delta\ddot{y} + \bar{U}_{yx}\delta x + \bar{U}_{yy}\delta y = \delta f_y. \end{cases} \quad (1.17)$$

$$\text{где } \bar{f}_x = -\frac{\partial \bar{U}(\bar{x}, \bar{y}, z)}{\partial \bar{x}}, \quad \delta f_x = -\frac{\partial (\delta U(\bar{x}, \bar{y}, z))}{\partial \bar{x}}, \quad \bar{U}_{xy} = \frac{\partial^2 \bar{U}(\bar{x}, \bar{y}, z)}{\partial \bar{x} \partial \bar{y}}, \quad \bar{U}_{yx} = \frac{\partial^2 \bar{U}(\bar{x}, \bar{y}, z)}{\partial \bar{y} \partial \bar{x}}.$$

Перейдем от (1.16) и (1.17) к системе уравнений описывающих движение каналированных частиц в перпендикулярном направлении относительно атомных плоскостей

$$m\ddot{\bar{x}} = \bar{f}_x, \quad (1.18)$$

$$m\delta\ddot{x} + \bar{U}_{xx}\delta x = \delta f_x. \quad (1.19)$$

Найдем производную от среднего квадрата флуктуации поперечной координаты  $\delta x^2$ , причем  $\delta x^2 = (\delta x)^2 = \delta x \cdot \delta x$ , следующим образом

$$\frac{d}{dt}\delta x^2 = 2 \cdot \delta x \frac{d}{dt}\delta x = 2\delta x \delta \dot{x}.$$

Так как  $\delta x^2$  не зависит от времени, то

$$\overline{\frac{d}{dt}\delta x^2} = \frac{d}{dt}\overline{\delta x^2} = 2\overline{\delta x \delta \dot{x}}. \quad (1.20)$$

Получим выражение для смешанного момента, используя (1.19)

$$\begin{aligned}
\frac{d}{dt}(\delta x \cdot \delta \dot{x}) &= \delta \dot{x} \cdot \delta \dot{x} + \delta x \cdot \delta \ddot{x} = \\
&= \delta \dot{x}^2 + \frac{1}{m} \delta x \cdot (\delta f_x - U_{xx} \delta x) = \delta \dot{x}^2 + \frac{1}{m} \delta x \cdot \delta f_x - \frac{1}{m} U_{xx} \delta x^2, \\
\frac{d}{dt} \overline{\delta x \delta \dot{x}} &= \overline{\delta \dot{x}^2} + \frac{1}{m} \overline{\delta x \delta f_x} - \frac{1}{m} U_{xx} \overline{\delta x^2}.
\end{aligned} \tag{1.21}$$

Получим выражение для среднего квадрата флуктуаций поперечной скорости

$$\begin{aligned}
\frac{d}{dt} \delta \dot{x}^2 &= 2 \cdot \delta \dot{x} \cdot \delta \ddot{x} = 2 \cdot \delta \dot{x} \frac{1}{m} (\delta f_x - U_{xx} \delta x) = \frac{2}{m} \left( \delta \dot{x} \delta f_x - U_{xx} \delta \dot{x} \delta x \right), \\
\frac{d}{dt} \overline{\delta \dot{x}^2} &= \frac{2}{m} \left( \overline{\delta \dot{x} \delta f_x} - U_{xx} \overline{\delta \dot{x} \delta x} \right).
\end{aligned} \tag{1.22}$$

С помощью уравнения (1.20), (1.21), (1.22), построим систему уравнений для вторых моментов функции распределения

$$\begin{cases} \frac{d}{dt} \overline{\delta x^2} = 2 \overline{\delta x \delta \dot{x}} \\ \frac{d}{dt} \overline{\delta x \delta \dot{x}} = \overline{\delta \dot{x}^2} - \frac{1}{m} \bar{U}_{xx}(\bar{x}) \overline{\delta x^2} + \frac{1}{m} \overline{\delta x \delta f_x(\bar{x}, t)} \\ \frac{d}{dt} \overline{\delta \dot{x}^2} = -\frac{2}{m} \bar{U}_{xx}(\bar{x}) \overline{\delta \dot{x} \delta x} + \frac{2}{m} \overline{\delta \dot{x} \delta f_x(\bar{x}, t)} \end{cases} \tag{1.23}$$

Найдем решение уравнения движения по хаотической траектории – уравнение (1.17) с помощью метода вариации произвольной постоянной. Тогда решение уравнения представим следующим образом

$$\delta x = C_1 \delta x_1 + C_2 \delta x_2. \tag{1.24}$$

где  $\delta x_1, \delta x_2$  – решения однородного дифференциального уравнения:

$$m \delta \ddot{x}_{1,2} + \bar{U}_{xx}(\bar{x}) \delta x_{1,2} = 0$$

Тогда можем составить следующую систему уравнений для определения произвольных постоянных  $C_1$  и  $C_2$

$$\begin{cases} \dot{C}_1 \delta x_1 + \dot{C}_2 \delta x_2 = 0 \\ \dot{C}_1 \delta \dot{x}_1 + \dot{C}_2 \delta \dot{x}_2 = \frac{\delta f(\bar{x}, t)}{m} \end{cases} \quad (1.25)$$

Постоянные  $C_1$  и  $C_2$  будем определять из следующих выражений

$$\dot{C}_1 = \frac{\Delta_1}{\Delta}, \dot{C}_2 = \frac{\Delta_2}{\Delta}. \quad (1.26)$$

где  $\Delta$  – определитель системы уравнений (1.25)

$$\Delta = \begin{vmatrix} \delta x_1 & \delta x_2 \\ \delta \dot{x}_1 & \delta \dot{x}_2 \end{vmatrix} = \delta x_1 \delta \dot{x}_2 - \delta x_2 \delta \dot{x}_1$$

$\Delta_1$  и  $\Delta_2$  – также определители системы (1.25) составленные соответственно относительно первого и второго столбца

$$\Delta_1 = \begin{vmatrix} 0 & \delta x_2 \\ \frac{\delta f}{m} & \delta \dot{x}_2 \end{vmatrix} = -\delta x_2 \frac{\delta f}{m},$$

$$\Delta_2 = \begin{vmatrix} \delta x_1 & 0 \\ \delta \dot{x}_1 & \frac{\delta f}{m} \end{vmatrix} = -\delta x_1 \frac{\delta f}{m}.$$

Теперь зная  $\Delta$ ,  $\Delta_1$  и  $\Delta_2$  перепишем выражения (1.26) для произвольных постоянных  $\dot{C}_1$ ,  $\dot{C}_2$  следующим образом

$$\dot{C}_1 = -\frac{1}{m} \frac{\delta x_2 \delta f}{\delta x_1 \delta \dot{x}_2 - \delta x_2 \delta \dot{x}_1}, \dot{C}_2 = -\frac{1}{m} \frac{\delta x_1 \delta f}{\delta x_1 \delta \dot{x}_2 - \delta x_2 \delta \dot{x}_1}.$$

Откуда искомые коэффициенты  $C_1$  и  $C_2$  необходимые для получения решения уравнения движения по хаотической траектории, получим как

$$C_1(t) = -\frac{1}{m} \int \frac{\delta x_2(t') \delta f(t')}{\delta x_1(t') \delta \dot{x}_2(t') - \delta x_2(t') \delta \dot{x}_1(t')} dt',$$

$$C_2(t) = -\frac{1}{m} \int \frac{\delta x_1(t') \delta f(t')}{\delta x_1(t') \delta \dot{x}_2(t') - \delta x_2(t') \delta \dot{x}_1(t')} dt'.$$

С учетом этого решение интересующего нас уравнения из (1.24) представимо в следующем виде

$$\begin{aligned}\delta x(t) = & -\frac{\delta x_1(t)}{m} \int \frac{\delta x_2(t') \delta f(t')}{\delta x_1(t') \delta \dot{x}_2(t') - \delta x_2(t') \delta \dot{x}_1(t')} dt' + \\ & + \frac{\delta x_2(t)}{m} \int \frac{\delta x_1(t') \delta f(t')}{\delta x_1(t') \delta \dot{x}_2(t') - \delta x_2(t') \delta \dot{x}_1(t')} dt'\end{aligned}$$

Или после небольшого элементарного преобразования

$$\delta x(t) = \frac{1}{m} \int \frac{[\delta x_2(t) \delta x_1(t') - \delta x_1(t) \delta x_2(t')]}{[\delta x_1(t') \delta \dot{x}_2(t') - \delta x_2(t') \delta \dot{x}_1(t')]} \delta f(t') dt'.$$

Корреляционную функцию, составленную из флуктуаций поперечной координаты и силы можно записать как

$$\overline{\delta x(t) \delta f_x(t)} = \frac{1}{m} \int \frac{[\delta x_2(t) \delta x_1(t') - \delta x_1(t) \delta x_2(t')]}{[\delta x_1(t') \delta \dot{x}_2(t') - \delta x_2(t') \delta \dot{x}_1(t')]} \overline{\delta f_x(t) \delta f_x(t')} dt'. \quad (1.27)$$

С помощью коррелятора, составленного из флуктуаций поперечной силы действующей на быструю заряженную частицу из (1.27) в разные моменты времени, может быть вычислен так называемый коэффициент диффузии быстрых заряженных частиц в поле атомной плоскости  $D(x)$ , который является траекторно-зависящей функцией, то есть пусть

$$\overline{\delta f_x(\bar{x}, t) \delta f_x(\bar{x}', t')} = D(\bar{x}) \delta(t - t'),$$

где  $\delta(t - t')$  – дельта-функция Дирака. Тогда далее

$$\overline{\delta x(t) \delta f_x(t)} = 0.$$

Коррелятор, составленный из флуктуаций поперечной скорости и силы, представим следующим образом

$$\overline{\delta \dot{x}(t) \delta f_x(t)} = \frac{1}{m} \int \frac{[\delta \dot{x}_2(t) \delta x_1(t') - \delta \dot{x}_1(t) \delta x_2(t')]}{[\delta x_1(t') \delta \dot{x}_2(t') - \delta x_2(t') \delta \dot{x}_1(t')]} \delta f_x(t) \delta f_x(t') dt' = \frac{D(x)}{2m}.$$

С учетом всего выше сказанного можем переписать систему уравнений для вторых моментов функции распределения (1.23)

$$\begin{cases} \frac{d}{dt} \overline{\delta x^2} = 2 \overline{\delta x \delta \dot{x}} \\ \frac{d}{dt} \overline{\delta x \delta \dot{x}} = \overline{\delta \dot{x}^2} - \frac{1}{m} \bar{U}_{xx} \overline{\delta x^2} \\ \frac{d}{dt} \overline{\delta \dot{x}^2} = -\frac{2}{m} \bar{U}_{xx} \overline{\delta x \delta \dot{x}} + \frac{D(\bar{x})}{m^2} \end{cases} \quad (1.28)$$

Данная система является замкнутой, описывает движения быстрой заряженной частицы в кристалле по хаотической траектории (1.17).

Оценим, какую размерность имеет коэффициент диффузии  $D(x)$ . Для этого используем понятие глубины проникновения каналированной частицы в кристалл  $z = v \cdot t$ , а также грубо положим, что вторая производная от непрерывного плоскостного потенциала по поперечной координате  $x$  в последнем третьем уравнении системы (1.28) равна нулю, то есть  $\bar{U}_{xx}(\bar{x}) = 0$ . Тогда уравнение на коэффициент диффузии запишем следующим образом

$$\frac{d}{dz} \left( \frac{m \overline{\delta \dot{x}^2}}{2} \right) = \frac{D(x)}{mv}.$$

Из последнего уравнения следует, что размерность коэффициента диффузии приведенного к массе каналированной частицы и ее продольной скорости  $v$ , имеет следующий вид

$$\left[ \frac{D}{m\vartheta} \right] = \frac{\text{эВ}}{\text{А}}$$

В полупроводниковых кристаллах кремния и германия, обычно используемых в экспериментах по каналированию, концентрация дефектов очень незначительна. Каналированная частица рассеивается на очень малый угол при столкновении с электронами. Угол, при котором частица проходит через центр



канала, монотонно увеличивается из-за такого многократного рассеяния и таким образом увеличивается количество частиц, подходящих близко к рядам или плоскостям. Такие частицы могут испытать близкие столкновения с атомами решетки, смещенными относительно их положения равновесия в результате тепловых или нулевых колебаний. В таких столкновениях частица может рассеяться на угол, больший критического угла каналирования. Рассеяние каналированной частицы на электронах и на тепловых колебаниях ядер кристаллической решетки, а также дефектов кристалла (здесь рассеяние на дефектах не рассматривается, так как считаем кристалл идеальным) ведет к не сохранению поперечной энергии каналированных частиц  $E_{\perp}$  и распределение потока частиц в канале меняется. В результате актов рассеяния частица изменяет свое состояние и может выйти из режима каналирования – процесс деканалирования. Возможен и обратный процесс – захват частицы в режим каналирования. С процессами рассеяния связаны диффузионные коэффициенты, соответственно  $D_e(x)$  – электронный, ответственный за многократное рассеяние на электронах,  $D_n(x)$  – ядерный, ответственный за рассеяние на тепловых колебаниях ядер.  $D(x)$  имеет смысл суммарного коэффициента диффузии, то есть

$$D(x) = D_n(x) + D_e(x). \quad (1.29)$$

Ядерный коэффициент диффузии  $D_n(x)$  запишем в приближении Китагавы-Оцуки [51]

$$D_n(x) = \frac{2\pi}{v} \cdot Z_1 e^2 \cdot L_n \cdot \rho_{nuc}(x), \quad (1.30)$$

где  $L_n = \ln \left[ 1.29 \cdot a \cdot E \cdot M_2 / (Z_1 Z_2 (M_1 + M_2) \cdot e^2) \right]$  – ядерный логарифм, в случае МэВ-энергий, приближение, предложенное Линдхардом [6];  $L_n = 2 \ln \left[ 138 / Z_2^{1/3} \right]$  – ядерный логарифм, для релятивистских энергий;  $e^2$  – заряд электрона;  $M_1$ ,

$M_2$  – массы частицы и ядра атома кристалла;  $\rho_{nucl}(x)$  – плотность распределения ядер в плоскостном канале кристалла, после разложения в ряд Фурье

$$\rho_{nucl}(x) = \frac{1}{d^3} \sum_{n_x} \sum_{j=1}^8 \exp \left[ -\frac{\sigma^2 g_x^2}{2} \right] \cos [2\pi n_x (x - x_j)]. \quad (1.31)$$

Электронный коэффициент диффузии, в приближении локальной электронной плотности

$$D_{el}(x) = \frac{2\pi}{v} \cdot Z_1 Z_2 e^2 \cdot L_e \cdot \rho_{el}(x), \quad (1.32)$$

где  $L_e = \left[ \ln(2m_e \beta^2 \gamma^2 / I) - \beta^2 \right]$  – электронный логарифм;  $I = 11.5 \cdot Z_2$  – средний ионизационный потенциал кристалла;  $\rho_{el}(x)$  – плотность распределения электронов в плоскостном канале кристалла, после разложения в тригонометрический ряд Фурье имеет вид

$$\rho_{el}(x) = \frac{1}{d^3} \sum_{n_x} \sum_{j=1}^8 F(g_x^2) \exp \left[ -\frac{\sigma^2 g_x^2}{2} \right] \cos [2\pi n_x (x - x_j)], \quad (1.33)$$

где  $F(g_x)$  – форм-фактор атома кристалла, в приближении Дойля-Тернера

$$F(g_x) = \sum_{i=1}^4 \alpha_i \cdot \exp \left[ -\frac{\beta_i \cdot g_x^2}{(4\pi)^2} \right] + c.$$

Форм-фактор атома кристалла в приближении Мольер

$$F(g_x) = Z_2 \sum_{i=1}^3 \frac{\alpha_i (\beta_i / a)^2}{g_x^2 + (\beta_i / a)^2}. \quad (1.34)$$

Значения коэффициентов  $\alpha_i$ ,  $\beta_i$ ,  $c$  для кремния и германия, в приближении Дойля-Тернера, приведены в таблице 1.3.

График коэффициента диффузии  $D(x)$  (1.29) для протонов с энергией 200 ГэВ в плоскостном канале (110) кристалла германия для приближения потенциала изолированного атома Мольер и Дойля-Тернера имеет вид, изображен-

ный на рис. 1.4. Видно, что для частиц, движущихся в центральной части канала, коэффициент диффузии невелик, так как здесь наблюдается рассеяние только на атомных электронах, а при приближении к атомным плоскостям кристалла будет доминировать рассеяние на атомных ядрах, которое, как видно, гораздо сильнее влияет на процесс выхода частиц из канала.

	Кремний		Германий	
i	$\alpha_i, \text{\AA}$	$\beta_i, \text{\AA}^2$	$\alpha_i, \text{\AA}$	$\beta_i, \text{\AA}^2$
1	6.2915	2.4386	16.0816	2.8509
2	3.0353	32.3337	6.3747	0.2516
3	1.9891	0.6785	3.7068	11.4468
4	1.5410	81.6937	3.6830	54.7625
	$c = 1.1407$		$c = 2.1313$	

Таблица 1.3. Коэффициенты  $\alpha_i$ ,  $\beta_i$ ,  $c$  для кристаллов кремния и германия

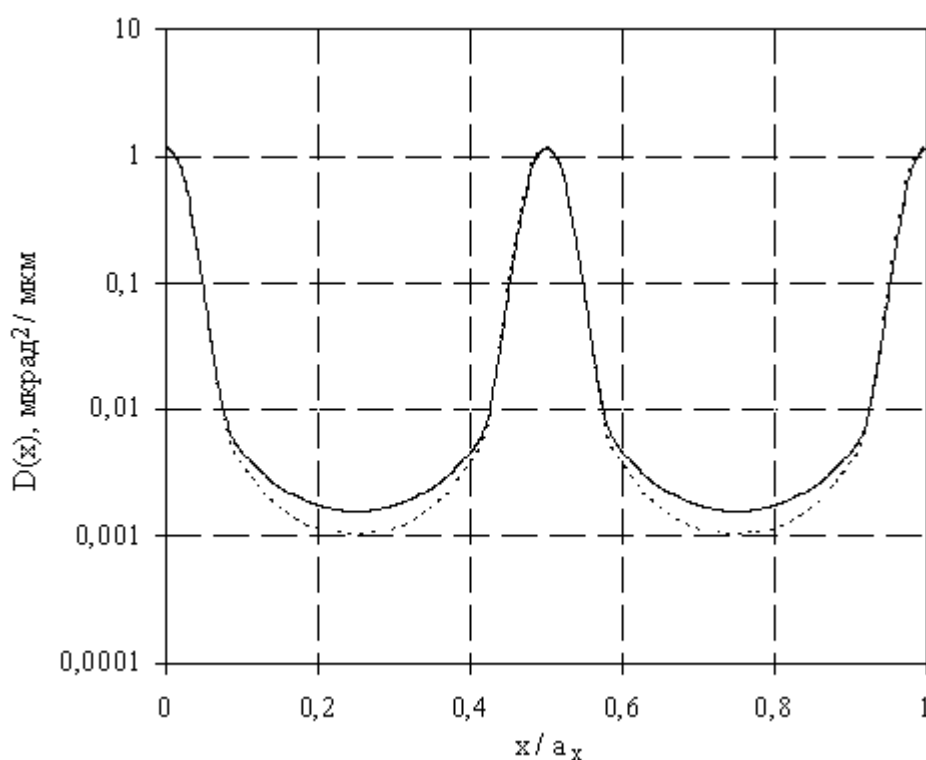


Рис. 1.4. Коэффициент диффузии для протонов с энергией 200 ГэВ в плоскостном (110) канале кристалла германия в приближении Мольер и Дойля-Тернера.

Сплошная линия в приближении Мольер, пунктирная – Дойля-Тернера

## 1.5 Потенциал переходной области ось-плоскость

В [8] (см. также обзор [52]) было сообщено об обнаружении нового эффекта, возникающего при каналировании первоначально изотропного потока ионов. В зависимости от условий эксперимента наблюдается либо уменьшение поперечной энергии, либо увеличение поперечной энергии ионов, которые движутся в ориентированном кристалле. Удовлетворительного теоретического объяснения этого феномена к настоящему времени не найдено.

В работе [53] был впервые обнаружен эффект влияния атомных цепочек, из которых состоит кристаллографическая плоскость, на движение каналированных ионов. Теория резонансного деканалирования, описывающая этот эффект, была построена в [54]. В рамках этой теории было показано, что непрерывный потенциал в центральной части плоскостного канала (110) кристалла кремния необходимо дополнить слагаемым, с помощью которого может быть учтено периодическое воздействие атомных цепочек  $\langle 110 \rangle$  на движение каналированных ионов.

Следуя работам [38], [56] построим явный вид этого дополнительного слагаемого, с помощью которого может быть описано движение каналированных ионов в кубических кристаллах со сложным базисом.

Движение каналированных частиц в плоскости  $ZOY$ , которая компланарна соответствующей кристаллографической плоскости, на небольших участках траектории можно считать свободным. Пусть

$$\tau = \nu \cdot t; \quad y = \tau \cdot \sin \theta; \quad z = \tau \cdot \cos \theta, \quad (1.35)$$

где  $\theta$  – угол влета частиц в кристалл, в плоскости  $ZOY$ .

Перепишем уравнение (1.11) с учетом (1.35) в виде

$$\frac{d^2x}{d\tau^2} = -\frac{\varepsilon^2}{V_{\max}} \frac{\partial}{\partial x} U(x, \tau), \quad (1.36)$$

где  $\varepsilon^2 = \frac{V_{\max}}{mV^2}$  – квадрат малого безразмерного параметра  $\varepsilon$ ;  $V_{\max}$  – максимальное значение непрерывного потенциала атомной плоскости кристалла.

С помощью метода многих масштабов [29] (см. также [55,57,58]) будем искать решение уравнения (1.36) в виде ряда по степеням малости  $\varepsilon$

$$x = x_0(T_0, T_1, T_2, \dots) + \varepsilon \cdot x_1(T_0, T_1, T_2, \dots) + \varepsilon^2 \cdot x_2(T_0, T_1, T_2, \dots),$$

где  $T_0 = \tau$ ,  $T_1 = \varepsilon \cdot \tau$ ,  $T_2 = \varepsilon^2 \cdot \tau$ .

Уравнение (1.36) в новых переменных имеет вид

$$\begin{aligned} & \frac{\partial^2 x_0}{\partial T_0^2} + \varepsilon \cdot \left( \frac{\partial^2 x_1}{\partial T_0^2} + 2 \frac{\partial^2 x_0}{\partial T_0 \cdot \partial T_1} \right) + \\ & + \varepsilon^2 \cdot \left( \frac{\partial^2 x_2}{\partial T_0^2} + 2 \frac{\partial^2 x_1}{\partial T_0 \cdot \partial T_1} + \frac{\partial^2 x_0}{\partial T_1^2} + 2 \frac{\partial^2 x_0}{\partial T_0 \cdot \partial T_2} + \frac{\partial}{\partial x_0} \frac{U(x_0, T_0)}{V_{\max}} \right) = 0 \end{aligned}$$

Решения уравнений нулевого и первого порядков малости по  $\varepsilon$ , в которых исключены секулярные слагаемые, имеют вид

$$x_0 = x_0(T_1, T_2, \dots); \quad x_1 = x_1(T_1, T_2, \dots).$$

Уравнение второго порядка малости по  $\varepsilon$  имеет вид

$$\frac{\partial^2 x_2}{\partial T_0^2} + \frac{\partial^2 x_0}{\partial T_1^2} = -\frac{1}{V_{\max}} \frac{\partial}{\partial x_0} \sum_{\vec{g}} U(\vec{g}) \cdot \exp \left\{ i \left[ x_0 g_x + T_0 (g_y \sin \theta + g_z \cos \theta) \right] \right\}. \quad (1.37)$$

Пусть  $\theta = \theta_{kl} + \Delta\theta$ , то есть рассмотрим движение каналированных частиц под малым углом  $\Delta\theta \geq \varepsilon$  к одной из кристаллографической осей, из которых состоит атомная плоскость. Тогда угол  $\theta_{kl}$ , определяющий направление кристаллографической оси  $\langle 0kl \rangle$  в атомной плоскости (100), связан с коэффициентами ряда Фурье  $n_y = k$  и  $n_z = l$  соотношением

$$g_{yk} \cdot \sin \theta_{kl} + g_{zl} \cdot \cos \theta_{kl} = 0 ,$$

где  $g_{yk} = 2\pi \cdot k / a_y$ ;  $g_{zl} = 2\pi \cdot l / a_z$ .

Для того, чтобы исследовать движение каналированных частиц в другом плоскостном канале необходимо осуществить переход к новой системе координат, которая будет повернута относительно старой системы координат на заданный угол, и пересчитать координаты атомов в элементарной ячейке относительно этой новой системы координат. Таким образом, при  $n_y = k$ ,  $n_z = l$  и  $\Delta\theta \geq \varepsilon$  в уравнении (1.37) появляется малый параметр  $g_{ke} = [k \cdot \sin(\theta_{ke} + \Delta\theta) + \ell \cdot \cos(\theta_{ke} + \Delta\theta)] \geq \varepsilon$ . Интегрируя уравнение (1.37) по  $T_0$ , приравняем к нулю секулярное слагаемое, что даст нам уравнение эволюции для  $x_0 = x_0(T_1, T_2, \dots)$ , которое имеет вид

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 x_0}{\partial T_1^2} = & -\frac{1}{V_{\max}} \frac{\partial}{\partial x_0} \sum_{gx} \{ U(g_x, 0, 0) \cdot \exp(i \cdot x_0 \cdot g_x) + \\ & + U(g_x, g_{yk}, g_{zl}) \cdot \exp\left(i \cdot [x_0 g_x + 2\pi g_{kl} / (\varepsilon \cdot d) \cdot T_1]\right) \}, \end{aligned} \quad (1.38)$$

Решение уравнения (1.37) для  $x_2 = x_2(T_0, T_1, \dots)$  является быстроосциллирующей функцией второго порядка малости по  $\varepsilon$  к решению уравнения (1.38), которое описывает траектории каналированных частиц в переходной области ось-плоскость. Таким образом, потенциал переходной области ось-плоскость имеет

$$\begin{aligned} U_{sp}(x, t) = & \sum_{gx} \{ U(g_x, 0, 0) \cdot \exp(i \cdot x \cdot g_x) + \\ & + U(g_x, g_{yk}, g_{zl}) \cdot \exp[i \cdot (x \cdot g_x + \omega_{kl} \cdot t)] \}, \end{aligned}$$

где  $\omega_{kl} = 2\pi \cdot v \cdot g_{kl}$  – частота, с которой частица пересекает атомные цепочки  $\langle 0kl \rangle$ , лежащие в атомной плоскости (100).

Потенциал переходной области ось-плоскость получен при условии  $\Delta\theta \geq \varepsilon$ , поскольку при меньших углах разориентации нарушается условие применимости формулы (1.35), так как частицы в этом случае совершают финитное движение в осевом канале кристалла, образованном цепочками  $\langle 0kl \rangle$ . Верхнюю границу угла разориентации  $\Delta\theta$  можно оценить как угловое расстояние от выделенной атомной цепочки  $\langle 0kl \rangle$  до ближайшей высокоиндексной кристаллографической оси, которая может оказать заметное влияние на характер движения частиц в плоскостном канале.

Очевидно, что резонансное деканализирование, вызванное потенциалом переходной области ось-плоскость необходимо рассматривать как дополнение к тому, что обсуждались в работах [8], [52].

Потенциал переходной области ось-плоскость в виде разложения в тригонометрический ряд Фурье записывается следующим образом

$$U_{sp}(x, t) = \frac{1}{d^3} \sum_{n_x} \sum_{j=1}^8 V(g_x) \cdot \exp[-\sigma^2 g_x^2 / 2] \cdot \cos[2\pi n_x (x - x_j)] + \\ + V(g_{kl}) \exp[-\sigma^2 g_{kl}^2 / 2] \cdot \cos[2\pi \cdot (n_x (x - x_j) + t\phi_{kl} / \varepsilon - k \cdot y_j - l \cdot z_j)], \quad (1.39)$$

где  $g_x^2 = (2\pi n_x / a_x)^2$ ,  $g_{kl}^2 = (2\pi)^2 \cdot [(n_x / a_x)^2 + (k / a_y)^2 + (l / a_z)^2]$  – квадрат вектора обратной решетки;  $a_x$ ,  $a_y$ ,  $a_z$  – периоды решетки по направлениям осей  $OX$ ,  $OY$ ,  $OZ$ ;  $x_j$ ,  $y_j$ ,  $z_j$  – координаты атомов элементарной ячейки в единицах постоянной решетки;  $\Delta\theta$  – угол разориентации направления пучка частиц относительно кристаллографической оси;  $\theta_{kl} = -\arctg[(l \cdot a_y) / (k \cdot a_z)]$ ,  $\phi_{kl} = \sin(\theta_{kl} + \Delta\theta) \cdot k \cdot d / a_y + \cos(\theta_{kl} + \Delta\theta) \cdot l \cdot d / a_z$  – угол определяющий направление кристаллографической оси  $\langle 0kl \rangle$  в атомной плоскости.

На рис. 1.5 и рис. 1.6 представлены потенциалы переходной области ось-плоскость для плоскостного канала (111) кристалла германия для протонов с энергией 200 ГэВ, для углов разориентации  $\Delta\theta \approx 3,7\varepsilon$  и  $\Delta\theta \approx 6,1\varepsilon$ , соответственно.

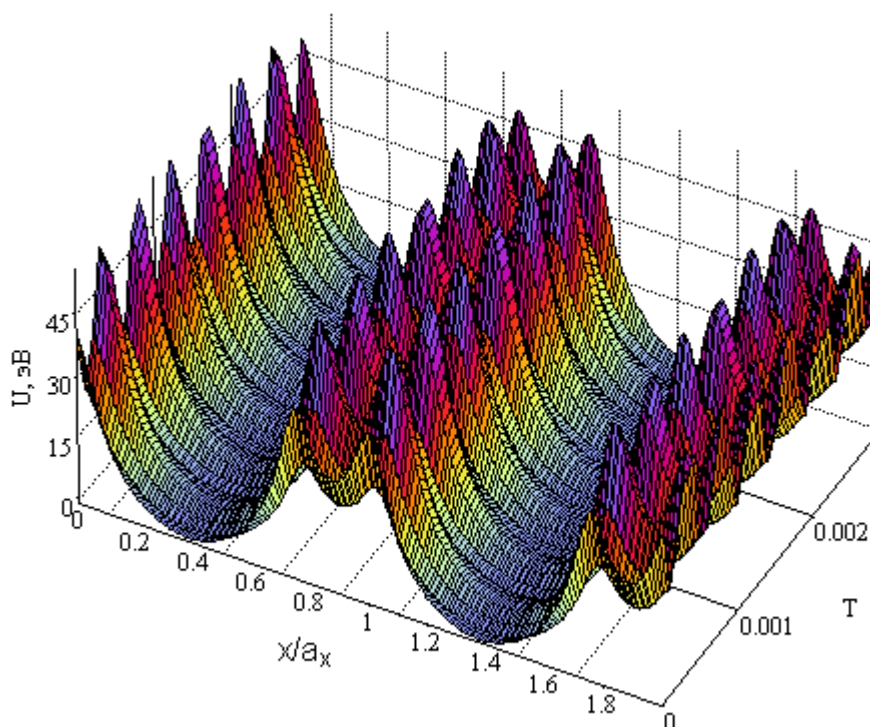


Рис. 1.5. Потенциал переходной области ось-плоскость для плоскостного канала (111) кристалла германия для протонов с энергией 200 ГэВ,  $\Delta\theta \approx 3,7\varepsilon$



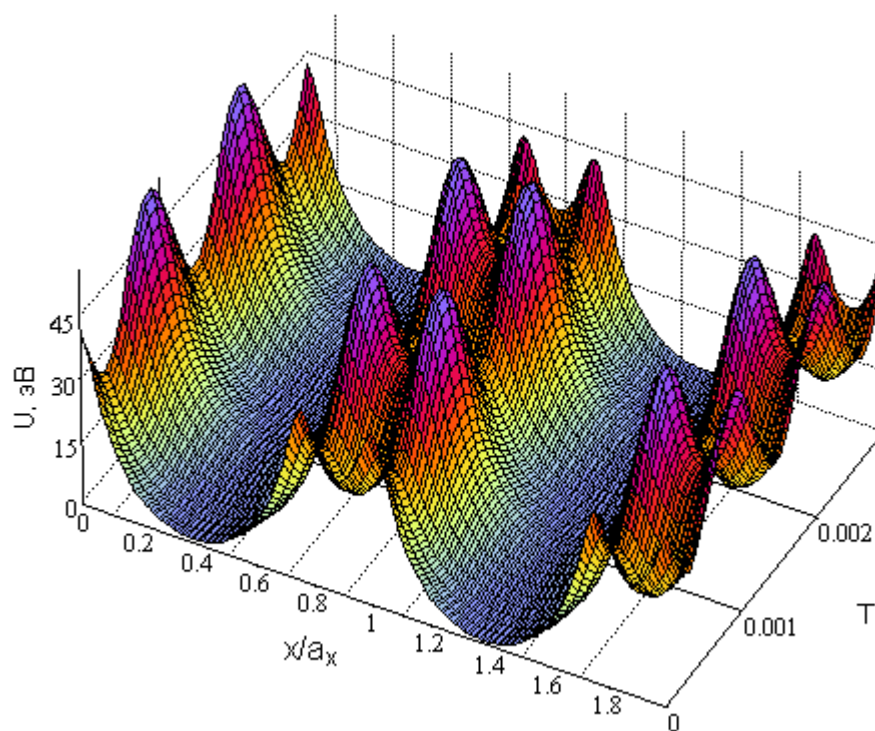


Рис. 1.6. Потенциал переходной области ось-плоскость для плоскостного канала (111) кристалла германия для протонов с энергией 200 ГэВ,  $\Delta\theta \approx 6,1\varepsilon$

## ГЛАВА 2. ФУНКЦИЯ РАСПРЕДЕЛЕНИЯ КАНАЛИРОВАННЫХ ЧАСТИЦ В ПРОСТРАНСТВЕ ПОПЕРЕЧНЫХ ЭНЕРГИЙ

### 2.1 Уравнение Фоккера – Планка в пространстве поперечных энергий

Движение быстрых заряженных частиц в кристаллах является стохастическим процессом, так как тепловые колебания атомов кристалла и квантовые флуктуации, которые испытывают атомные электроны, изменяют случайным образом значение поперечной силы, приводящей к малоугловому рассеянию. Преимущественное развитие теории эффекта каналирования происходило в рамках метода кинетических уравнений движения, описывающих эволюцию плотности потока каналированных частиц как в фазовом пространстве поперечных координат и скоростей, так и в пространстве поперечных энергий [59,60,61]. Ланжевеновский подход к теории каналирования был развит в работе [62,63]. Основным фактором, определяющим эволюцию потока каналированных частиц, является многократное рассеяние на тепловых колебаниях и квантовых флуктуаций атомных ядер и электронов кристаллов.

Кинетическое описание эффекта каналирования было впервые предложено Линдхардом [6] с помощью уравнения движения диффузионного типа. Ю. В. Мартыненко предложил [64] использовать кинетическое уравнение Фоккера-Планка в пространстве поперечных энергий для описания эффекта каналирования

$$\frac{\partial p}{\partial t} = - \frac{\partial [A(E_{\perp}, t) \cdot p]}{\partial E_{\perp}} + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 [B(E_{\perp}, t) \cdot p]}{\partial E_{\perp}^2}. \quad (2.1)$$

$p = p(E_{\perp}, t)$  – функция распределения частиц на глубине;  $A(E_{\perp}, t)$  – коэффициент сноса и  $B(E_{\perp}, t)$  – коэффициент диффузии определяются следующим образом [65]

$$A(E_{\perp}, t) = \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{\overline{\Delta E_{\perp}}}{\Delta t},$$

$$B(E_{\perp}, t) = \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{\overline{(\Delta E_{\perp})^2}}{\Delta t}.$$

Поперечную энергию каналированных частиц, можно представить как

$$E_{\perp} = \frac{m\dot{x}^2}{2} + \bar{U}(x). \quad (2.2)$$

Найдем производную от поперечной энергии частицы

$$\frac{dE_{\perp}}{dt} = m\ddot{x} + \frac{\partial \bar{U}(x)}{\partial x} \frac{\partial x}{\partial t} = (m\ddot{x} + \frac{\partial \bar{U}(x)}{\partial x})\dot{x} = \dot{x} \delta f_x.$$

Вдоль регулярной траектории будет выполняться уравнение

$$\frac{dE_{\perp}}{dt} \cong \dot{\bar{x}} \delta f_x,$$

где  $\bar{x} = \bar{x}(t)$  – решение уравнения Ньютона в отсутствии флуктуаций

$$m\ddot{\bar{x}} + \frac{\partial \bar{U}(\bar{x})}{\partial \bar{x}} = 0.$$

Тогда приращение  $E_{\perp}$  за малое время  $\Delta t$  определяется следующим образом

$$\Delta E_{\perp} = \int_t^{t+\Delta t} \dot{\bar{x}} \delta f_x dt.$$

Используя это выражение, найдем коэффициенты  $A(E_{\perp}, t)$  и  $B(E_{\perp}, t)$

$$A(E_{\perp}, t) = \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{\overline{\Delta E_{\perp}}}{\Delta t} = \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{1}{\Delta t} \int_t^{t+\Delta t} \dot{\bar{x}} \overline{\delta f_x} dt = 0,$$

так как  $\overline{\delta f_x} = 0$ .

$B(E_{\perp}, t)$  получим используя коррелятор  $\overline{\delta f_x(\vec{x}', t') \delta f_x(\vec{x}'', t'')} = D(\vec{x}) \delta(t' - t'')$ , где  $D(\vec{x})$  – коэффициент диффузии заряженных частиц в поле атомной плоскости

$$\begin{aligned} B(E_{\perp}, t) &= \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{\overline{(\Delta E_{\perp})^2}}{\Delta t} = \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{1}{\Delta t} \int_t^{t+\Delta t} \dot{x}(t') dt' \int_t^{t+\Delta t} \overline{\delta f_x(t') \delta f_x(t'')} \dot{x}(t'') dt'' = \\ &= \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{1}{\Delta t} \int_t^{t+\Delta t} D(t') \dot{x}^2(t') dt' = \dot{x}^2 D(\vec{x}). \end{aligned}$$

Подставим полученные коэффициенты  $A(E_{\perp}, t)$  и  $B(E_{\perp}, t)$  в (2.1) и получим уравнение диффузии в пространстве поперечных энергий

$$\frac{\partial f^{(1)}(E_{\perp}, t)}{\partial t} = \frac{B}{2} \frac{\partial^2 f^{(1)}(E_{\perp}, t)}{\partial E_{\perp}^2}, \quad (2.3)$$

где  $f^{(1)}(E_{\perp}, t) \equiv p(E_{\perp}, t)$  – решение уравнения Фоккера-Планка в первом порядке теории возмущения. Функцию  $f^{(1)}(E_{\perp}, t)$  определим в параграфе 2.4.

$$B = \dot{x}^2 D(\vec{x}) \equiv \frac{\overline{d\delta E_{\perp}^2}}{dt} \quad (2.4)$$

– коэффициент диффузии в пространстве поперечных энергий, вычисленный вдоль классической траектории, также описывает эволюцию среднего квадрата флуктуаций поперечной энергии,  $\overline{\delta E_{\perp}^2}$  – средний квадрат флуктуаций поперечной энергии. Формула (2.4) впервые была отмечена в работе [24]. Решение кинетического уравнения Фоккера-Планка в пространстве поперечных энергий на небольших отрезках траектории в тонких кристаллах сводится к решению уравнения диффузии (2.3).

## 2.2 Уравнение эволюции среднего квадрата флуктуаций поперечной энергии

Известно, что решения линеаризованных стохастических и кинетических уравнений совпадают между собой. Такие решения описывают процесс каналирования в тонких кристаллах. Решение линеаризованного стохастического уравнения движения может быть записано в пространстве поперечных энергий.

Используя ланжевеновский подход к описанию каналирования [62,63], получим уравнение эволюции среднего квадрата флуктуаций поперечной энергии (2.4).

Поперечная энергия в любой момент времени (2.2)

$$E_{\perp} = \frac{m\dot{x}^2}{2} + \bar{U}(x).$$

Флуктуация поперечной энергии

$$\delta E_{\perp} = m\dot{\bar{x}}\delta\dot{x} + \bar{U}_x\delta x.$$

Найдем скорость изменения флуктуации поперечной энергии

$$\delta\dot{E}_{\perp} = m\ddot{\bar{x}}\delta\dot{x} + m\dot{\bar{x}}\delta\ddot{x} + \bar{U}_{xx}\dot{\bar{x}}\delta x + \bar{U}_x\delta\dot{x} = m\dot{\bar{x}}\delta\ddot{x} + \bar{U}_{xx}\dot{\bar{x}}\delta x = \dot{\bar{x}}\delta f_x,$$

где  $\delta f_x = m\delta\ddot{x} + \bar{U}_{xx}\delta x$ , см (1.19).

Скорость изменения среднего квадрата флуктуаций поперечной энергии, иначе уравнение эволюции среднего квадрата флуктуаций поперечной энергии, запишем как

$$\frac{d\overline{\delta E_{\perp}^2}}{dt} = 2\overline{\delta E_{\perp}\delta\dot{E}_{\perp}} = 2\left(\overline{m\dot{\bar{x}}^2\delta\dot{x}\delta f_x} + \overline{\bar{U}_x\dot{\bar{x}}\delta x\delta f_x}\right) = 2m\dot{\bar{x}}^2\overline{\delta\dot{x}\delta f_x} = \dot{\bar{x}}^2 D(\bar{x}),$$

так как знаем, что корреляционные функции  $\overline{\delta x(t)\delta f_x(t)} = 0$ ,

$\overline{\delta \dot{x}(t) \delta f_x(t)} = \frac{D(x)}{2m}$ . Таким образом, используя ланжевеновский подход к теории каналирования мы получили уже известное по параграфу 2.1 уравнение (2.4).

### 2.3 Уравнение Фоккера-Планка в пространстве поперечных координат и скоростей

Кинетическое уравнение Фоккера-Планка в фазовом пространстве поперечных координат и скоростей было впервые предложено для описания эффекта каналирования в работе Китагавы и Оцуки [51]

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \dot{x} \frac{\partial f}{\partial x} + \frac{F(x)}{m} \frac{\partial f}{\partial \dot{x}} = \frac{D(x)}{2m^2} \frac{\partial^2 f}{\partial \dot{x}^2}. \quad (2.5)$$

Решение этого уравнения будем искать методом малого шума [28]. В нулевом приближении пренебрегаем многократным рассеянием, то есть полагаем  $D = 0$ , тогда уравнение Фоккера-Планка запишем

$$\frac{\partial f^{(0)}}{\partial t} + \dot{x} \frac{\partial f^{(0)}}{\partial x} + \frac{F(x)}{m} \frac{\partial f^{(0)}}{\partial \dot{x}} = 0.$$

Мы получили уравнение Лиувилля. Решение его есть произведение двух дельта-функций Дирака:  $f^{(0)} = \delta(x - \bar{x}(t)) \cdot \delta(\dot{x} - \dot{\bar{x}}(t))$ , где  $\dot{\bar{x}}(t) = d\bar{x}(t)/dt$ ,  $\bar{x}(t)$  – является решением уравнения Ньютона

$$m \frac{d^2 \bar{x}}{dt^2} = -\frac{\partial \bar{U}}{\partial x}, \quad (2.6)$$

начальные условия к уравнению имеют вид:  $\bar{x}_0 = \bar{x}(t=0)$ ;  $\dot{\bar{x}}_0 = \dot{\bar{x}}(t=0)$ .

Найдем вид уравнения Фоккера-Планка в первом порядке теории возмущений. Пусть  $x = \bar{x} + \varepsilon \eta$ ,  $\dot{x} = \dot{\bar{x}} + \varepsilon \dot{\eta}$ ;  $\eta = (x - \bar{x})/\varepsilon$ ,  $\dot{\eta} = (\dot{x} - \dot{\bar{x}})/\varepsilon$  - флуктуации

поперечной координаты и скорости; здесь  $\varepsilon$  - формальный параметр, вводимый с целью обозначения величин одного порядка малости. Обозначим  $s = t$ ,  $P(\eta, \dot{\eta}, s) = \varepsilon f(x, \dot{x}, t)$ . Найдем производные, входящие в уравнение Фоккера-Планка

$$\frac{\partial P}{\partial t} = \frac{\partial P}{\partial \eta} \frac{\partial \eta}{\partial t} + \frac{\partial P}{\partial \dot{\eta}} \frac{\partial \dot{\eta}}{\partial t} + \frac{\partial P}{\partial s} \frac{\partial s}{\partial t} = \frac{\dot{x}}{\varepsilon} \frac{\partial P}{\partial \eta} - \frac{\ddot{x}}{\varepsilon} \frac{\partial P}{\partial \dot{\eta}} + \frac{\partial P}{\partial s},$$

$$\frac{\partial P}{\partial x} = \frac{\partial P}{\partial \eta} \frac{\partial \eta}{\partial x} = \frac{1}{\varepsilon} \frac{\partial P}{\partial \eta}, \quad \frac{\partial P}{\partial \dot{x}} = \frac{\partial P}{\partial \dot{\eta}} \frac{\partial \dot{\eta}}{\partial \dot{x}} = \frac{1}{\varepsilon} \frac{\partial P}{\partial \dot{\eta}},$$

$$\frac{\partial^2 P}{\partial \dot{x}^2} = \frac{1}{\varepsilon^2} \frac{\partial^2 P}{\partial \dot{\eta}^2}.$$

Подставляем производные в уравнение Фоккера-Планка

$$\frac{\partial P}{\partial t} + \dot{x} \frac{\partial P}{\partial x} + \frac{F(x)}{m} \frac{\partial P}{\partial \dot{x}} = \varepsilon^2 \frac{D(x)}{2m^2} \frac{\partial^2 P}{\partial \dot{x}^2},$$

приписав коэффициенту диффузии второй порядок малости по  $\varepsilon$ . После несложных преобразований получим

$$\frac{\partial P}{\partial s} - \frac{\dot{x}}{\varepsilon} \frac{\partial P}{\partial \eta} - \frac{\dot{x}}{\varepsilon} \frac{F(\bar{x})}{m} \frac{\partial P}{\partial \dot{\eta}} + (\dot{x} + \varepsilon \dot{\eta}) \frac{1}{\varepsilon} \frac{\partial P}{\partial \eta} + \frac{F(\bar{x} + \varepsilon \eta)}{m\varepsilon} \frac{\partial P}{\partial \eta} = \varepsilon^2 \frac{D(\bar{x} + \varepsilon \eta)}{2m^2} \frac{1}{\varepsilon^2} \frac{\partial^2 P}{\partial \dot{\eta}^2},$$

$$\frac{\partial P}{\partial s} + \dot{\eta} \frac{\partial P}{\partial \eta} + \frac{[F(\bar{x} + \varepsilon \eta) - F(\bar{x})]}{m\varepsilon} \frac{\partial P}{\partial \eta} = \frac{D(\bar{x} + \varepsilon \eta)}{2m^2} \frac{\partial^2 P}{\partial \dot{\eta}^2}.$$

Разложим в ряд по степеням малого параметра  $\varepsilon$  поперечную силу и коэффициент диффузии

$$F(\bar{x} + \varepsilon \eta) \approx F(\bar{x}) + F'(\bar{x}) \cdot \varepsilon \eta + \dots,$$

$$F'(\bar{x}) = -U_{xx}(\bar{x}), \quad D(\bar{x} + \varepsilon \eta) \approx D(\bar{x}) + \dots$$

Сохраним в уравнении Фоккера-Планка члены одного порядка малости по  $\varepsilon$

$$\frac{\partial P}{\partial s} + \dot{\eta} \frac{\partial P}{\partial \eta} + \frac{F'(\bar{x})}{m} \eta \frac{\partial P}{\partial \eta} = \frac{D(\bar{x})}{2m^2} \frac{\partial^2 P}{\partial \dot{\eta}^2}.$$

Таким образом, в первом порядке теории возмущения уравнение Фоккера-Планка имеет вид

$$\frac{\partial f^{(1)}}{\partial t} + \dot{\eta} \frac{\partial f^{(1)}}{\partial \eta} - \frac{U_{xx}[\bar{x}(t)]}{m} \eta \frac{\partial f^{(1)}}{\partial \dot{\eta}} = \frac{D[\bar{x}(t)]}{2m^2} \frac{\partial^2 f^{(1)}}{\partial \dot{\eta}^2},$$

где  $\eta = x - \bar{x}$ ;  $\dot{\eta} = \dot{x} - \dot{\bar{x}}$  - флуктуации поперечной координаты и скорости, а коэффициенты диффузии  $D(\bar{x}(t))$  и сноса  $F(\bar{x}(t))$  являются функциями решения уравнения Ньютона. В нулевом приближении теории возмущения уравнение Фоккера-Планка описывает гладкую траекторию, а в первом приближении – флуктуации относительно гладкой траектории. Решением уравнения Фоккера-Планка в первом порядке теории возмущения в фазовом пространстве поперечных координат и скоростей является свертка функций распределений  $f^{(0)}$ ,  $f^{(1)}$

$$f^{(1)}(x, \dot{x}, t) = \iint \delta(x - \bar{x} - \eta) \delta(\dot{x} - \dot{\bar{x}} - \dot{\eta}) f^{(1)}(\eta, \dot{\eta}, t) d\eta d\dot{\eta}. \quad (2.7)$$

Непосредственной подстановкой можно показать, что решением уравнения (2.5) является следующая функция распределения флуктуаций поперечной координаты и скорости

$$f^{(1)}(\eta, \dot{\eta}, t) = \frac{1}{2\pi\Delta} \cdot \exp \left[ -\frac{\dot{\eta}^2 \overline{(\delta x)^2} + \eta^2 \overline{(\delta \dot{x})^2} - 2\dot{\eta}\eta \cdot \overline{\delta x \cdot \delta \dot{x}}}{2\Delta^2} \right],$$

где  $\Delta^2 = \overline{(\delta x)^2} \cdot \overline{(\delta \dot{x})^2} - (\overline{\delta x \cdot \delta \dot{x}})^2$ ,  $f^{(1)}(\eta, \dot{\eta}, t=0) = \delta(\eta) \cdot \delta(\dot{\eta})$ , если вторые моменты удовлетворяют системе уравнений (1.28)

$$\begin{cases} \frac{d}{dt} \overline{\delta x^2} = 2\overline{\delta x \delta \dot{x}} \\ \frac{d}{dt} \overline{\delta x \delta \dot{x}} = \overline{\delta \dot{x}^2} - \frac{1}{m} \bar{U}_{xx} \overline{\delta x^2} \\ \frac{d}{dt} \overline{\delta \dot{x}^2} = -\frac{2}{m} \bar{U}_{xx} \overline{\delta x \delta \dot{x}} + \frac{D(\bar{x})}{m^2} \end{cases}$$



## 2.4 Функция распределения частиц в пространстве поперечных энергий

Применение метода компьютерного моделирования в фазовом пространстве поперечных координат и скоростей для частиц с большой энергией затруднительно, так как время расчета достаточно велико. Перспективным является использование кристаллов с большим атомным номером  $Z$ , но расчет в таких кристаллах приведет к еще большим затратам компьютерного времени. Как уже отмечалось, для сокращения машинного времени счета описание процесса каналирования производят не в фазовом пространстве поперечных координат и скоростей, а в фазовом пространстве поперечных энергий.

Найдем решение уравнения Фоккера-Планка в пространстве поперечных энергий в первом порядке теории возмущения, это будет функция распределения, построенная с помощью (2.7)

$$f^{(1)}(E_{\perp}, t) = \iint \delta \left[ E_{\perp} - m\dot{x}^2 / 2 - \bar{U}(x) \right] f^{(1)}(x, \dot{x}, t) dx d\dot{x} . \quad (2.8)$$

Перепишем (2.8)

$$\begin{aligned} f^{(1)}(E_{\perp}, t) &= \int f^{(1)}(\eta, \dot{\eta}, t) d\eta d\dot{\eta} \int \delta \left[ E_{\perp} - m\dot{x}^2 / 2 - \bar{U}(x) \right] \delta(x - \bar{x} - \eta) \delta(\dot{x} - \dot{\bar{x}} - \dot{\eta}) dx d\dot{x} , \\ f^{(1)}(E_{\perp}, t) &= \iint \delta \left[ E_{\perp} - \frac{m(\dot{\bar{x}} + \dot{\eta})^2}{2} - \bar{U}(\bar{x} + \eta) \right] f^{(1)}(\eta, \dot{\eta}, t) d\eta d\dot{\eta} . \end{aligned} \quad (2.9)$$

Используя следующее выражение

$$\delta \left[ E_{\perp} - \frac{m(\dot{\bar{x}} + \dot{\eta})^2}{2} - \bar{U}(\bar{x} + \eta) \right] \approx \delta \left[ E_{\perp} - E_{\perp 0} - m\dot{\bar{x}}\dot{\eta} - \bar{U}_x(\bar{x})\eta \right] = \frac{\delta(\dot{\eta} - \dot{\eta}_r)}{|m\dot{\bar{x}}|} ,$$

$$\text{где } \dot{\eta}_r = \frac{E_{\perp} - E_{\perp 0} + U_x(\bar{x})\eta}{m\dot{\bar{x}}} = \frac{\delta E_{\perp} + U_x(\bar{x})\eta}{m\dot{\bar{x}}} ,$$

проинтегрируем (2.9)

$$\begin{aligned}
f^{(1)}(E_{\perp}, t) &= \frac{1}{2\pi\Delta} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\eta}{|m\dot{x}|} \cdot \\
&\cdot \exp \left[ -\frac{1}{2\Delta^2} \left( \frac{\overline{\delta x^2}}{m^2 \dot{x}^2} (\delta E_{\perp} + U_x \eta) \right)^2 + \overline{\delta \dot{x}^2} \eta^2 - 2\eta \overline{\delta x \delta \dot{x}} \frac{(\delta E_{\perp} + \eta U(\bar{x}))}{m\dot{x}} \right] = \frac{1}{2\pi\Delta} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\eta}{|m\dot{x}|} \cdot \\
&\cdot \exp \left[ -\frac{\eta^2}{2\Delta^2} \left( \frac{U_x^2 \overline{\delta x^2}}{m^2 \dot{x}^2} + \overline{\delta \dot{x}^2} - \frac{2U_x \overline{\delta x \delta \dot{x}}}{m\dot{x}} \right) - \frac{\eta}{\Delta^2} \left( \frac{U_x \delta E_{\perp} \overline{\delta x^2}}{m^2 \dot{x}^2} - \frac{\delta E_{\perp} \overline{\delta x \delta \dot{x}}}{m\dot{x}} \right) - \right. \\
&\left. - \frac{1}{2\Delta^2} \frac{\delta E_{\perp}^2 \overline{\delta x^2}}{m^2 \dot{x}^2} \right] = \frac{1}{2\pi\Delta |m\dot{x}|} \cdot \sqrt{\frac{2\pi\Delta^2 m^2 \dot{x}^2}{U_x^2 \overline{\delta x^2} + m^2 \dot{x}^2 \overline{\delta \dot{x}^2} + 2U_x \overline{\delta x \delta \dot{x}} m\dot{x}}} \cdot \\
&\cdot \exp \left[ -\frac{1}{2\Delta^2} \frac{\delta E_{\perp}^2 \overline{\delta x^2}}{m^2 \dot{x}^2} + \frac{1}{2\Delta^2} \frac{(U_x \delta E_{\perp} \overline{\delta x^2} - m\dot{x} \delta E_{\perp} \overline{\delta x \delta \dot{x}})^2}{m^4 \dot{x}^4 \left( \frac{U_x^2 \overline{\delta x^2}}{m^2 \dot{x}^2} + \overline{\delta \dot{x}^2} + \frac{2U_x \overline{\delta x \delta \dot{x}}}{m\dot{x}} \right)} \right] = \\
&= \left( 2\pi (U_x^2 \overline{\delta x^2} + m^2 \dot{x}^2 \overline{\delta \dot{x}^2} + 2U_x m\dot{x} \overline{\delta x \delta \dot{x}}) \right)^{-1/2} \cdot \\
&\cdot \exp \left[ -\frac{\delta E_{\perp}^2}{2\Delta^2 m^2 \dot{x}^2} \left( \overline{\delta \dot{x}^2} - \frac{(U_x \overline{\delta x^2} + m\dot{x} \overline{\delta x \delta \dot{x}})^2}{U_x^2 \overline{\delta x^2} + m^2 \dot{x}^2 \overline{\delta \dot{x}^2} + 2m\dot{x} \overline{\delta x \delta \dot{x}} U_x} \right) \right] = \left( 2\pi (U_x \delta x + m\dot{x} \delta \dot{x})^2 \right)^{-1/2} \cdot \\
&\cdot \exp \left[ -\frac{\delta E_{\perp}^2}{2\Delta^2 m^2 \dot{x}^2} \left( \frac{U_x^2 (\overline{\delta x^2})^2 + m^2 \dot{x}^2 \overline{\delta x^2} \cdot \overline{\delta \dot{x}^2} - 2m\dot{x} U_x \overline{\delta x^2} \overline{\delta x \delta \dot{x}}}{(U_x \delta x + m\dot{x} \delta \dot{x})^2} - \right. \right. \\
&\left. \left. - \frac{U_x^2 (\overline{\delta x^2})^2 + 2m\dot{x} U_x \overline{\delta x^2} \overline{\delta x \delta \dot{x}} - m^2 \dot{x}^2 (\overline{\delta x \delta \dot{x}})^2}{(U_x \delta x + m\dot{x} \delta \dot{x})^2} \right) \right].
\end{aligned}$$

После сокращения слагаемых в экспоненте и используя определение  $\Delta^2 = \overline{(\delta x)^2} \cdot \overline{(\delta \dot{x})^2} - (\overline{\delta x \cdot \delta \dot{x}})^2$ , а также вводя обозначение среднего квадрата флуктуаций поперечной энергии

$$\overline{\delta E_{\perp}^2} = \overline{(U_x \delta x + m\dot{x} \delta \dot{x})^2} = U_x^2(\bar{x}) \overline{\delta x^2} + m^2 \dot{x}^2 \overline{\delta \dot{x}^2} + 2U_x(\bar{x}) m\dot{x} \overline{\delta x \delta \dot{x}}, \quad (2.10)$$

получим функцию распределения флуктуаций поперечной энергии

$$f^{(1)}(E_{\perp}, t) = \left( 2\pi \overline{\delta E_{\perp}^2} \right)^{-1/2} \exp \left[ -\delta E_{\perp}^2 / 2\overline{\delta E_{\perp}^2} \right],$$

которую также можем записать в следующем виде

$$f^{(1)}(E_{\perp}, t) = \left(2\pi \overline{\delta E_{\perp}^2}\right)^{1/2} \exp\left[-(E_{\perp} - E_{\perp 0})^2 / 2\overline{\delta E_{\perp}^2}\right]. \quad (2.11)$$

Можно показать, что с учетом уравнения движения по классической траектории (2.6) и системы уравнений (1.28) производная  $\overline{\delta E_{\perp}^2}$  (2.10) будет равна

$$\frac{d\overline{\delta E_{\perp}^2}}{dt} = \dot{\bar{x}}^2 D(\bar{x}). \quad (2.12)$$

Полученная функция распределения (2.11) является решением уравнения Фоккера-Планка в пространстве поперечных энергий в первом порядке теории возмущений. Непосредственной подстановкой  $f^{(1)}(E_{\perp}, t)$  в уравнение Фоккера-Планка можно показать, что для  $\overline{\delta E_{\perp}^2}$  будут выполняться уравнения (2.3), (2.4).

Распределение частиц в канале по поперечным энергиям можно построить следующим образом

$$F(E_{\perp}, t) = \sum f^{(1)}(E_{\perp}, t).$$

На рис. 2.1. представлено распределение протонов с энергией 6 ГэВ в плоскостном (110) канале кристалла германия на глубине 2,2 мкм в случае 50 и 150 частиц. Начальное распределение частиц задавалось равномерным в пределах плоскостного канала. Угол влета частиц 3,79 мрад.

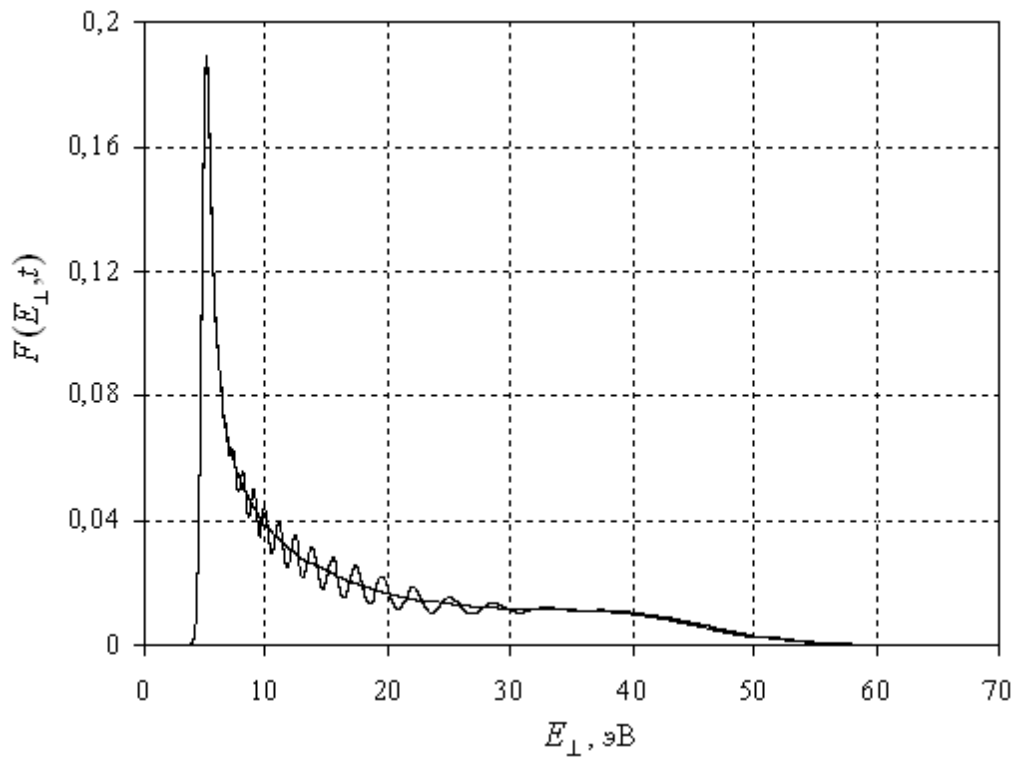


Рис. 2.1. Распределение по поперечным энергиям протонов с энергией 6 ГэВ в плоскостном (110) канале кристалла германия на глубине 2,2 мкм. Осциллирующий график учитывает вклады от 50 частиц, гладкий – от 150 частиц

## 2.5 Исследование уравнения эволюции среднего квадрата флуктуаций поперечной энергии

В разных параграфах данной главы мы разными подходами показали, что при решении уравнения Фоккера-Планка в пространстве поперечных энергий важным является уравнение эволюции среднего квадрата флуктуаций поперечной энергии частицы, которое также определяет коэффициент диффузии в диффузионном уравнении (2.3)

$$\frac{d\overline{\delta E_{\perp}^2}}{dt} = \dot{\bar{x}}^2 D(\bar{x}).$$

На рис. 2.2 изображены траектории и поперечные скорости двух частиц в режиме каналирования и надбарьерного движения для протонов и антипротонов с энергией 6 ГэВ в плоскостном (110) канале кристалла германия. Также на рисунке показана динамика изменения среднего квадрата флуктуаций поперечной энергии  $\overline{\delta E_{\perp}^2}$  для данных частиц. Видно, что скорость возрастания среднего квадрата флуктуаций поперечной энергии каналированных протонов равна нулю в точках поворота траектории, которые расположены максимально близко к атомным плоскостям на глубине проникновения 2 мкм, 6 мкм и 10 мкм. Таким образом, деканалирование быстрых протонов будет подавлено, так как происходит уменьшение приращения  $\overline{\delta E_{\perp}^2}$  за счет многократного рассеяния на ядрах атомов кристалла. Для антипротонов уменьшение деканалирования будет незначительным, так как уменьшение приращения  $\overline{\delta E_{\perp}^2}$  за счет многократного рассеяния антипротонов на ядрах атомов кристалла достигается только при их движении в центральной части плоскостного канала.

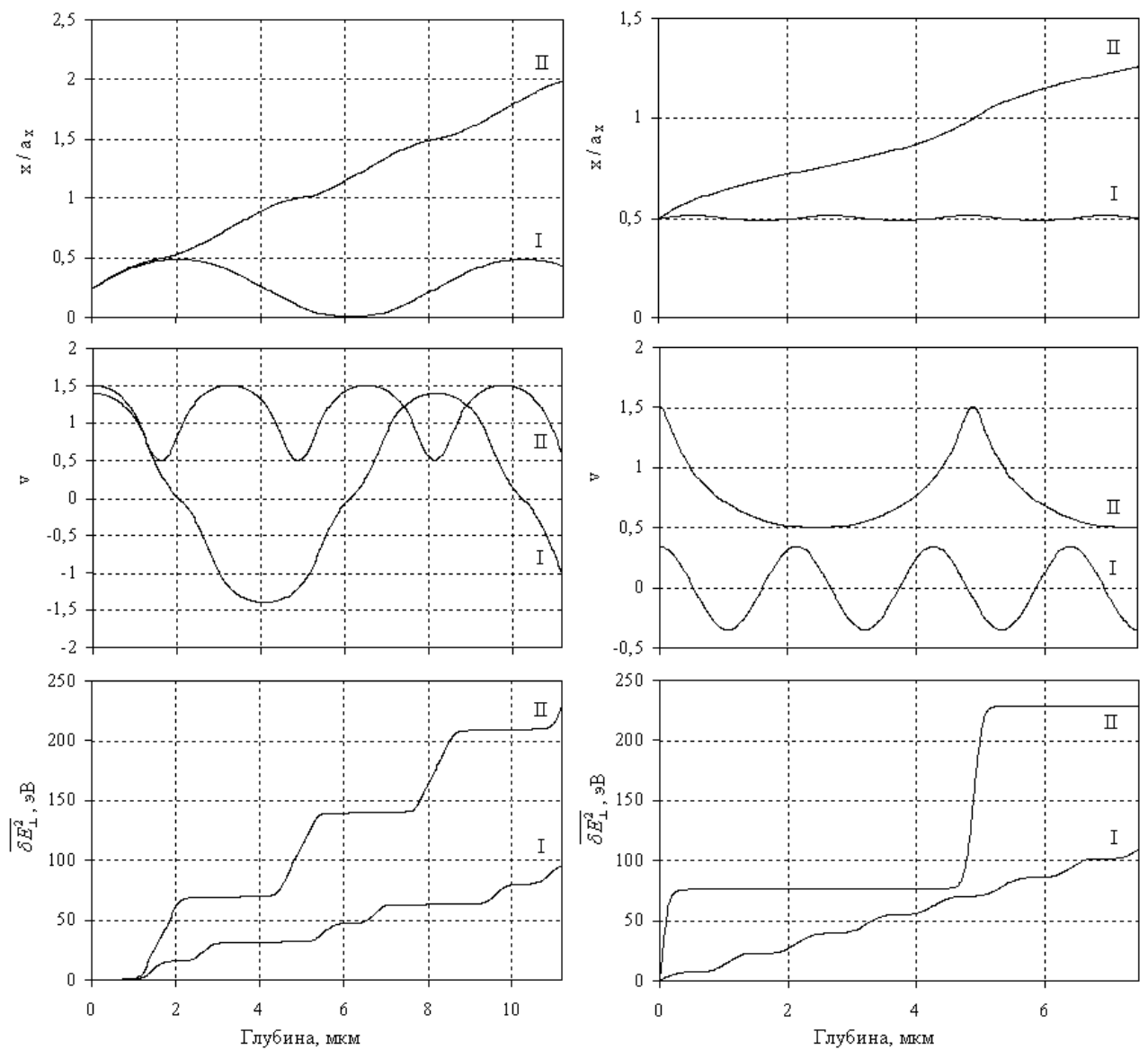


Рис. 2.2. Траектории и поперечные скорости двух частиц в режиме каналирования (I) и надбарьерного (II) движения для протонов (слева) и антипротонов (справа) с энергией 6 ГэВ в плоскостном (110) канале кристалла германия и соответствующая им динамика изменения  $\overline{\delta E_{\perp}^2}$

## **ГЛАВА 3. КОМПЬЮТЕРНАЯ ПРОГРАММА РАСЧЕТА ТРАЕКТОРИЙ КАНАЛИРОВАННЫХ ЧАСТИЦ**

### **3.1 Компьютерное моделирование и компьютерная программа STE**

Чтобы получить решение по всей длине некоторого кристалла, поступают следующим образом. Кристалл разбивается на стопку тонких кристаллов. При этом нелинейное стохастическое уравнение движения может быть линеаризовано в каждом из тонких кристаллов. С помощью линеаризованного стохастического уравнения движения учитывается влияние динамики изменения средних значений динамических величин на эволюцию флуктуаций относительно этих средних. Обратное влияние флуктуаций на динамику изменения средних значений динамических величин учитывается с помощью свертки функции распределения при переходе от одного тонкого кристалла к другому.

В методе компьютерного моделирования траекторий это означает, что при переходе от одного тонкого кристалла к другому значения поперечной координаты и скорости разыгрываются с помощью функции распределения флуктуаций поперечной координаты и скорости относительно своих средних значений. Система уравнений для моментов функции распределения строится с помощью системы линеаризованных стохастических уравнений. При переходе от одного тонкого кристалла к другому следует переопределять не только значения поперечной координаты и скорости, но и полную энергию частиц. Очевидно, что более предпочтительным является развитие метода компьютерного моделирования траекторий каналированных частиц в пространстве поперечных энергий.

Решение линеаризованного стохастического уравнения движения может быть записано в пространстве поперечных энергий. Предлагаемый в работе метод учёта многократного рассеяния при компьютерном моделировании траекторий каналированных частиц в плоскостных каналах кристалла основан на уравнении эволюции среднего квадрата флуктуации поперечной энергии. Так средний квадрат флуктуаций поперечной энергии, рассчитываемый вдоль каждой траектории, выступает основной характеристикой процесса рассеяния каналированных ионов на флуктуациях потенциала атомной плоскости.

Была создана компьютерная программа, имеющая название STE (от the Space of Transversal Energy), так как моделирование траекторий каналированных частиц производится в пространстве поперечных энергий. Программа STE основана на решении системы уравнений (2.4) и (1.18), описывающих движение частиц в каждом тонком кристалле

$$\begin{cases} m\ddot{x} = -\frac{\partial U}{\partial x} \\ \frac{d\overline{\delta E_{\perp}^2}}{dt} = \dot{x}^2 D(\bar{x}) \end{cases} \quad (3.1)$$

где  $U(x)$ , в зависимости от задачи моделирования это, потенциал плоскостного канала (1.10) или потенциал переходной области ось-плоскость (1.39);  $D(x)$  – коэффициент диффузии, см. (1.29). Здесь и далее в данном разделе под  $x$  будем понимать  $x \equiv \bar{x}$ .

Многократное рассеяние определяется с помощью розыгрыша значений поперечной скорости (угла) частицы. Условиями розыгрыша являются условия малости флуктуаций, то есть розыгрыш производится при превышении порогового значения среднего квадрата флуктуации поперечной энергии  $\overline{\delta E_{\perp}^2}_{\max}$ . Розыгрыш запрещается, если после предыдущего розыгрыша пройдено расстоя-



ние, меньшее  $T_{\min}$ , которое определяется минимальным количеством столкновений частицы с атомами кристалла, после которого возможно рассеяние. В расчётах  $T_{\min}$  бралось порядка длины одного шага решения, но большим  $60 \text{ \AA}$ ,

$$\text{а } \overline{\delta E_{\perp \max}^2} = (0,05 \cdot V_{\max})^2.$$

Переопределение значений поперечной скорости производится случайным образом

$$\dot{x}_{i+1} = \dot{x}_i \pm \Delta \dot{x} = \dot{x}_i \pm \left| \sqrt{\frac{2|E_{\perp i+1} - U(x_{i+1})|}{m}} - |\dot{x}_i| \right|, \quad (3.2)$$

где  $E_{\perp i+1}$  – новое значение поперечной энергии иона, полученное из распределения Гаусса, в котором старое значение поперечной энергии  $E_{\perp i}$  играет роль среднего,  $\sqrt{\delta E_{\perp i}^2}$  – среднеквадратичного отклонения.

В рамках программы STE система (2.7) решается численно используя схему Рунге-Кутты четвертого порядка точности. Использование схемы Рунге-Кутты для системы уравнений достаточно традиционно при расчетах на ЭВМ. Программа расчета траекторий каналированных ионов STE была написана на объектно-ориентированном языке программирования Object Pascal в программной среде Borland Delphi 7.

Произведем обезразмеривание уравнений и параметров входящих в систему. Обезразмеривание состоит в приведении параметров движения к постоянной решетки кристалла  $d$ . Введем безразмерную глубину  $T = T_1/d$  на которую проникает частица за время  $t$ , где  $T_1 = \varepsilon \cdot \tau$ ,  $\tau = \nu \cdot t$ ,  $\varepsilon^2 = V_{\max}^2 / m \nu^2$  см. раз-  
дел 1.5,  $\varepsilon = \Psi_L / \sqrt{2}$ , где  $\Psi_L = \sqrt{2V_{\max} / m \nu^2}$  см. [17]. Тогда  $T = \varepsilon \cdot \nu \cdot t / d$ . Обезразмерим поперечную координату  $X = x/d$ , а также  $\sigma' = \sigma/d$  – средняя ампли-

туда тепловых колебаний атомов кристалла и  $a' = a/d$  – радиус экранирования Томаса-Ферми. Обезразмерим поперечную скорость

$$v = \frac{dx}{dt} = \frac{dx}{dT_1} \frac{dT_1}{dt} = \varepsilon v \frac{dx}{dT_1} = \varepsilon v \frac{d(X \cdot d)}{d(T \cdot d)} = \varepsilon v \frac{dX}{dT}.$$

Найдем вторую производную по  $x$

$$\frac{d^2 x}{dt^2} = \frac{\varepsilon^2 v^2}{d} \frac{d^2 X}{dT^2},$$

используя выражение  $\varepsilon^2 = V_{\max} / m v^2$  перепишем уравнение движения – первое уравнение системы (2.7)

$$\frac{m \varepsilon^2 v^2}{d} \frac{d^2 X}{dT^2} = - \frac{\partial U}{\partial x},$$

$$\frac{d^2 X}{dT^2} = - \frac{1}{V_{\max}} \frac{\partial U}{\partial X}.$$

Обезразмерим второе уравнение системы (2.7), запишем левую часть

$$\frac{d \overline{\delta E_{\perp}^2}}{dt} = \frac{d \overline{\delta E_{\perp}^2}}{dT_1} \frac{dT_1}{dt} = \varepsilon v \frac{d \overline{\delta E_{\perp}^2}}{dT_1} = \frac{\varepsilon v}{d} \frac{d \overline{\delta E_{\perp}^2}}{dT}$$

далее запишем правую часть

$$\dot{x} \cdot D(x) = (\varepsilon v)^2 \left( \frac{dX}{dT} \right)^2 D(X).$$

Объединим левую и правую часть

$$\frac{\varepsilon v}{d} \frac{d \overline{\delta E_{\perp}^2}}{dT} = (\varepsilon v)^2 \left( \frac{dX}{dT} \right)^2 D(X),$$

$$\frac{d \overline{\delta E_{\perp}^2}}{dT} = \varepsilon v d \left( \frac{dX}{dT} \right)^2 D(X).$$

Тогда после процедуры обезразмеривания систему (3.1) запишем в виде

$$\begin{cases} \frac{d^2 X}{dT^2} = -\frac{1}{V_{\max}} \frac{\partial U}{\partial X} \\ \frac{d \overline{\delta E_{\perp}^2}}{dT} = \varepsilon v d \left( \frac{dX}{dT} \right)^2 D(X) \end{cases} \quad (3.3)$$

Таким же образом обезразмерим выражение (3.2), по которому в программе переопределяется поперечная скорость

$$\dot{x}_{i+1} = \dot{x}_i \pm \Delta \dot{x} = \dot{x}_i \pm \left| \sqrt{\frac{2|E_{\perp i+1} - U(x_{i+1})|}{V_{\max}}} - |\dot{x}_i| \right|.$$

Обезразмерим непрерывный плоскостной потенциал  $U(x)$  (1.10)

$$U(x) = \frac{1}{d^3} \sum_{n_x} \sum_{j=1}^8 V(g_x) \cdot \exp(-\sigma'^2 g_x^2 / 2) \cdot \cos \left[ 2\pi n_x \left( X - x_j \frac{d}{a_x} \right) \right] \quad (3.4)$$

и в случае переходной области ось-плоскость

$$\begin{aligned} U_{sp}(X, T) = & \frac{1}{d^3} \sum_{n_x} \sum_{j=1}^8 V(g_x) \exp \left[ -\sigma'^2 g_x^2 / 2 \right] \cos \left[ 2\pi n_x \left( X - x_j \frac{d}{a_x} \right) \right] \\ & + V(g_{kl}) \exp \left[ -\sigma'^2 g_{kl}^2 / 2 \right] \cos \left[ 2\pi \left( n_x \left( X - x_j \frac{d}{a_x} \right) + T \phi_{kl} / \varepsilon - k \cdot y_j \frac{d}{a_y} - l \cdot z_j \frac{d}{a_z} \right) \right] \end{aligned} \quad (3.5)$$

Запишем также после процедуры обезразмеривания  $\rho_{nucl}(x)$  плотность распределения ядер в плоскостном канале см. (1.31), входящую в ядерный коэффициент диффузии  $D_n(x)$

$$\rho_{nucl}(X) = \frac{1}{d^3} \sum_{n_x} \sum_{j=1}^8 \exp \left[ -\frac{\sigma'^2 g_x^2}{2} \right] \cos \left[ 2\pi n_x \left( X - x_j \frac{d}{a_x} \right) \right] \quad (3.6)$$

и  $\rho_{el}(x)$  плотность распределения электронов в плоскостном канале см. (1.33), входящую в электронный коэффициент диффузии  $D_{el}(x)$

$$\rho_{el}(x) = \frac{1}{d^3} \sum_{n_x} \sum_{j=1}^8 F(g_x^2) \exp \left[ -\frac{\sigma'^2 g_x^2}{2} \right] \cos \left[ 2\pi n_x \left( X - x_j \frac{d}{a_x} \right) \right] \quad (3.7)$$

Таким образом введением безразмерных переменных вместо динамических переменных, входящих в дифференциальные уравнения движения обеспечивалась точность численного расчёта в программе STE. Эта процедура проводилась таким образом, чтобы характерные интервалы изменения динамических переменных были порядка единицы. Кроме того, число членов разложения в ряд Фурье для потенциала и коэффициента диффузии подбиралось таким образом, чтобы вид указанных функций, а также первой и второй производных потенциала не зависели от данного числа. И длина шага решения выбиралась так, чтобы для частицы выполнялся закон сохранения энергии в отсутствии многократного рассеяния.

### **3.2 Основные модули и возможности программы STE**

На данный момент с помощью программы (модели) STE можно моделировать процессы возникающие при прохождении заряженных частиц сквозь кристалл. Частицы могут быть как положительно так и отрицательно заряженные (протоны, антипротоны). Программа позволяет вести расчет для трех плоскостных каналов (100), (110), (111) и рассматривать потенциал изолированного атома и электронную плотность в случае аппроксимаций Мольер и Дойля-Тернера. Среди наиболее важных результатов, которые можно получить с помощью программы STE, это: траектории в фазовом пространстве, плотность распределения в канале по поперечной энергии, спектры потерь энергии, выходы частиц. Программой предусмотрены возможности счета для кристаллов большой толщины и автоматическим сохранением насчитанных данных. Программа STE имеет широкие возможности по варьированию начальных параметров и подстройки программы под конкретный обсмчитываемый эксперимент.

Программа написана на языке Object Pascal в программной среде Borland Delphi 7. Программа состоит из следующих основных модулей (блоков), см. Таблицу 3.1:

№ п/п	Название	Описание
1	STETraject	Главный модуль
2	STEaddTrj	Модуль добавления траекторий
3	STEOptions	Модуль основных параметров
4	OurPlotting	Модуль построения графиков
5	Constants	Модуль определения постоянных величин
6	Solver	Модуль расчета траекторий частиц

Таблица 3.1. Основные модули программы STE

В главном модуле (рис.1) пользователю предлагается определить кристалл кремния или германия, плоскостное направление, задать заряд частицы  $Z_1$ , ее энергию  $E$  и атомную массу  $M_1$ . Также здесь задаются основные параметры расчета траекторий, среди которых количество членов разложения  $n_x$  в ряд Фурье для потенциала и коэффициента диффузии, толщина рассматриваемого кристалла, задается количество узлов для решаемых уравнений. Также имеется возможность задавать значения  $\Delta\theta$ ,  $k$  и  $l$  при использовании потенциала переходной области ось-плоскость. На главное окно выводится значение  $\varepsilon$ , которое вычисляется следующим образом

$$\varepsilon = \sqrt{\frac{V_{\max}}{E + M_1 m_0 c^2 / (1 + M_1 m_0 c^2 / E)}},$$

где  $m_0 c^2 = 931,5$  МэВ,  $[M_1] = a.e.m.$

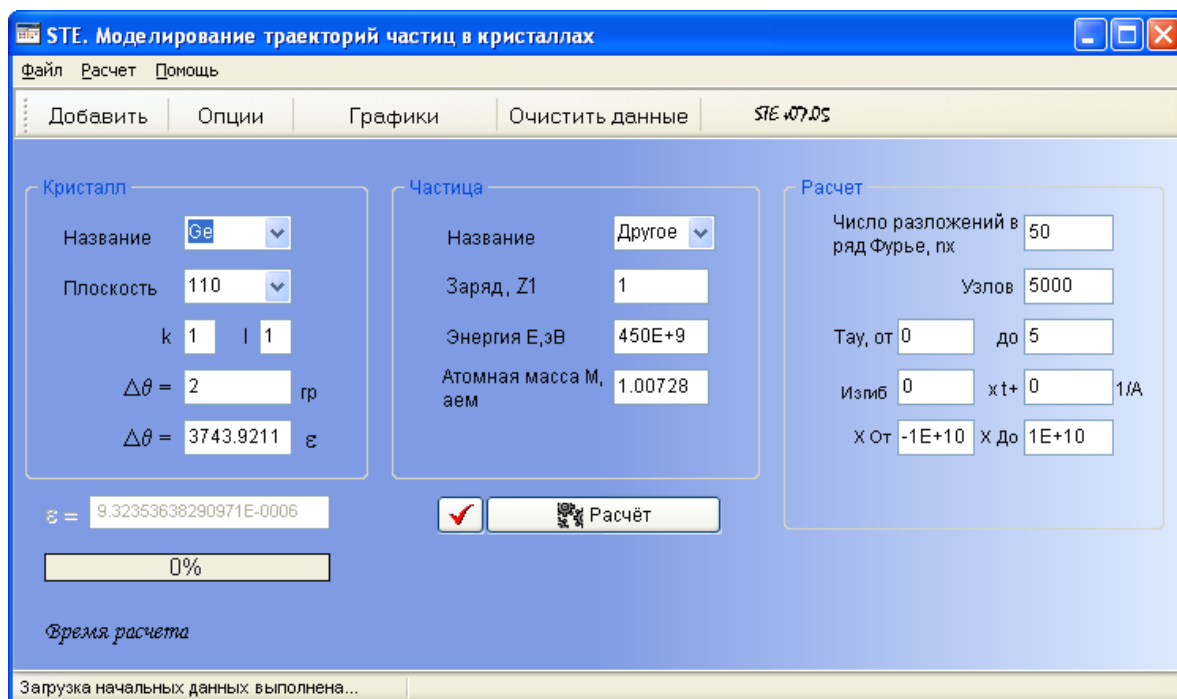


Рис. 3.1. Главное окно программы STE

В модуле определения постоянных величин определяются потенциал кристалла и коэффициенты диффузии. Также определяются переменные используемые в других модулях.

В модуле добавления траекторий для расчета (рис. 3.2) задаются количество частиц, диапазон точек и углов влёта частиц, а также задается начальное распределение по углам влёта по нормальному закону или равномерное распределение.

В модуле основных параметров (рис. 3.3) задаются условия применения многократного рассеяния, параметры  $T_{\min}$  и порог значений среднего квадрата флуктуаций  $\overline{\delta E_{\perp}^2}$  при превышении которого переопределяется поперечная координата частицы. Задаются также аппроксимации потенциала отдельного атома в приближении Мольера или Дойля-Тернера, условия применения моделей деканализирования, параметры автоматического расчета и сохранения данных.

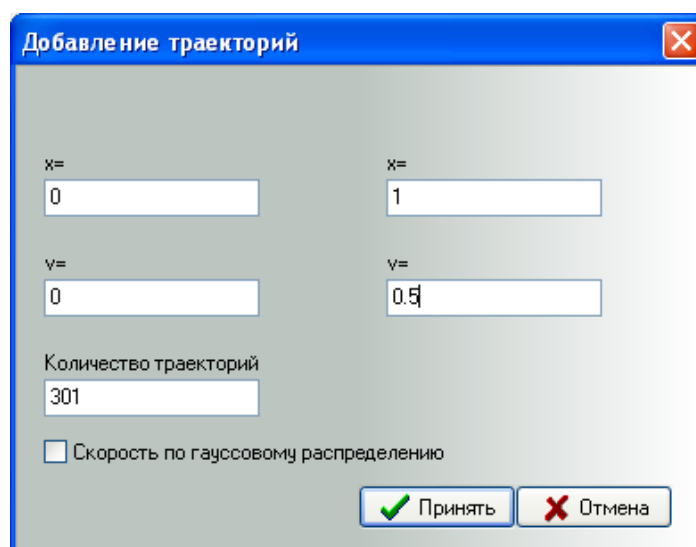


Рис. 3.2. Модуль добавления траекторий к расчету

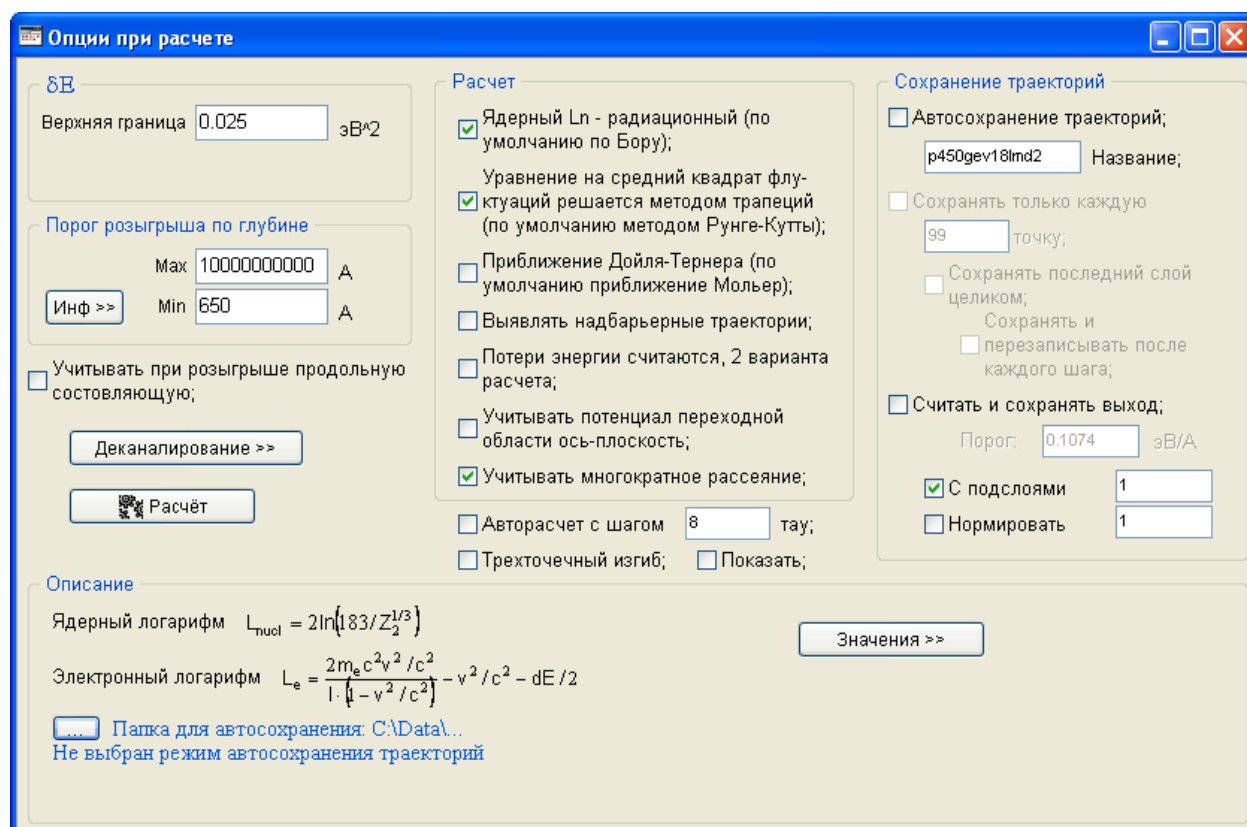


Рис. 3.3. Модуль основных параметров

В модуле расчёта траекторий реализован процесс пошагового расчёта значений параметров движения частицы. Среди основных это поперечная коор-

динаты и угол частицы, а также значения среднего квадрата флуктуаций поперечной энергии.

В модуле построения траекторий частиц (рис. 3.4, рис. 3.5) можно строить 20 различных графиков, которые разбиты на 4 основные группы: кристалл, траектории, распределения и потери энергии.

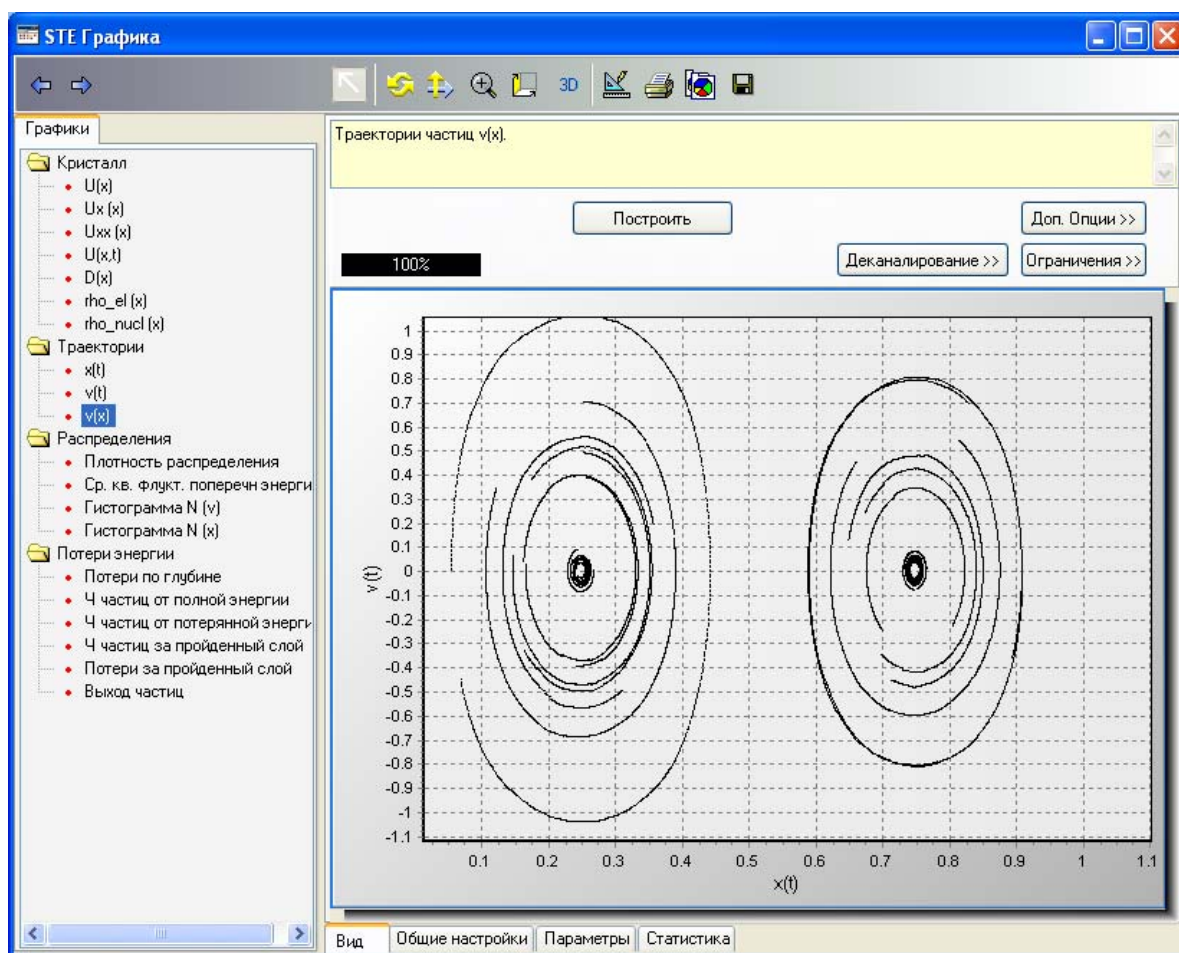


Рис. 3.4. Модуль построения траекторий частиц

В группу кристалл объединены следующие графики: потенциал кристалла, первая и вторая производные от потенциала кристалла, коэффициент диффузии, плотность распределения ядер  $\rho_{nucl}(x)$  и плотность распределения электронов  $\rho_{el}(x)$  в плоскостном канале. В группу траектории: траектории частиц, траектории частиц в фазовом пространстве поперечных координат и скоростей.



В группу распределения входят: плотность распределения частиц в канале по поперечной энергии, средний квадрат флуктуаций поперечной энергии частиц, гистограммы распределения частиц по поперечной координате и скорости. В группу потери энергии: графики изменения потерь энергии и полной энергии частицы от глубины, число частиц по потерям энергии и график выхода частиц. Многие из перечисленных графиков можно строить для конкретной задаваемой глубины. Графики можно приближать, вращать (для трехмерных), распечатывать, копировать в буфер обмена данных, и сохранять в виде графического файла или файла данных по точкам. Предлагаются широкие возможности по настройке параметров отображения перечисленных графиков.

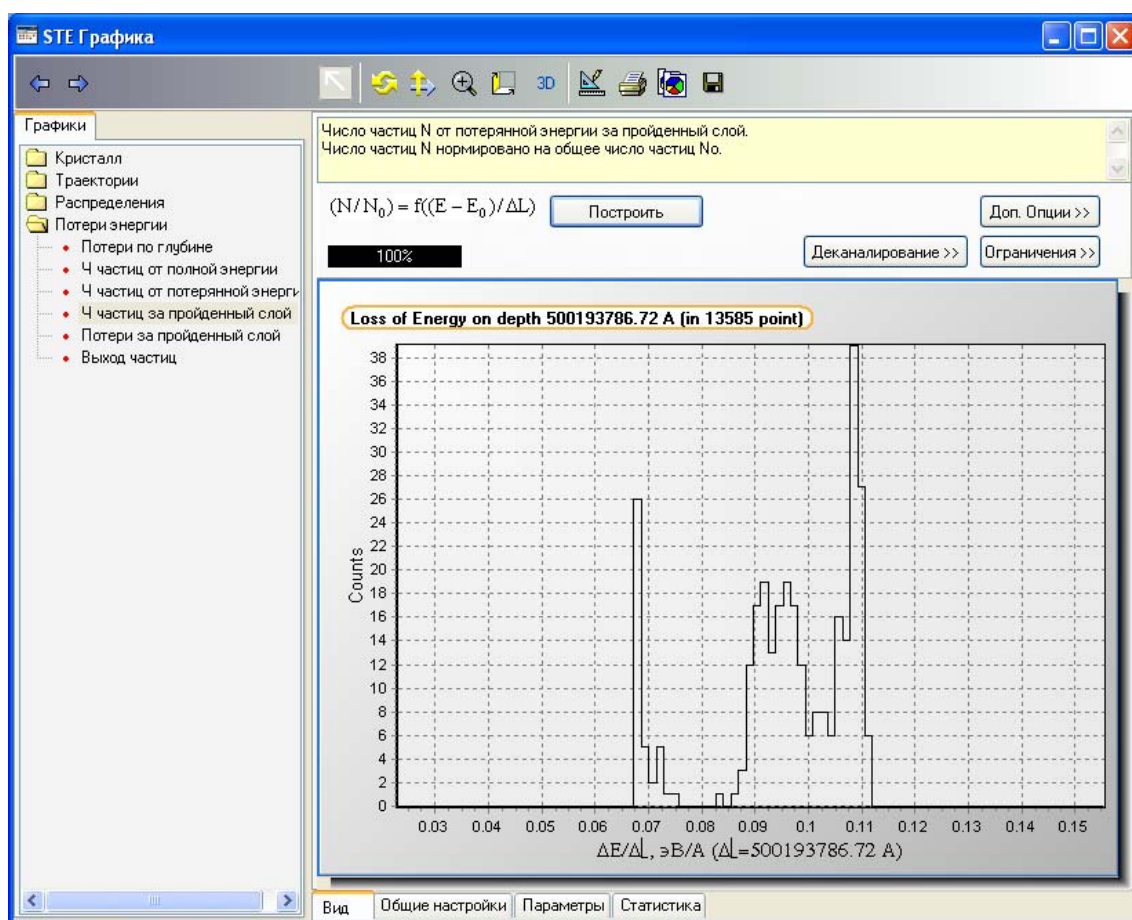


Рис. 3.5. Модуль построения траекторий частиц

### 3.3 Дополнительные модули программы STE

Описание дополнительных модулей (блоков) представлено в виде таблицы 3.2.

№ п/п	Название	Описание
1	AboutFiles	Информация о загруженном файле с данными
2	AboutProgram	Информация о программе
3	AdvOptToOurPlot	Дополнительные опции к модулю графики (рис. 3.6)
4	DialogToSave	Диалог сохранения данных в файл
5	Limit	Установка ограничений на вывод траекторий по поперечной координате или скорости (рис. 3.7)
6	ModelDechan	Выбор модели деканализирования, по расстоянию наибольшего сближения или по потерям энергии
7	SpecialLoadFails	Специальная загрузка больших по объему данных файлов
8	ThreePointBending	Характерные параметры для трехточечного изгиба кристалла
9	ValueLog	Численные значения потенциала и коэффициентов диффузии
10	NormalDistribution	Модуль установки Гауссового распределения
11	Plotting	Модуль расчета потерь энергии

Таблица 3.2. Дополнительные модули программы STE

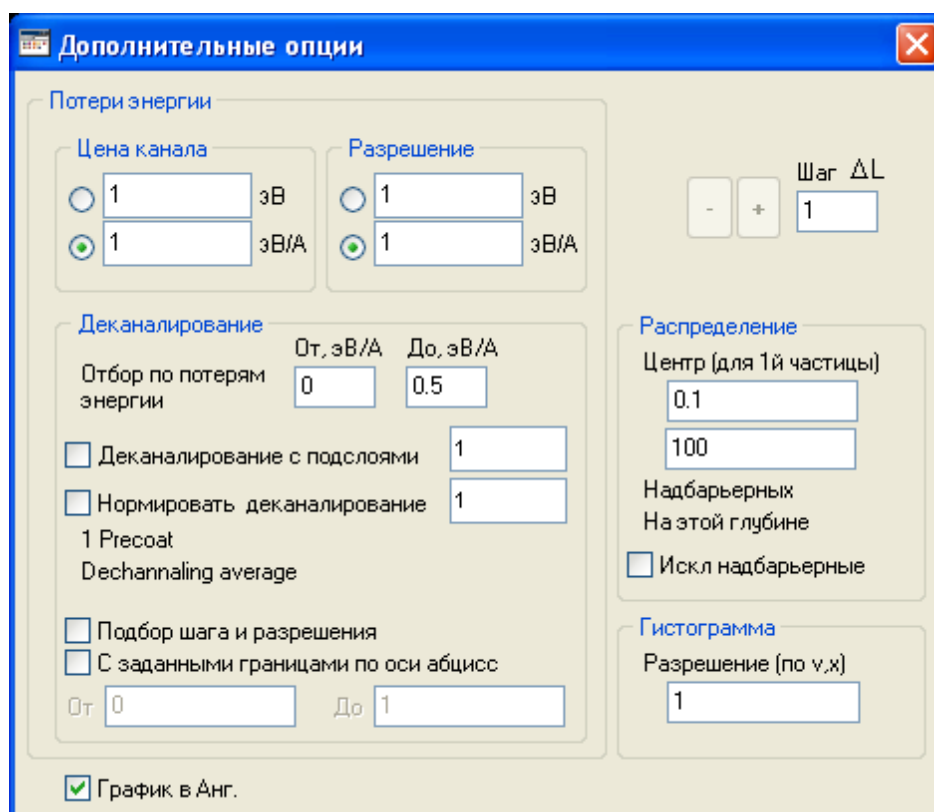


Рис. 3.6. Модуль дополнительных опций к модулю графики

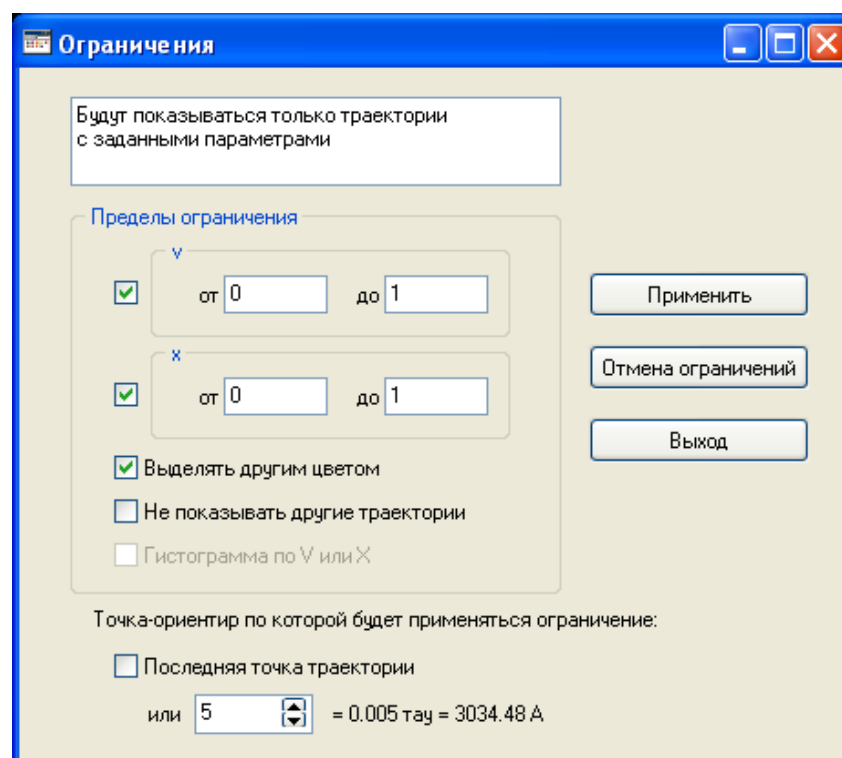


Рис. 3.7. Модуль установки ограничений на вывод траекторий частиц

### 3.4 Модели деканализирования в программе STE

В программе STE реализовано 2 модели деканализирования:

1. По расстоянию наибольшего сближения [62,63].

Модель реализована впервые. С помощью уравнения (1.19) можно произвести линейный анализ устойчивости движения каналированных частиц в окрестности классической траектории

$$m\delta\ddot{x} + \bar{U}_{xx}(\bar{x})\delta x = \delta f_x(\bar{x}). \quad (3.8)$$

Коэффициент  $\bar{U}_{xx}(\bar{x})$  на небольших временных отрезках допустимо рассматривать как не зависящую от времени величину. Решение уравнения будем искать в следующем виде

$$\delta x = A \cdot \exp(pt).$$

Тогда получим характеристическое уравнение

$$mp^2 + \bar{U}_{xx}(\bar{x}_0) = 0. \quad (3.9)$$

Легко видеть, что в зависимости от знака  $\bar{U}_{xx}(\bar{x}_0)$  реализуются либо устойчивые, либо неустойчивые решения уравнения (3.8). Точка перегиба графика функции потенциальной энергии находится из уравнения  $\bar{U}_{xx}(\bar{x}_c) = 0$ . Точка  $\bar{x}_c$  определяет положение максимума напряженности электрического поля атомной плоскости и разделяет области стохастически устойчивого и неустойчивого движения каналированных частиц. По порядку величины  $\bar{x}_c$  совпадает со значением расстояния наибольшего сближения каналированных положительно заряженных частиц с атомной плоскостью. Таким образом, имеет место катастрофическое влияние знака заряда на характер движения быстрых заряженных частиц в плоскостных каналах кристалла. Найдем, решение системы

(1.28) для каналированных частиц в случае, когда коэффициенты уравнения (1.28) остаются постоянными величинами вдоль траектории частицы

$$\bar{U}_{xx}[\bar{x}(t)] \simeq \bar{U}_{xx}(\bar{x}_0); \quad D[\bar{x}(t)] \simeq D(\bar{x}_0).$$

Закон изменения со временем среднего квадрата флуктуаций поперечной скорости имеет вид

$$\overline{\delta \dot{x}^2} = \left( D(\bar{x}_0) t / m^2 \right) \cdot \left( 1 + sh(2pt) / 2pt \right),$$

где  $sh(2pt) = [\exp(2pt) - \exp(-2pt)] / 2$ ;  $p = \left( -\bar{U}_{xx}(\bar{x}_0) / m \right)^{1/2}$  – корень характеристического уравнения (3.9).

Экспоненциальный рост среднего квадрата флуктуаций поперечной скорости наблюдается для тех участков траектории каналированных частиц, для которых

$$\bar{U}_{xx}[\bar{x}_0] < 0. \quad (3.10)$$

На рис. 3.8 изображена вторая производная от непрерывного потенциала  $\bar{U}_{xx}(x)$  положительно заряженной частицы, видно, что области, при которых выполняется (3.10) расположены вблизи атомных плоскостей, что по смыслу и понятно. Неравенство (3.10) определяет область стохастической неустойчивости поперечного движения каналированных частиц, так как величина среднего квадрата флуктуаций является мерой разбегания траекторий, в данной области частица деканализируется.

В случае каналирования отрицательно заряженных частиц условие (3.10) меняет знак

$$\bar{U}_{xx}[\bar{x}_0] > 0.$$

2. Модель по потерям энергии. Отбор каналированных частиц выполняется по потерям энергии. Рассчитываются потери энергии, для чего кристалл

разбивается на одинаковые слои, для каждой частицы рассчитывается разница энергии в начале и конце каждого слоя и делится на длину слоя. Если частица имеет потери энергии меньше порогового значения, то она считается каналированной. Пороговое значение потерь энергии принимается равным 0,95 от потерь энергии частиц в разориентированном кристалле, так как не учитывался разброс потерь энергии. Пример графиков потерь энергии можно увидеть в параграфе 4.1 (рис. 4.3 и рис. 4.5)

В модели по потерям энергии выход строится как зависимость числа деканализированных частиц от глубины проникновения с заданным разрешением по глубине, которое не может быть меньше толщины подслоя

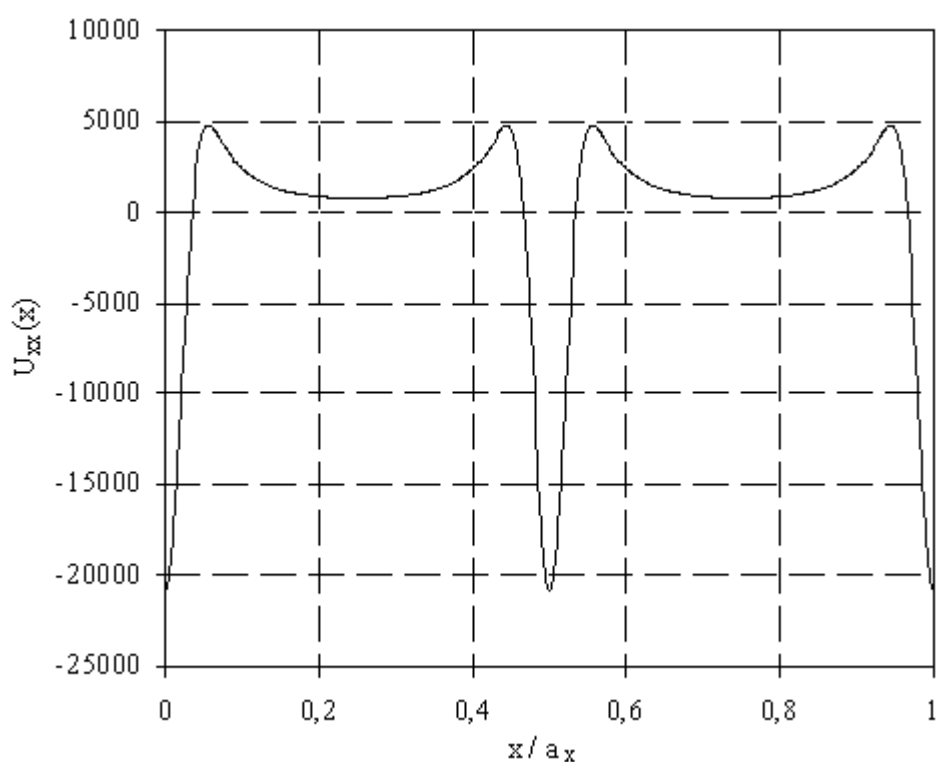


Рис. 3.8. Вторая производная от непрерывного потенциала  $\bar{U}_{xx}(x)$

## **ГЛАВА 4. КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ КАНАЛИРОВАНИЯ ЧАСТИЦ**

В данной главе приводятся расчеты по компьютерной программе STE, напомним основные положения, используемые при расчете в математической модели. Ядерный коэффициент диффузии вычислялся в приближении Китагавы-Оцуки [51], см. (1.30), а электронный коэффициент диффузии вычислялся в приближении локальной электронной плотности [6], см (1.32). Непрерывный потенциал и коэффициент диффузии были разложены в периодический ряд Фурье с учетом структурного фактора. Фурье-компоненты потенциала атома и электронной плотности брались в приближении Мольер, см. (1.4) и (1.34). Потери энергии каналированных частиц вычислялись вдоль каждой траектории с помощью формулы Бете-Блоха с учетом правила равномерного распределения Линдхарда [6], эффекта плотности и релятивистских поправок в кулоновском логарифме, см (1.61).

Отбор каналированных частиц выполняется в разных случаях по различным моделям деканалирования.

### **4.1 Сравнение результатов расчетов по программе STE с другими программами**

В работах [45,46] были проведены совместные компьютерные расчеты по программе STE, и по программам [72], в которых моделирование происходило в фазовом пространстве поперечных координат и скоростей, PST и SM. В программе PST за основу берется решение системы уравнений, описывающих эво-

люцию средних квадратов флуктуаций поперечной координаты и скорости. В программе SM многократное рассеяние учитывается в рамках стандартной модели, согласно которой скорость приращения среднего квадрата угла многократного рассеяния на единице длины пути пропорциональна плотности распределения атомных электронов и ядер в той точке пространства, где находится каналированная частица. Практически компьютерная программа SM отличается от PST тем, что в решаемой системе уравнений вторая производная от непрерывного потенциала положена равной нулю.

В работе [31] сообщалось о значительном уменьшении числа деканализованных протонов из осевых и плоскостных каналов кристаллов кремния и германия в диапазоне энергии от 2 до 15 ГэВ. На рис. 4.1 и рис. 4.2 представлены графики относительного выхода протонов с энергией 15 и 250 ГэВ в плоскостном (100) канале кристалла германия из работы [46]. Результаты были получены для пучка из 301 протона. Начальные точки влета были равномерно распределены в пределах плоскостного канала, угол влет был равен нулю, расходимость пучка не учитывалась. Расстояние  $T_{\min}=0,02$  мкм для протонов с энергией 15 ГэВ и  $T_{\min}=0,06$  мкм – с энергией 250 ГэВ. Из представленных графиков видно, что относительные выходы, полученные по программам STE и PST совпадают между собой. Деканализирование релятивистских протонов оказывается незначительным, в то время как расчет по программе SM демонстрирует значительный рост числа деканализованных протонов, что не наблюдалось в эксперименте [31].

В работе [45] были получены результаты по выходам ионов гелия в плоскостном канале (110) кристалла кремния с энергией 14 МэВ и 14 ГэВ. В работе брался пучок частиц из 301 иона гелия. Начальное распределение частиц по поперечной координате было равномерным в пределах двух плоскостных кана-



лов, угол влета брался равным нулю, расходимость пучка не учитывалась. Расстояние  $T_{\min}=10$  нм для ионов с энергией 14 МэВ и  $T_{\min}=20$  нм – с энергией 14 ГэВ. Для отбора каналированных частиц использовалась модель деканалирования по потерям энергии. Пороговое значение потерь энергии в данном случае определялось с помощью компьютерной программы SRIM [15] (программа для расчета длин пробега и потерь энергии частиц в веществе). На рис. 4.3 и рис.4.5 представлены графики расчета средней скорости потерь энергии ионов гелия с энергией 14 МэВ, с разрешением по энергии 1 КэВ/мкм и 14 ГэВ, с разрешением по энергии 0,03 КэВ/мкм. На данных графиках можно выделить два пика: левый связанный с каналированными частицами и правый связанный с деканалированными частицами. На рис. 4.4 представлены графики выхода ионов гелия с энергий 14 МэВ, в целом наблюдается согласие расчетов по трем программам (рис. 4.4). При энергии ионов 14 ГэВ график выхода (рис. 4.6) по программе SM проходит выше, чем по STE и PST, по которым наблюдается значительное уменьшение числа деканалированных релятивистских ионов гелия, что хорошо согласуется с результатами экспериментальной работы [31].

Таким образом, в широком диапазоне энергий наблюдается согласие между двумя независимыми программами STE и PST, поскольку функции распределения частиц в тонком кристалле в пространстве поперечных энергий и пространстве поперечных координат и скоростей связаны между собой. Данный факт позволяет говорить о достоверности и обоснованности получаемых по программе STE результатов.

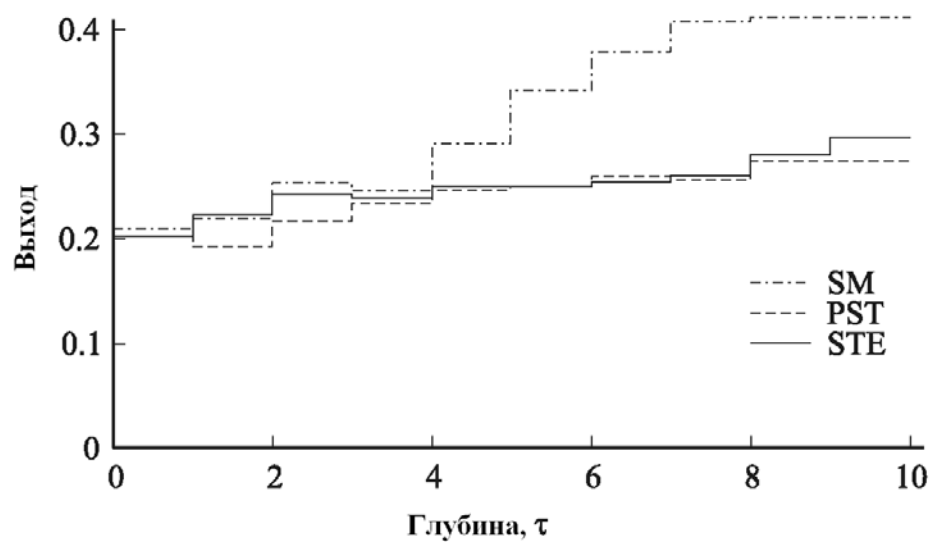


Рис. 4.1. Графики относительного выхода релятивистских протонов с энергией 15 ГэВ, деканилированных из (100) плоскостного канала кристалла германия

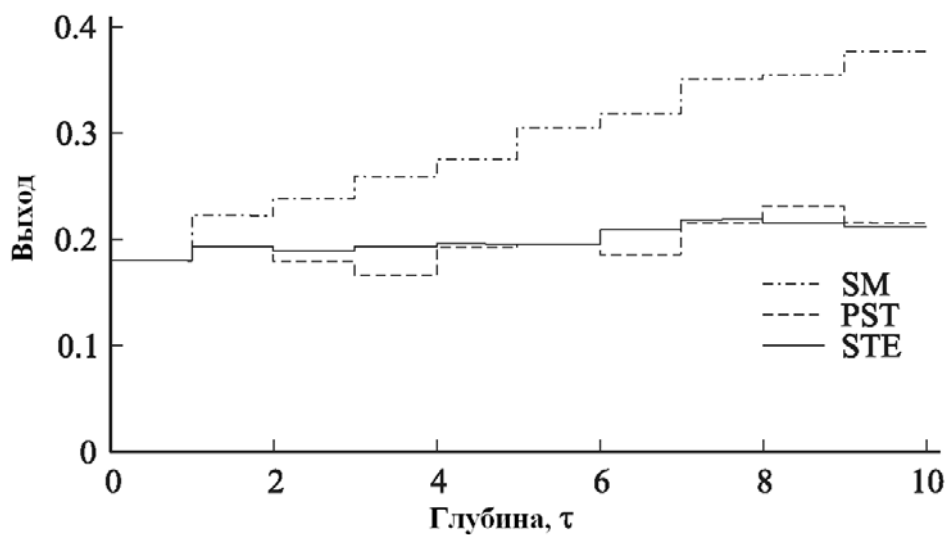


Рис. 4.2. Графики относительного выхода релятивистских протонов с энергией 250 ГэВ, деканилированных из (100) плоскостного канала кристалла германия

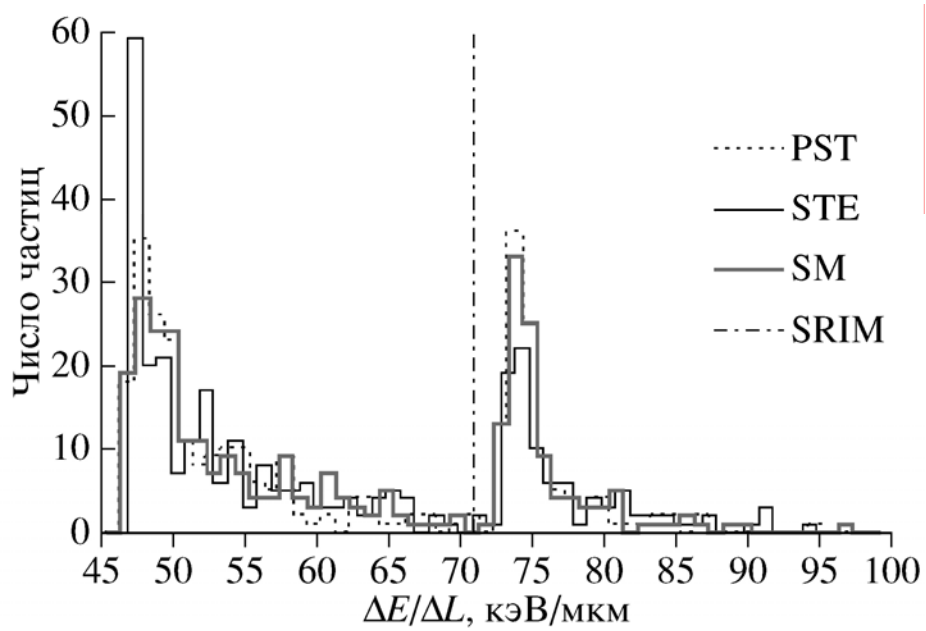


Рис. 4.3. Графики средней скорости потерь энергии ионами гелия с энергией 14 МэВ

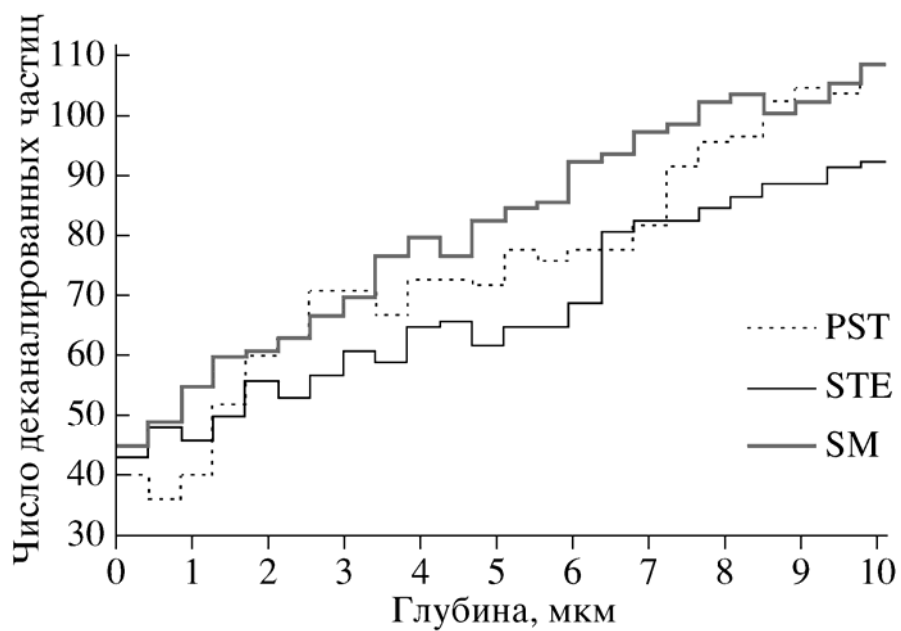


Рис. 4.4. Графики выхода ионов гелия с энергией 14 МэВ

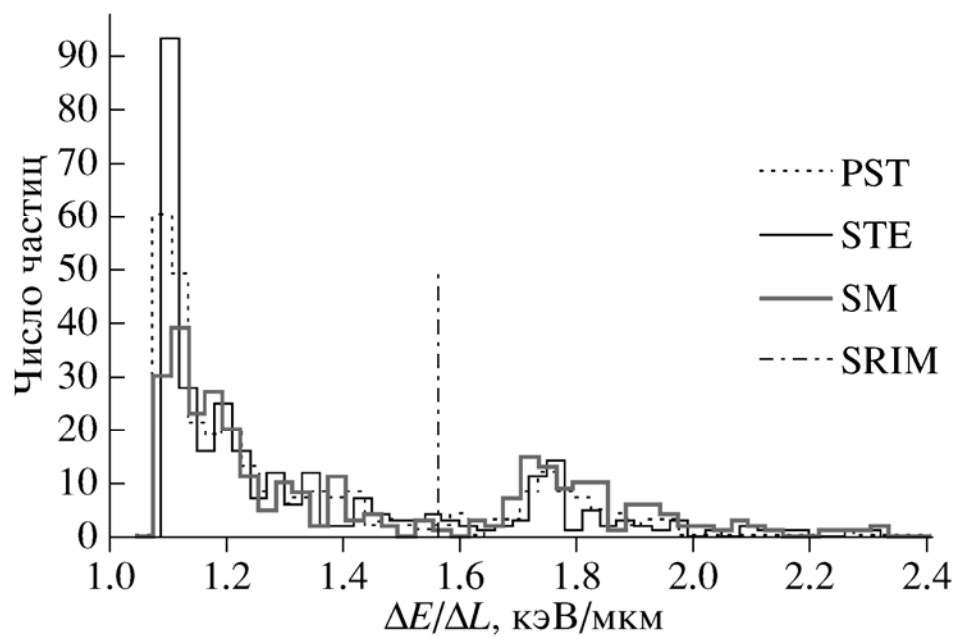


Рис. 4.5. Графики средней скорости потерь энергии ионами гелия с энергией 14 ГэВ

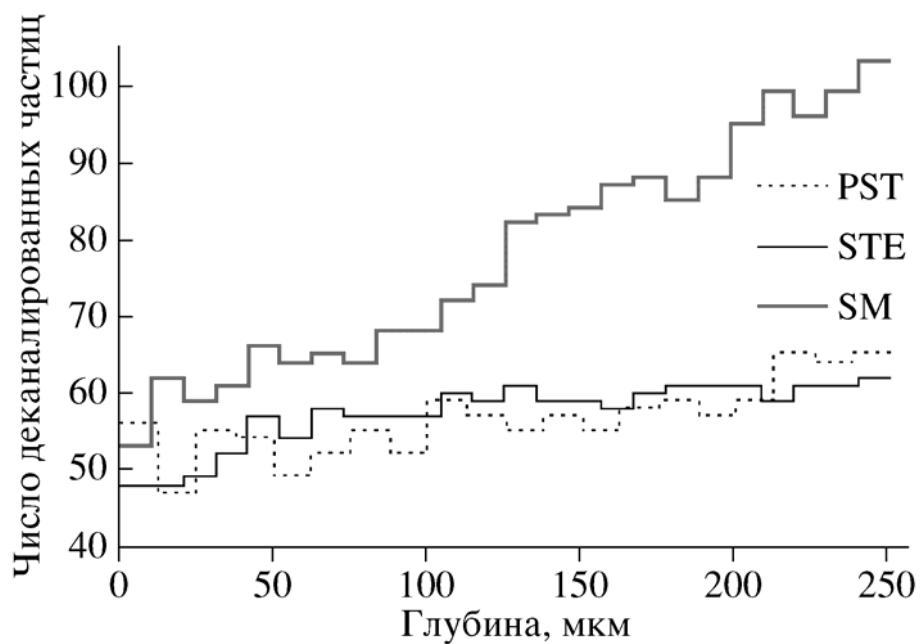


Рис. 4.6. Графики выхода ионов гелия с энергией 14 ГэВ

## 4.2 Потери энергии ионов свинца в кристалле кремния

Большой интерес представляют ориентационные эффекты в тонких кристаллах для релятивистских ионов. В толстых кристаллах применяют метод компьютерного моделирования траекторий каналированных частиц. Вызывают интерес работы связанные с высокоэнергетическими высокоинтенсивными пучками адронов (<http://care-hhh.web.cern.ch>), были выполнены эксперименты по прохождению [73], по повороту ионов свинца [74], а также планируются новые. Было проведено компьютерное моделирование потерь энергии релятивистских ионов свинца в (111) и (110) плоскостных каналах кристалла кремния.

Представленные результаты были получены для пучка из 1000 ионов свинца с атомной массой 207.5 а.е.м. и энергией 33.2 ТэВ при каналировании в 0.3 мм кристалле. Пучок ионов имел угловую расходимость в соответствии с гауссовым распределением и равномерно падал на кристалл в пределах 4 плоскостных каналов.

На рис. 4.7 изображены потери энергии в плоскости (111) с начальной расходимостью 50 мкрад для 5-и случаев: экспериментальная кривая [73, с.4] (кривая 1), по программе PST (кривая 4), по программе STE (кривая 5), по программе SM (кривая 3) и без учета многократного рассеяния (кривая 2). Стоит отметить, что исследование потерь энергии в плоскости (110) приводит к результатам подобным для плоскости (111), а именно к тому, что учет влияния многократного рассеяния не дает никакого эффекта.

На рис. 4.8 изображены потери энергии в плоскости (111) для 3-х случаев: экспериментальная кривая с расходимостью 50 мкрад [73, с.4] (кривая 1), без учета многократного рассеяния с расходимостью 50 мкрад (кривая 2) и без учета многократного рассеяния с расходимостью 25 мкрад (кривая 3).

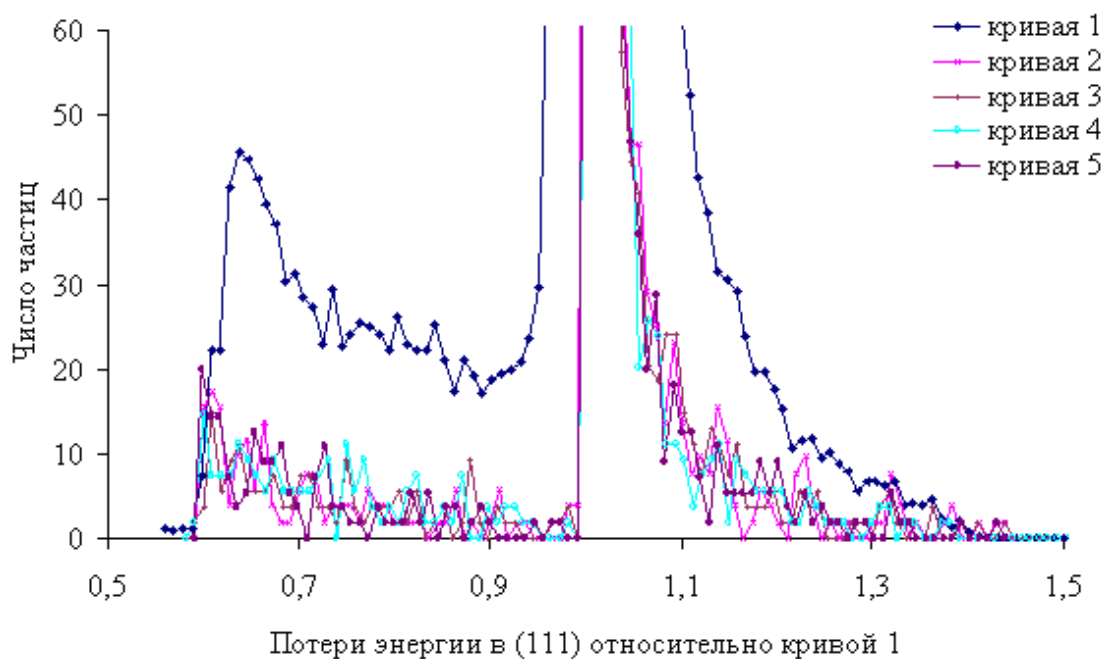


Рис. 4.7. Потери энергии в плоскости (111) с начальной расходимостью 50 мкрад. Экспериментальная кривая – кривая 1, расчет по программам STE кривая 5, PST – кривая 4, SM – кривая 3, без учета многократного рассеяния – кривая 2

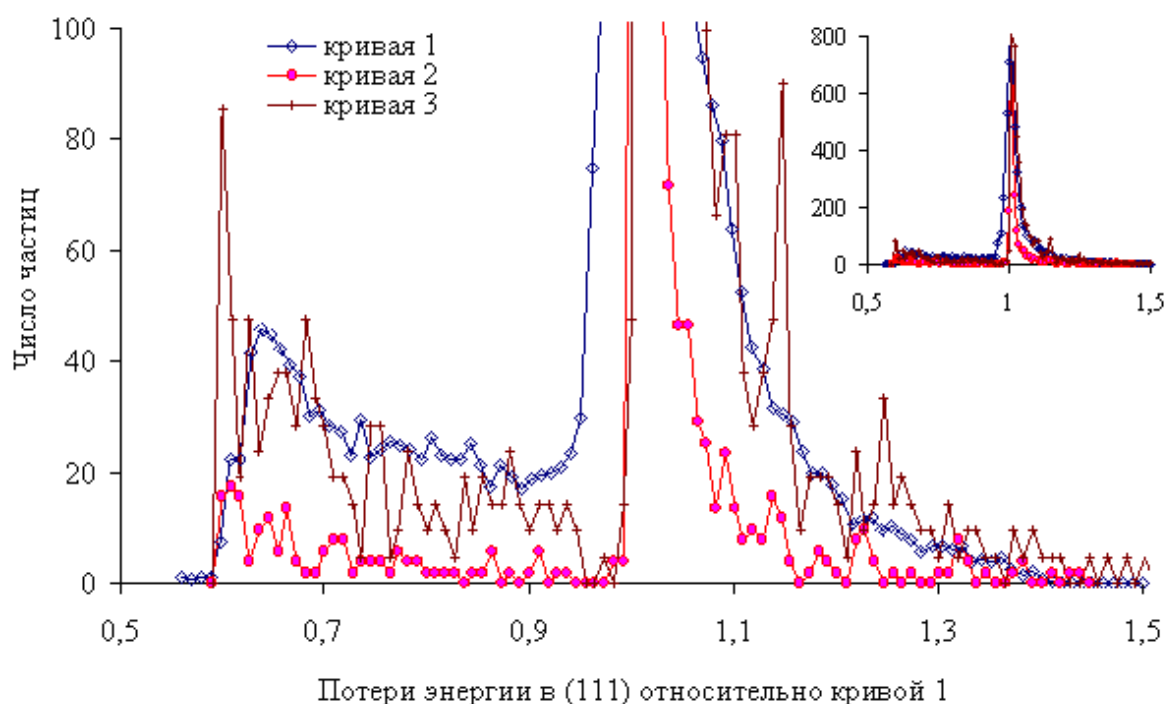


Рис. 4.8. Потери энергии в плоскости (111), с различной расходимостью. Экспериментальная кривая с расходимостью 50 мкрад – кривая 1, без учета многократного рассеяния с расходимостью 50 мкрад – кривая 2, без учета многократного рассеяния с расходимостью 25 мкрад – кривая 3

На рис. 4.9 изображены потери энергии в плоскости (110) для 3-х случаев: экспериментальная кривая с расходимостью 50 мкрад [73, с.3] (кривая 1), без учета многократного рассеяния с расходимостью 50 мкрад (кривая 2) и без учета многократного рассеяния с расходимостью 25 мкрад (кривая 3).

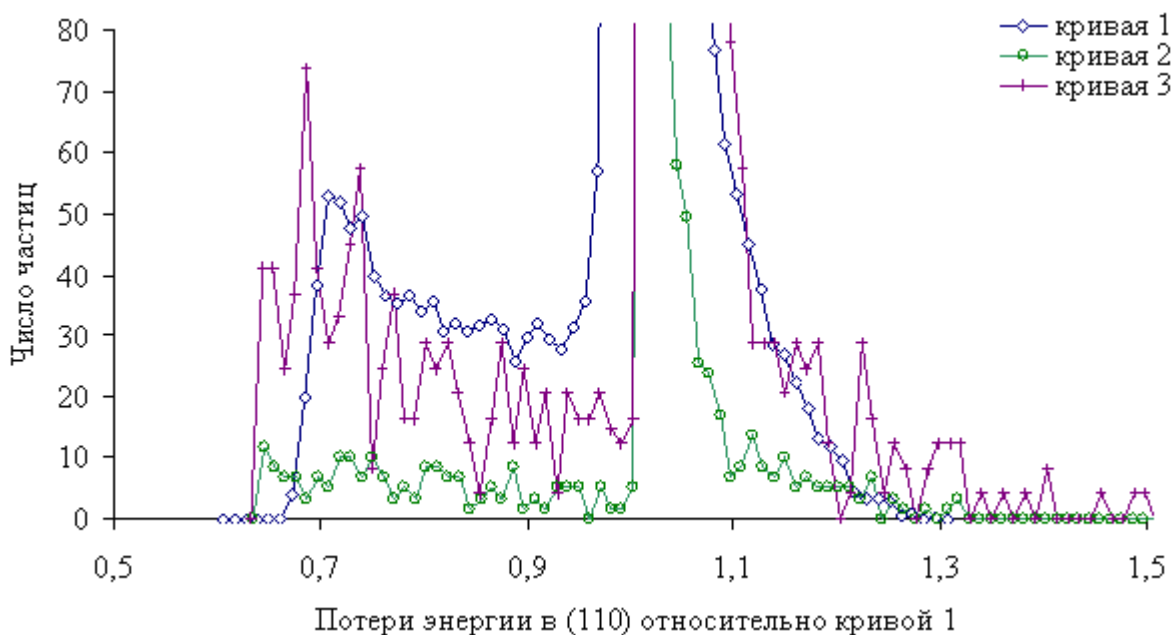


Рис. 4.9. Потери энергии в плоскости (110), с различной расходимостью. Экспериментальная кривая с расходимостью 50 мкрад – кривая 1, без учета многократного рассеяния с расходимостью 50 мкрад – кривая 2, без учета многократного рассеяния с расходимостью 25 мкрад – кривая 3

Полученные графики потерь энергии рис. 4.7-4.9 приведены относительно экспериментальных кривых [73]. Ширина правого пика в спектре потерь энергии рассчитанного по различным компьютерным программам меньше, чем у экспериментальных кривых, по-видимому, это связано с тем, что в программе STE и программах из [72] PST и SM не учитывался разброс по потерям энергии. Из полученных результатов следует, что учет многократного рассеяния по трем различным моделям не влияет на результат (видно, из рис. 4.7), то есть кри-

сталл является достаточно тонким и что форма спектра определяется расходимостью пучка (видно, из рис. 4.8, 4.9). По-видимому, также расходимость пучка в [73], исходя из спектра потерь энергии, не является гауссовой. Отметим, еще тот факт, что в проведенном компьютерном моделировании наблюдается зависимость ширины спектра от расходимости пучка.

### **4.3 Расчет эффективности отклонения протонов с энергией 200 и 450 ГэВ в изогнутом кристалле германия**

Как было сказано вначале, исследования отклонения пучков релятивистских частиц изогнутыми кристаллами являются актуальными на протяжении длительного времени. Вопросам применения изогнутых кристаллов при прохождении частиц в кристаллах посвящены различные работы [66,67,68,69,70]. В ЦЕРН в 90х годах были получены результаты по отклонению протонов с энергией 200 и 450 ГэВ кристаллом германия [30]. Была обнаружена высокая эффективность отклонения протонов кристаллом германия. Для изгиба кристалла применялось трёхточечное изгибное устройство (рис. 4.10), позволяющее менять кривизну или радиус изгиба и, тем самым, изменять угол поворота каналированных частиц. Размеры пластинки кристалла  $1 \times 10 \times 50$  мм, расстояние от начала кристалла до первого прижима 1 см, расстояние между прижимами 1,5 см.

Изгиб кристалла учитывался введением дополнительной центробежной силы, заставляющей частицу двигаться вдоль изогнутого канала. С этой целью использовался эффективный потенциал кристалла

$$U_{эф}(x) = U(x) + p v x k ,$$



где  $k = 1/R$  – кривизна кристалла;  $R$  – радиус изгиба плоскостей кристалла;  $U(x)$  – потенциал прямого кристалла;  $p$  – импульс частицы.

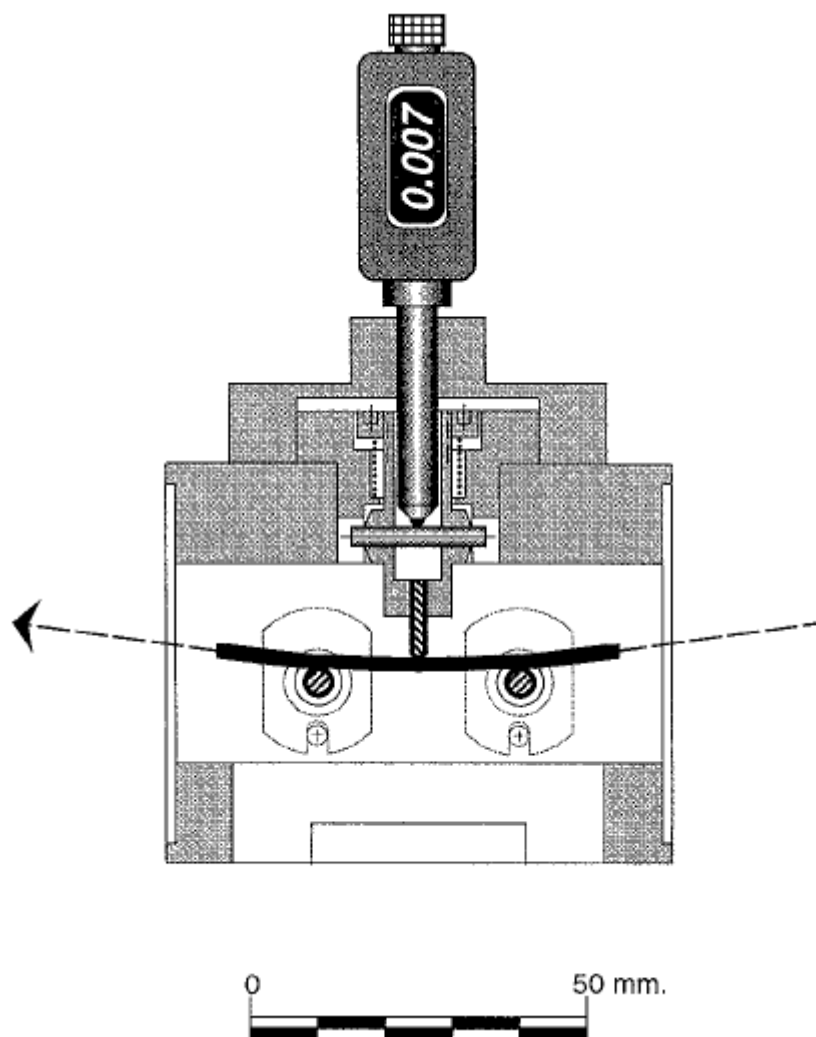


Рис. 4.10. Трехточечное изгибное устройство [30]

В случае трехточечного изгиба в пластинке кристалла можно выделить 4 участка: 1 участок, от начала до первого прижима, 2 – между первым и вторым прижимами, 3 – между вторым и третьим прижимами, 4 – от третьего прижима до конца кристалла. На 1 и 4 участках кривизна  $k = 0$ , на 2 участке кривизна линейно увеличивается, на 3 участке кривизна линейно уменьшается. На этих участках кривизна кристалла изменяется по следующему уравнению [71]

$$k(t) = k_t \cdot t + k_0.$$

В таком случае уравнение движения будет иметь вид

$$m\ddot{x} = -\frac{\partial U}{\partial x} + p\nu k(t).$$

Аналогично тому, как это делалось в параграфе 3.1 обезразмерим последнее уравнение

$$\frac{d^2 X}{dT^2} = -\frac{1}{V_{\max}} \frac{\partial U}{\partial X} + \frac{d}{\varepsilon^2} k(T).$$

Для расчета моделирования движения протонов с энергиями 200 и 450 ГэВ в изогнутом кристалле германия были рассчитаны параметры изгиба кристалла, см. таблицу 4.1.

№ п/п	Угол изгиба, мрад	1 и 4 участок		2 участок		3 участок	
		$k_t$	$k_0$	$k_t$	$k_0$	$k_t$	$k_0$
протоны с энергией 200 ГэВ							
1	2,07	0	0	$1,094 \cdot 10^{-3}$	$-9,32 \cdot 10^{-12}$	$-1,097 \cdot 10^{-3}$	$3,738 \cdot 10^{-11}$
2	4,88	0	0	$2,553 \cdot 10^{-3}$	$-2,175 \cdot 10^{-11}$	$-2,56 \cdot 10^{-3}$	$8,722 \cdot 10^{-11}$
3	7,37	0	0	$3,855 \cdot 10^{-3}$	$-3,284 \cdot 10^{-11}$	$-3,866 \cdot 10^{-3}$	$1,317 \cdot 10^{-10}$
4	8,7	0	0	$4,533 \cdot 10^{-3}$	$-3,861 \cdot 10^{-11}$	$-4,546 \cdot 10^{-3}$	$1,549 \cdot 10^{-10}$
5	10,25	0	0	$5,314 \cdot 10^{-3}$	$-4,527 \cdot 10^{-11}$	$-5,329 \cdot 10^{-3}$	$1,816 \cdot 10^{-10}$
6	12,88	0	0	$6,721 \cdot 10^{-3}$	$-5,726 \cdot 10^{-11}$	$-6,739 \cdot 10^{-3}$	$2,297 \cdot 10^{-10}$
7	14,32	0	0	$7,451 \cdot 10^{-3}$	$-6,347 \cdot 10^{-11}$	$-7,471 \cdot 10^{-3}$	$2,546 \cdot 10^{-10}$
8	16,7	0	0	$8,701 \cdot 10^{-3}$	$-7,412 \cdot 10^{-11}$	$-8,725 \cdot 10^{-3}$	$2,973 \cdot 10^{-10}$
9	18,56	0	0	$9,691 \cdot 10^{-3}$	$-8,256 \cdot 10^{-11}$	$-9,718 \cdot 10^{-3}$	$3,311 \cdot 10^{-10}$
10	19,47	0	0	$1,017 \cdot 10^{-2}$	$-8,655 \cdot 10^{-11}$	$-1,019 \cdot 10^{-3}$	$3,471 \cdot 10^{-10}$

Таблица 4.1 Параметры изгиба кристалла германия

протоны с энергией 450 ГэВ							
1	0,49	0	0	$8,783 \cdot 10^{-4}$	$-2,227 \cdot 10^{-12}$	$-8,783 \cdot 10^{-4}$	$8,893 \cdot 10^{-12}$
2	1,32	0	0	$2,283 \cdot 10^{-3}$	$-5,789 \cdot 10^{-12}$	$-2,283 \cdot 10^{-3}$	$2,312 \cdot 10^{-11}$
3	1,97	0	0	$3,513 \cdot 10^{-3}$	$-8,907 \cdot 10^{-12}$	$-3,513 \cdot 10^{-3}$	$3,557 \cdot 10^{-11}$
4	1,92	0	0	$3,337 \cdot 10^{-3}$	$-8,461 \cdot 10^{-12}$	$-3,337 \cdot 10^{-3}$	$3,379 \cdot 10^{-11}$
5	2,62	0	0	$4,567 \cdot 10^{-3}$	$-1,157 \cdot 10^{-11}$	$-4,567 \cdot 10^{-3}$	$4,624 \cdot 10^{-11}$
6	3,06	0	0	$5,445 \cdot 10^{-3}$	$-1,38 \cdot 10^{-11}$	$-5,445 \cdot 10^{-3}$	$5,514 \cdot 10^{-11}$
7	3,92	0	0	$6,85 \cdot 10^{-3}$	$-1,737 \cdot 10^{-11}$	$-6,85 \cdot 10^{-3}$	$6,937 \cdot 10^{-11}$
8	4,68	0	0	$8,256 \cdot 10^{-3}$	$-2,093 \cdot 10^{-11}$	$-8,256 \cdot 10^{-3}$	$8,36 \cdot 10^{-11}$
9	4,96	0	0	$8,783 \cdot 10^{-3}$	$-2,227 \cdot 10^{-11}$	$-8,783 \cdot 10^{-3}$	$8,893 \cdot 10^{-11}$
10	6,18	0	0	$1,089 \cdot 10^{-2}$	$-2,761 \cdot 10^{-11}$	$-1,089 \cdot 10^{-2}$	$1,103 \cdot 10^{-10}$
11	7,9	0	0	$1,388 \cdot 10^{-2}$	$-3,518 \cdot 10^{-11}$	$-1,388 \cdot 10^{-2}$	$1,405 \cdot 10^{-10}$
12	9,45	0	0	$1,669 \cdot 10^{-2}$	$-4,23 \cdot 10^{-11}$	$-1,669 \cdot 10^{-2}$	$1,69 \cdot 10^{-10}$
13	10,96	0	0	$1,932 \cdot 10^{-2}$	$-4,899 \cdot 10^{-11}$	$-1,932 \cdot 10^{-2}$	$1,957 \cdot 10^{-10}$
14	13,35	0	0	$2,354 \cdot 10^{-2}$	$-5,968 \cdot 10^{-11}$	$-2,353 \cdot 10^{-2}$	$2,383 \cdot 10^{-10}$
15	14,88	0	0	$2,617 \cdot 10^{-2}$	$-6,636 \cdot 10^{-11}$	$-2,617 \cdot 10^{-2}$	$2,65 \cdot 10^{-10}$
16	16,91	0	0	$2,969 \cdot 10^{-2}$	$-7,526 \cdot 10^{-11}$	$-2,969 \cdot 10^{-2}$	$3,006 \cdot 10^{-10}$
17	18,08	0	0	$3,179 \cdot 10^{-2}$	$-8,06 \cdot 10^{-11}$	$-3,179 \cdot 10^{-2}$	$3,219 \cdot 10^{-10}$
18	18,88	0	0	$3,32 \cdot 10^{-2}$	$-8,417 \cdot 10^{-11}$	$-3,32 \cdot 10^{-2}$	$3,362 \cdot 10^{-10}$

Таблица 4.1. Параметры изгиба кристалла германия (продолжение)

В ходе эксперимента были измерены эффективности отклонения частиц при различных углах поворота для протонов: с энергией 200 ГэВ от 2.07 до 19.47 мрад, с энергией 450 ГэВ от 0.5 до 18.8 мрад.

Следующие результаты были получены для пучка из 301 протона с энергией 200 и 450 ГэВ в (110) плоскостном канале кристалла германия. Эффективность поворота определяется как доля каналированных частиц на выходе из

кристалла. Начальные значения точки влета были равномерно распределены в пределах 0 до  $d/a_x$ , а углы влета были нормально распределены вокруг среднего значения, равного нулю со среднеквадратичным отклонением, равным 7 мрад для 200 ГэВ и 3 мрад для 450 ГэВ. Расстояние  $T_{\min}$  устанавливалось для 200 ГэВ  $-T_{\min} = 0.045$  мкм, 450 ГэВ  $-T_{\min} = 0.065$  мкм. Отбор деканализированных частиц осуществлялся по модели деканализирования по расстоянию наибольшего сближения.

На рис. 4.11-4.12 изображены траектории протонов с энергией 450 ГэВ для угла изгиба 0.5 мрад. На рис. 4.8-4.9 показаны угловые распределения частиц на выходе из кристалла, также для протонов с энергией 450 ГэВ для угла изгиба 0.5 мрад. Рис. 4.13 соответствует расчет с учетом многократного рассеяния, а рис. 4.14 без учета многократного рассеяния.

Из рис. 4.11 видны траектории каналированных частиц (траектории типа 1) и деканализированных частиц (траектории типа 2). На рис.4.11 также наблюдаются эффекты объемного отражения, та часть частиц надбарьерных частиц, которые двигались в сторону отрицательных значений  $x/a_x$  поворачивает [18,75] (траектории типа 3) и объемного захвата – некоторые частицы из-за многократного рассеяния захватываются в каналы (траектории типа 4).

Из сравнения траекторий частиц и угловых распределений рассчитанных с учетом многократного рассеяния (рис. 4.11,4.13) и без многократного рассеяния (рис. 4.12,4.14) видно насколько важен учет многократного рассеяния, можно сделать вывод, что без его учета нельзя анализировать получаемые результаты.

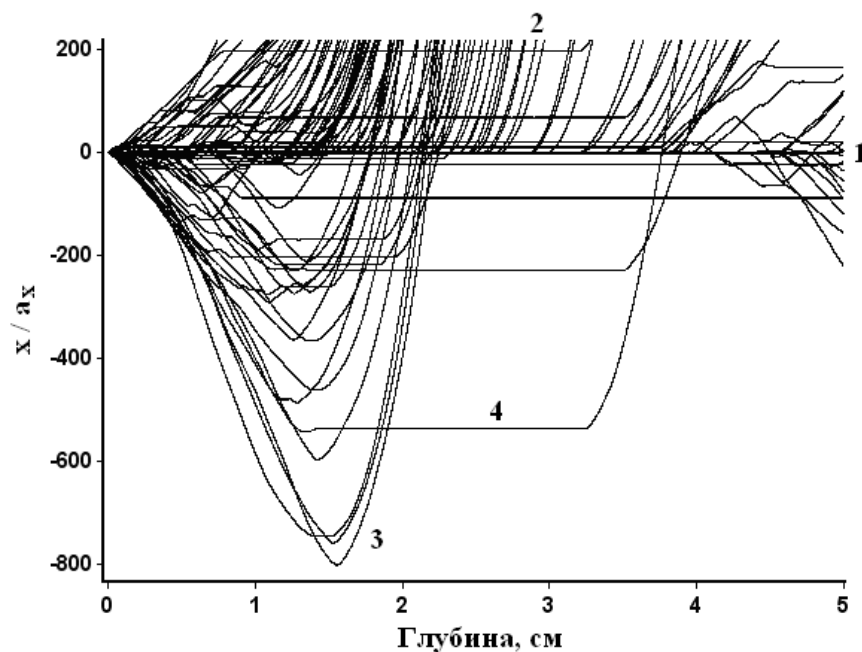


Рис. 4.11. Графики траекторий  $x(t)$  протонов с энергией 450 ГэВ в случае изгиба кристалла германия на угол 0,5 мрад рассчитанные с учетом многократного рассеяния

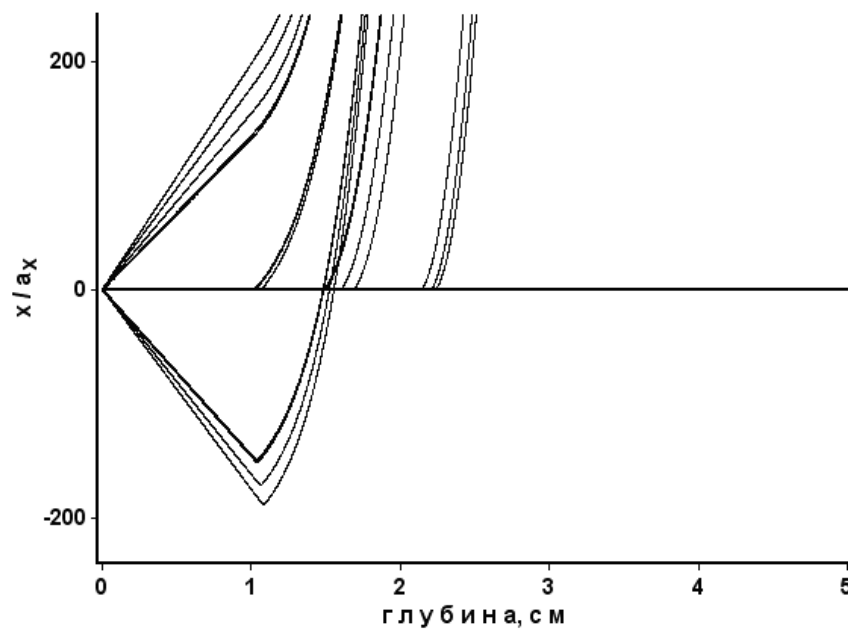


Рис. 4.12. Графики траекторий  $x(t)$  протонов с энергией 450 ГэВ в случае изгиба кристалла германия на угол 0,5 мрад рассчитанные без учета многократного рассеяния

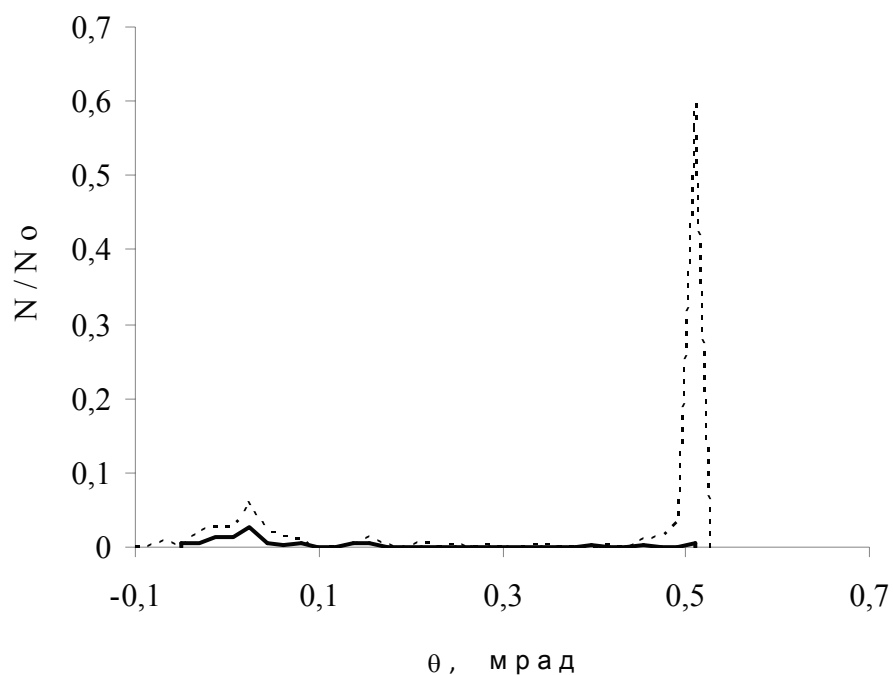


Рис. 4.13. Угловые распределения в случае изгиба кристалла германия на угол 0,5 мрад, рассчитанные с учетом многократного рассеяния. Пунктирной линией обозначены все частицы, сплошной линией - объемноотраженные

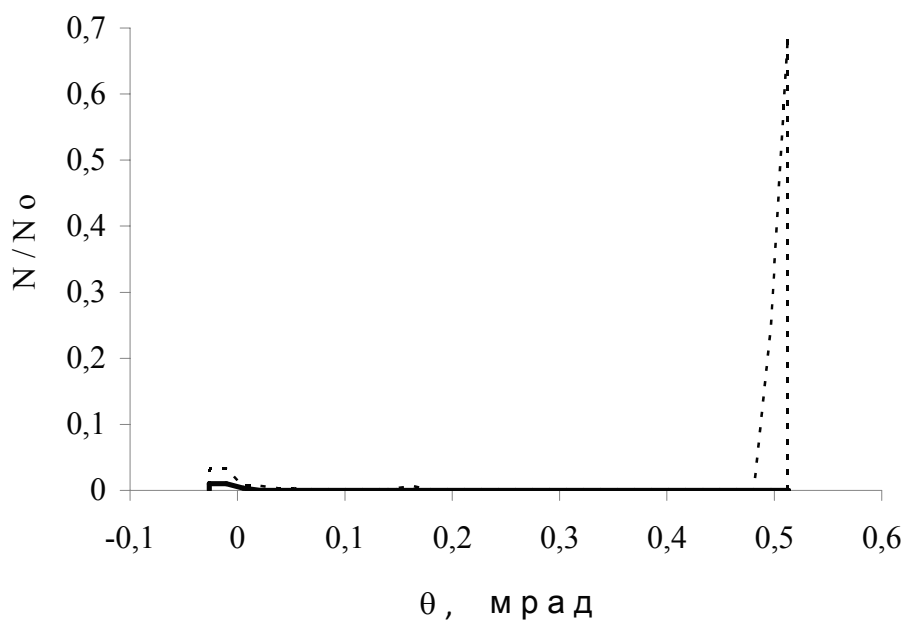


Рис. 4.14. Угловые распределения в случае изгиба кристалла германия на угол 0,5 мрад, без учета многократного рассеяния. Пунктирной линией обозначены все частицы, сплошной линией – объемноотраженные

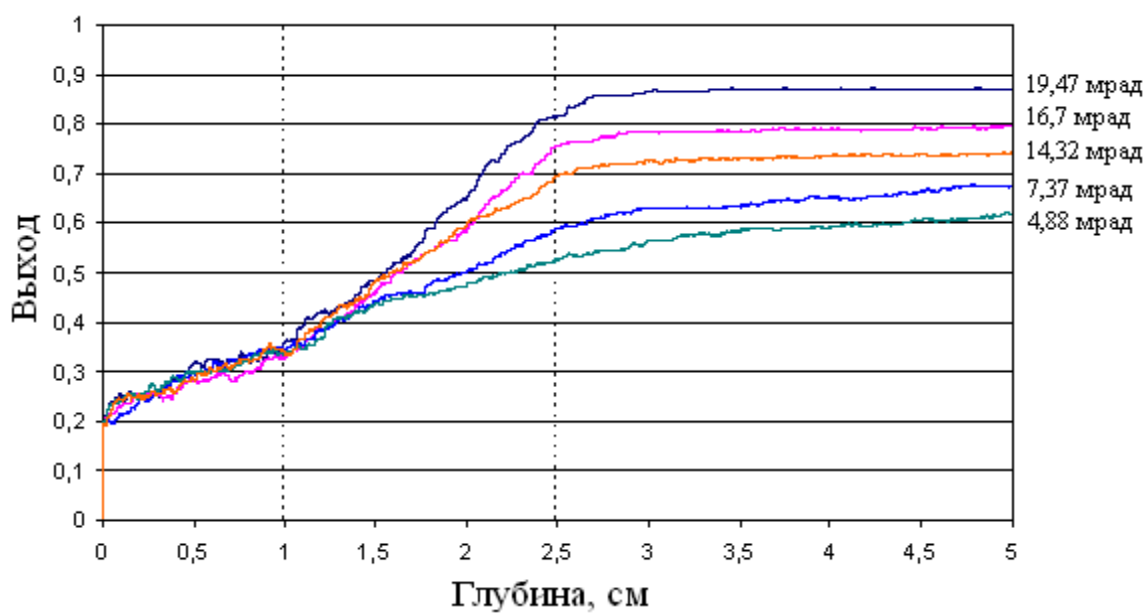


Рис.4.15. Выход деканализированных протонов с энергией 200 ГэВ, для нескольких углов изгиба кристалла (снизу-вверх): 4,88 мрад, 7,37 мрад, 14,32 мрад, 16,7 мрад, 19,47 мрад

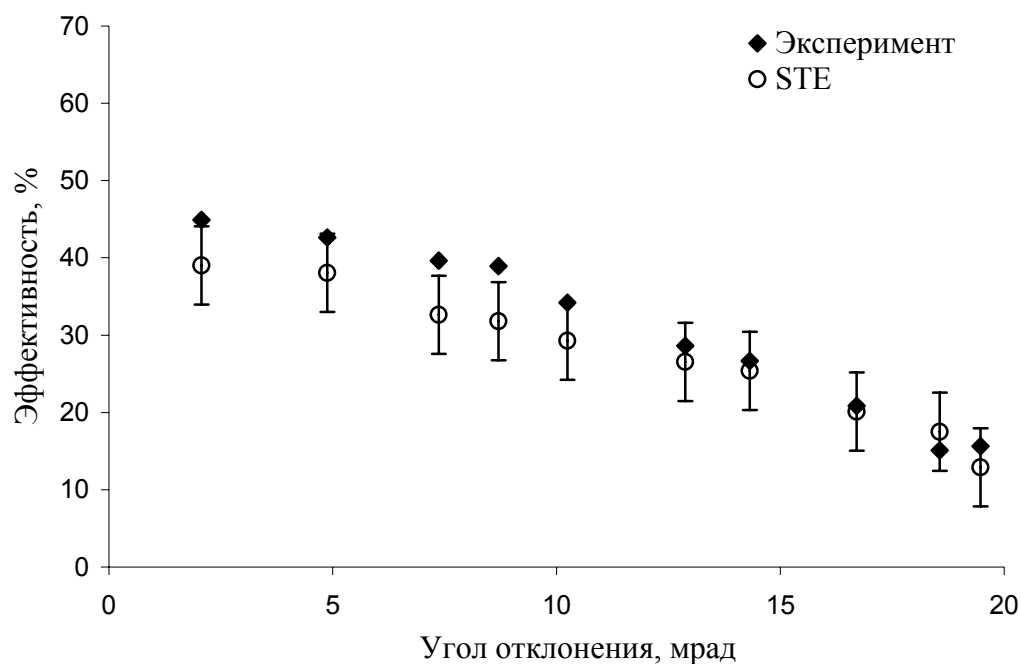


Рис.4.16. Эффективность отклонения протонов с энергией 200 ГэВ изогнутым кристаллом германия

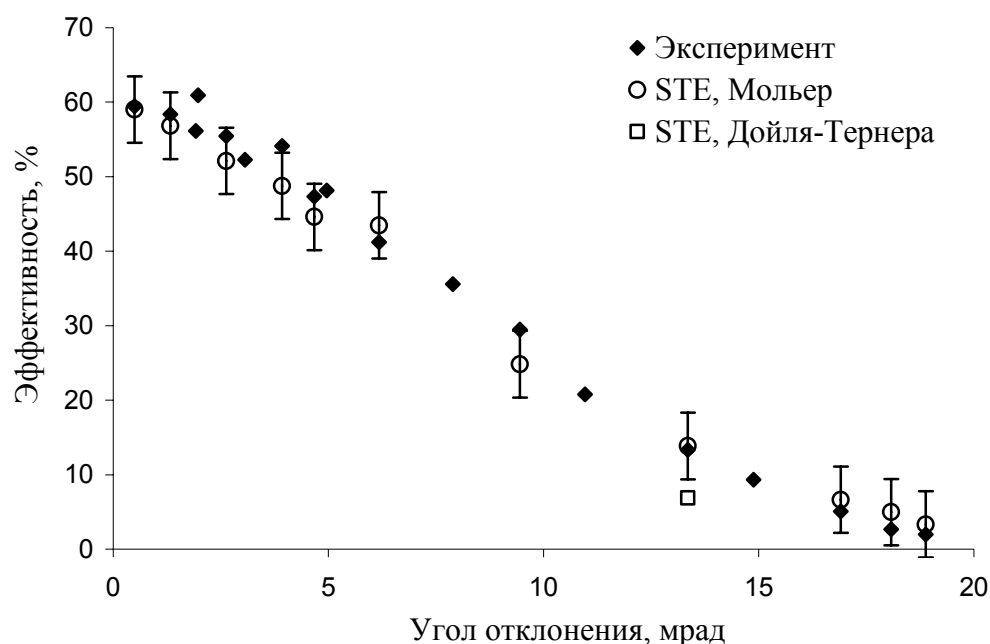


Рис. 4.17. Эффективность отклонения протонов с энергией 450 ГэВ изогнутым кристаллом германия

На рис.4.15 показана динамика деканалирования протонов с энергией 200 ГэВ для нескольких углов изгиба кристалла, видно как сильно возрастает доля деканализированных частиц для больших углов. На рис. 4.16 и рис. 4.17 представлены результаты эксперимента [30] и рассчитанные по программе STE значения эффективности отклонения протонов с энергией 200 и 450 ГэВ кристаллом германия. На рис. 4.17 представлено значение эффективности отклонения для угла изгиба 13,35 мрад, рассчитанное в приближении Дойля-Тернера для Фурье-компоненты потенциала атома и электронной плотности. Видно, что результаты расчета, полученные в приближении Мольер позволяют лучше описывать экспериментальные данные. На прямом участке кристалла была вычислена относительная погрешность эффективности отклонения протонов, для протонов с энергией 200 ГэВ она составила 5%, для протонов с энергией 450 ГэВ – 4,5%. Полученные в ходе компьютерного моделирования значения эф-



фektivности отклонения протонов с энергией 200 и 450 ГэВ кристаллом германия показывают хорошее согласие с экспериментом [30].

## ЗАКЛЮЧЕНИЕ

1. Разработана компьютерная программа на основе нового подхода для исследования движения каналированных частиц (положительных и отрицательных: протонов, ионов, антипротонов) в плоскостных каналах алмазоподобных кристаллов, учитывающая многократное рассеяние, с возможностью задавать начальную расходимость пучка частиц, различные аппроксимации потенциала отдельного атома, кривизну кристалла.

2. Получено решение кинетического уравнения Фоккера-Планка методом компьютерного моделирования каналирования частиц в пространстве поперечных энергий. Решение уравнения Фоккера-Планка в тонких кристаллах сводится к решению уравнения диффузии в пространстве поперечных энергий. Основным уравнением здесь является уравнение эволюции среднего квадрата флуктуаций поперечной энергии частицы, которое также определяет коэффициент диффузии в пространстве поперечных энергий. Данное уравнение также было получено исходя из ланжевеновского подхода к теории каналирования, проведено его исследование.

3. С помощью компьютерного моделирования по разработанной программе была исследована динамика потока быстрых частиц в режиме плоскостного каналирования в алмазоподобных прямых и изогнутых кристаллах.

Проведено исследование потерь энергии релятивистских ядер свинца в кремнии и сравнение с результатами работы [73]. Обнаружена зависимость спектра потерь энергии от начальной расходимости пучка. Также было обнаружено, что учет многократного рассеяния не оказывает влияние на спектр потерь энергии.

Приведены результаты компьютерного моделирования выхода протонов с энергией 15 и 250 ГэВ и ионов с энергией 14 МэВ и 14 ГэВ. Получено хорошее согласие с экспериментальными данными и результатами по другой программе, в которой моделирование происходит в фазовом пространстве поперечных координат и скоростей [72].

Впервые промоделирована кривая эффективности отклонения протонов с энергией 200 и 450 ГэВ изогнутым кристаллом германия. По настоящее время не существует подобных работ по расчету эффективности отклонения высокоэнергетичных протонов в германии из-за больших затрат машинного времени существующих программ. Получено хорошее согласие с экспериментом [30].

## СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Излучение релятивистских электронов [Электронный ресурс] // Кафедра прикладной физики Физико-технического факультета Томского политехнического университета: [web-сайт]. 2004. <<http://interact.phtd.tpu.edu.ru/edu/relelctron/index.html>> (05.02.2007).
2. Большая советская энциклопедия. Третье издание 1969 – 1978 гг. [Электронный ресурс] // Рубрикон: [web-сайт]. 2001. <[http://www.rubricon.ru/bse\\_1.asp](http://www.rubricon.ru/bse_1.asp)> (01.10.2006).
3. Томпсон, М. Каналирование частиц в кристаллах / М. Томпсон // УФН. – 1969. – Т. 99. – В. 2. – С. 297.
4. Sorensen, A. H. and E. Uggerhoj. The Channeling of Electrons and Positrons / A. H. Sorensen, E. Uggerhoj // Scientific American. – 1989, June. – P. 96.
5. Базылев, В.А. Излучение быстрых частиц в веществе и во внешних полях / В.А. Базылев, Н.К. Жеваго. – М.: Наука, 1987. – 272 с.
6. Линдхард, Й. // УФН. – 1969. – Т. 99, В. 2. – С. 249.
7. Крючков, Ю. Ю. Основы ядерного анализа твердого тела / Ю. Ю. Крючков, И.П. Чернов. – М.: Энергоатомиздат, 1999. – 350 с.
8. Assmann W., Huber H., Karamian S.A. et al. // Phys. Rev. Lett. – 1999. – V. 83. – P. 1759.
9. Schubert M., Gruner F., Assmann W. et al. // Nucl. Instr. Meth. Phys. Res. – 2003. – В. 209. – P. 224.
10. Datz S., Moak C.D., Grawford O.H. et al. // Phys. Rev. Lett. 1978. – V. 40, № 13. – P. 843.
11. Огороков, В.В. // УФН. – 2003. – Т. 173. – В. 4. – С. 447.

12. Денисов, С.П. Отклонение заряженных частиц кристаллами / С.П. Денисов // Соросовский образовательный журнал. – 1999. – № 12. – С. 84.
13. Detailed investigation of the channeling phenomena involved in bending of high-energy beams by means of crystals / J.F.Bak et al. // Nuclear Physics. – 1984. – В. 242. – P. 1-30.
14. Biryukov, V. Computer simulation of beam steering by crystal channeling / V. Biryukov // Physical Reviews. E. – 1995. – V. 51, № 4. – P. 3522-3528.
15. SRIM-2003.26 [Электронный ресурс] // J.P. Biersak, J.F. Zeigler: [web-сайт] / <www.SRIM.org> (01.05.2005).
16. Saitoh, K. Surface oscillations and statistical equilibrium of planar channeling / K. Saitoh // Journal of the Physical Society of Japan. – 1985. – V. 54, №. 9. – P. 3615-3621.
17. Таратин, А.М. Каналирование частиц в изогнутом кристалле / А.М. Таратин // ЭЧАЯ. – 1998. – Т. 29. – В. 5. – С. 1063-1118.
18. Ivanov Yu.M., Petrunin A.A. et al. // Physical Review Letters. – 2006. – PRL 97. 144801. – P. 1-4.
19. Volume reflection of 1-GeV protons by a bent silicon crystal / Y.M. Ivanov et al. // JETP Letters. – 2006. – V. 84. – P. 372-376.
20. High-Efficiency volume reflection of an ultrarelativistic proton beam with a bent silicon crystal / W. Scandale et al. // Physical Review Letters. – 2007. – PRL 98, 154801.
21. Taratin, A.M. Deflection of high-energy charged particles in quasi-channeling states in bent crystals / A.M. Taratin, S.A. Vorobiev // Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B. – 1987. – V. 26. – P. 512-521.
22. Calculations on axial dechanneling / E. Bonderup et al. // Radiation effects. – 1972. – V. 12. – P. 261-266.

23. Oshiyama, T. Diffusion models of dechannelling of energetic  $H^+$ -ions in single crystals / T. Oshiyama, M. Mannami. // *Physics Letters*. – 1981. – V. 81A, № 1.
24. Baier, V.N. Radiation at planar channeling of relativistic electrons in thick crystals / V.N. Baier, V.M. Katkov, V.M. Strakhovenko // *Phys. Stat. Sol. (b)*. – 1983. – № 118. – P. 499.
25. Angular distributions of channeled pions and protons up to 250 GeV/c / C.R. Sun et al. // *Nuclear Physics*. – 1980. – B. 203. – P. 40-57.
26. Киттель, Ч. Введение в физику твердого тела / Ч. Киттель. – М: Наука, 1978. – 701 с.
27. Gemmel, D.S. Channeling and related effects in the motion of charged particles through crystals / D.S. Gemmel // *Reviews of Modern Physics*. – 1974. – V. 46, № 1.
28. Гардинер, К. В. Стохастические методы в естественных науках: Пер. с англ / К. В. Гардинер. – М.: Мир, 1986. – 528 с.
29. Найфе, А. Введение в методы возмущений / А. Найфе. – М: Мир, 1984. – 535 с.
30. Deflection of 200 GeV/c and 450 GeV/c positively charged particles in a bent germanium crystal / C. Biino, M. Clément, N. Doble et al. // *Physics Letters B*. – 1997. – V. 403. P. 163.
31. Influence of channeling on scattering of 2-15 GeV/c protons,  $\pi^+$ , and  $\pi^-$  incident on Si and Ge crystals / S.K. Andersen et al. // *Nuclear Physics*. – 1980. – B. 167. – P. 1-40.
32. Холодов, А.К. Движение быстрых заряженных частиц в плоскостных каналах кристалла / А.К. Холодов // *Наука и инновации XXI века: Материалы окружной конференции молодых ученых 27-28 ноября 2003 года*. Сургут-

ский государственный университет ХМАО. – Сургут: Изд-во СурГУ, 2004 – Т. 1. – С. 35-37.

33. Холодов, А.К. Распределение в канале кристалла потока быстрых заряженных частиц / А.К. Холодов, В.П. Кощев, Д.А. Моргун // Наука и инновации XXI века: Материалы 5 открытой окружной конференции молодых ученых. 25-26 ноября 2004 года. Сургутский государственный университет ХМАО. – Сургут: Изд-во СурГУ, 2005. – С. 20-21.
34. Холодов, А.К. Влияние многократного рассеяния на распределение частиц по поперечным энергиям / А.К. Холодов, В.П. Кощев, Д.А. Моргун // Тезисы докладов XXXV международной конференции по физике взаимодействия заряженных частиц с кристаллами / Под ред. проф. А.Ф.Тулинова. – М.: Изд-во УНЦ ДО, 2005. – С. 44.
35. Кощев, В.П. Потенциальная энергия взаимодействия быстрых ионов с атомами кристалла / В.П. Кощев, Д.А. Моргун, А.К. Холодов [и др.] // Тезисы докладов XXXIV международной конференции по физике взаимодействия заряженных частиц с кристаллами / Под ред. проф. А.Ф.Тулинова. – М.: Изд-во УНЦ ДО, 2004. – С. 37.
36. В.П. Кощев, Д.А. Моргун, А.К. Холодов, Н.В. Сафин, Е.В. Кулясов - Потенциальная энергия взаимодействия быстрых ионов с атомами кристалла // Сборник научных трудов СурГУ, 2005. – с.61-65
37. Панина, Т.А. Потенциальная энергия взаимодействия атома с непрерывным потенциалом плоскостного канала / Т.А. Панина, А.К. Холодов [и др.] // Тезисы докладов XXXVI международной конференции по физике взаимодействия заряженных частиц с кристаллами / Под. ред. проф. А.Ф. Тулинова. – М.: Изд-во УНЦ ДО, 2006. – С. 37.

38. Кощев, В.П. Бесстолкновительный нагрев и охлаждение каналированных ионов в переходной области ось-плоскость / В.П. Кощев, Д.А. Моргун, Н.В. Сафин, А.К. Холодов // Тезисы докладов XXXIV международной конференции по физике взаимодействия заряженных частиц с кристаллами / Под ред. проф. А.Ф.Тулинова. – М.: Изд-во УНЦ ДО, 2004. – С. 36.
39. Кощев, В.П. Бесстолкновительный нагрев и охлаждение каналированных ионов в переходной области ось-плоскость / В.П. Кощев, Д.А. Моргун, Н.В. Сафин, А.К. Холодов // Сборник научных трудов. Выпуск 23. Физико-математические и технические науки. – Сургут: Изд-во СурГУ, 2005. – С. 55-60.
40. Кощев, В.П. Флуктуационный механизм потерь энергии каналированных ионов / В.П. Кощев, Д.А. Моргун, Н.В. Сафин, А.К. Холодов // Тезисы докладов XXXV международной конференции по физике взаимодействия заряженных частиц с кристаллами / Под ред. проф. А.Ф.Тулинова. – М.: Изд-во. УНЦ ДО, 2005. – С. 42.
41. Koshcheev, V.P. Stopping power of fast ions in planar channeling / V.P. Koshcheev, D.A. Morgun, A.K. Kholodov, N.V. Safin.// Sixth International Symposium on Swift Heavy Ions in Matter, May 28-31, 2005, Aschaffenburg (Germany). – 2005. – P. 58.
42. Кощев, В.П. Флуктуационно-динамическое описание потерь энергии быстрых ионов в плоскостных каналах кристалла / В.П. Кощев, А.К. Холодов [и др.] // Взаимодействие ионов с поверхностью (ВИП-2005). Материалы XVII международной конференции. 25-29 августа 2005 г. Звенигород, Россия. – М: Изд-во МАИ, 2005. – Т. 1. С. 274-276.
43. Кощев, В.П. Флуктуационно-динамическое описание потерь энергии быстрых ионов в плоскостных каналах кристалла / В.П. Кощев, Д.А. Моргун,



- Н.В. Сафин, А.К. Холодов // Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования. – 2006. – № 10. – С. 1-3.
44. Холодов, А.К. Моделирование траекторий каналированных ионов в пространстве поперечных энергий / А.К. Холодов, В.П. Кощев, Д.А. Моргун // Взаимодействие ионов с поверхностью (ВИП-2005). Материалы XVII международной конференции. 25-29 августа 2005 г. Звенигород, Россия. – М: Изд-во МАИ, 2005. – Т. 1. С. 314-317.
45. Кощев, В.П. Компьютерное моделирование траекторий каналированных ионов / В.П. Кощев, Д.А. Моргун, Н.В. Сафин, А.К. Холодов // Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования. – 2006. – № 7. – С. 48-51.
46. Кощев, В.П. Механизм уменьшения плоскостного деканалирования релятивистских протонов / В.П. Кощев, Д.А. Моргун, Н.В. Сафин, А.К. Холодов // Письма в ЖТФ. – 2006. – Т. 32. – В. 9. – С. 1-6.
47. Кощев, В.П. Потери энергии быстрых ионов свинца в случае плоскостного каналирования / В.П. Кощев, Д.А. Моргун, А.К. Холодов, Н.В. Сафин // Сборник научных трудов. Выпуск 25. Физико-математические и технические науки. – Сургут: Изд-во СурГУ, 2006. – С. 51-56.
48. Холодов, А.К. Компьютерное моделирование потерь энергии релятивистских ионов свинца в (111) и (110) плоскостных каналах кристалла кремния / А.К. Холодов [и др.] // Тезисы докладов XXXVI международной конференции по физике взаимодействия заряженных частиц с кристаллами / Под. ред. проф. А.Ф. Тулинова. – М.: Изд-во УНЦ ДО, 2006. – С. 35.
49. Холодов, А.К. Компьютерное моделирование объемного отражения протонов с энергией 450 ГэВ в изогнутых кристаллах кремния и германия / А.К. Холодов [и др.] // Тезисы докладов XXXVII международной конференции

- по физике взаимодействия заряженных частиц с кристаллами / Под ред. проф. А.Ф.Тулинова. – М.: Университетская книга, 2007. – С. 50.
50. Бете, Г. Квантовая механика / Г. Бете. – М.: Мир. – 1965. – 333 с.
51. Kitagawa, M. Modified dechanneling theory and diffusion coefficients / M. Kitagawa, Y.H. Ohtsuki // Phys. Rev. B. – 1973. – V. 8. – N 7. – P. 3117-3123.
52. Karamyan S.A., Gruner F., Assmann W. // Preprint of JINR, E14-2003-24. – Dubna (2003)
53. Bulgakov, Y.V. Phenomena observable in the transition from axial to planar channeling / Y.V. Bulgakov // Труды VII международной конференции по атомным столкновениям в твердых телах. – М.: Изд.-во Московского университета. – 1981. – Т. 1. – С. 41–43.
54. Kumakhov M., Wedell R. // Phys. stat. sol.(b) . – 1976. – Vol. 76. – P. 119.
55. Rowlands, G. // J. Phys. C: Solid St. Phys. –1980. – V.13. – P. 9-12.
56. Антипин, Д.П. Движение каналированных ионов в переходной области ось-плоскость / Д.П. Антипин, В.П. Кощев // Взаимодействие ионов с поверхностью (ВИП-2003). Материалы XV международной конференции. 25-29 августа 2003 г. – г. Звенигород, Россия. – Т. 1. – С. 231-234.
57. Кощев, В.П. // Изв. вузов. Физика. – 1999, №10. – С.73-74.
58. Слабый хаос и квазирегулярные структуры / Г.М. Заславский [и др.]. – М.: Наука, 1991. – 235 с.
59. Оцуки, Е.-Х. Взаимодействие заряженных частиц с твердыми телами / Е.-Х. Оцуки. – М.: Мир, 1985.
60. Кумахов, М.А. Атомные столкновения в кристаллах / М.А. Кумахов, Г. Ширмер. – М.: Атомиздат, 1980. – 192 с.
61. Рябов, В.А. Эффект каналирования / В.А. Рябов. – М.: Энергоатомиздат, 1994. – 240 с.

62. Кощеев, В.П. // Изв. вузов. Физика. – 1995, № 1. – С. 100.
63. Кощеев, В.П. Ланжевеновский подход к теории каналирования: Монография / В.П. Кощеев. – Сургут: Изд-во СурГУ, 2001. – 86 с.
64. Мартыненко, Ю. В. // ФТТ. – 1971. – Т. 13, № 4. – С. 1055.
65. Рытов, С. М. Введение в статистическую радиофизику. Часть 1. Случайные процессы / С.М. Рытов. – М.: Наука, 1976. – 496 с.
66. Динамика заряженных частиц высоких энергий / А.И. Ахиезер [и др.] // УФН. – 1995. – Т. 165, № 10. – С. 1165.
67. Бирюков, В.М. Управление пучками заряженных частиц высоких энергий при помощи изогнутых монокристаллов / В.М. Бирюков, В.И. Котов, Ю.А. Чесноков // УФН. – 1994. – Т. 164, № 10. – С. 1017.
68. Кудряшов, Н.А. Динамика объемного захвата быстрых заряженных частиц в каналы изогнутого кристалла / Н.А. Кудряшов, С.В. Петровский, М.Н. Стриханов // ЖТФ. – 1989. – Т. 59, № 4. – С. 68.
69. Кощеев В.П., Сафин Н.В., Моргун Д.А. // Письма в ЖТФ. – 2007. – Т. 33. – В. 15. – С. 62.
70. Кудряшов, Н.А. Каналирование релятивистских ядер в изогнутом кристалле / Н.А. Кудряшов, С.В. Петровский, М.Н. Стриханов // ЖТФ. – 1989. – Т. 59. – В. 3. – С. 205.
71. Ellison, J.A. GeV channeling in bent crystals with slowly varying curvature / J.A. Ellison // Nuclear Instruments and Methods in Physics Research. – 1984. – В. 2. – Р. 9-12.
72. Сафин, Н.В. Моделирование траекторий быстрых протонов и ядер в прямых и изогнутых кристаллах: Автореф. дис. ... физ.-мат. наук / Н.В. Сафин; Сургут. гос. ун-т. – Сургут, 2006. – 25 с.
73. Random and channeled energy loss of 33.2-TeV Pb nuclei in silicon single crys-

- tals / S. Pape Moller, V. Biryukov, S. Datz et al. // Physical Review A. – 2001. – V. 64. – P. 032902-1–032902-5.
74. Deflection of 32.8 TeV/c fully stripped Pb ions by means of a bent Si crystal / C. Biino, M. Clement, N. Doble et al. // Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B. – 2000. – V. 160. – P. 536-543.
75. Таратин А.М., Воробьев С.А. // Журнал технической физики. – 1985. – Т. 55. – В. 8. – С. 1598-1604.