

УДК 539.12

## ПРОХОЖДЕНИЕ ПУЧКОВ БЫСТРЫХ ЗАРЯЖЕННЫХ ЧАСТИЦ ЧЕРЕЗ ИЗОГНУТЫЙ КРИСТАЛЛ

**Н.Ф. Шульга<sup>\*</sup>, В.И. Трутень<sup>\*</sup>, И.В. Кириллин<sup>\*\*</sup>**

<sup>\*</sup> *Национальный научный центр «Харьковский физико-технический институт», Украина*

<sup>\*\*</sup> *Харьковский национальный университет им. В.Н. Каразина, Украина*

*E-mail: [shulga@kipt.kharkov.ua](mailto:shulga@kipt.kharkov.ua)*

Поступила в редакцию 20 января 2010 г.

Рассматриваются механизмы отклонения пучков заряженных частиц большой энергии изогнутыми кристаллами, связанные с явлением плоскостного каналирования частиц, отражением частиц от изогнутых кристаллических плоскостей атомов и многократным рассеянием частиц на изогнутых цепочках атомов кристалла (стохастический механизм). Разработана программа компьютерного моделирования, позволяющая с единой точки зрения исследовать эти механизмы поворотов пучков. Проведен сравнительный анализ этих механизмов поворотов пучков для положительно и отрицательно заряженных частиц. Показано, что для отрицательно заряженных частиц наиболее эффективным является стохастический механизм поворота пучка. Для положительно заряженных частиц этот механизм приводит не только к отклонению пучка на большие углы, но и к расщеплению пучка на несколько пучков и к преобразованию круглых пучков в плоские. Проведено сравнение результатов моделирования с результатами экспериментов ЦЕРН 2008-2009 годов по обнаружению стохастического механизма поворота пучков положительно и отрицательно заряженных частиц изогнутыми кристаллами.

**КЛЮЧЕВЫЕ СЛОВА:** изогнутый кристалл, поворот пучка, ультрарелятивистская частица, критический угол осевого каналирования, критический угол плоскостного каналирования.

### FAST CHARGED PARTICLES PASSAGE THROUGH A BENT CRYSTAL

**N.F. Shul'ga<sup>\*</sup>, V.I. Truten'\*, I.V. Kirillin<sup>\*\*</sup>**

<sup>\*</sup> *National Science Center "Kharkov Institute of Physics and Technology"*

<sup>\*\*</sup> *V.N. Karazin Kharkiv National University*

Mechanisms of high energy charged particle beams deflection by bent crystals, connected with the phenomenon of plane channeling of particles, particles reflection from bent crystal atomic planes and multiple scattering on bent crystal atomic strings (stochastic mechanism) are considering. The program of computer simulation allowing from the uniform point of view to investigate these mechanisms of beams turning is developed. The comparative analysis of these turning mechanisms is carried out for positively and negatively charged particle beams. It is shown, that for negatively charged particles the most effective is the stochastic beams turning mechanism. For positively charged particles this mechanism results not only in a beam deflection on the wide angles, but also to splitting of a beam on several beams and to round beams transformation into flat beams. The comparison of simulation results with the results of CERN experiments of 2008-2009 on detection of the stochastic mechanism of positively and negatively charged particle beams turn by the bent crystals is carried out.

**KEY WORDS:** bent crystal, turn of beam, ultrarelativistic particle, critical angle for axial channeling, critical angle for planar channeling.

### ПРОХОДЖЕННЯ ПУЧКІВ ШВИДКИХ ЗАРЯДЖЕНИХ ЧАСТИНОК КРИЗЬ ЗІГНУТИЙ КРИСТАЛ

**М.Ф. Шульга<sup>\*</sup>, В.І. Трутень<sup>\*</sup>, І.В. Кирилін<sup>\*\*</sup>**

<sup>\*</sup> *Національний науковий центр «Харківський фізико-технічний інститут», Україна*

<sup>\*\*</sup> *Харківський національний університет ім. В.Н. Каразіна, Україна*

Розглядаються механізми відхилення пучків заряджених частинок великої енергії зігнутими кристаллами, пов'язані з явищем площинного каналивання частинок, віддзеркаленням частинок від зігнутих кристалічних площин атомів та багаторазовим розсіюванням частинок на зігнутих ланцюжках атомів кристалла (стохастичний механізм). Розроблено програму комп'ютерного моделювання, яка дозволяє з єдиної точки зору дослідити ці механізми поворотів пучків. Проведений порівнювальний аналіз цих механізмів поворотів пучків для позитивно та негативно заряджених частинок. Показано, що для негативно заряджених частинок найбільш ефективним є стохастичний механізм повороту пучка. Для позитивно заряджених частинок цей механізм призводить не тільки до відхилення пучка на великі кути, але й до розщеплення пучка на декілька пучків та до перетворення круглих пучків у плоскі. Проведено порівняння результатів моделювання із результатами експериментів ЦЕРН 2008-2009 років по виявленню стохастичного механізму повороту пучків позитивно та негативно заряджених частинок зігнутими кристаллами.

**КЛЮЧОВІ СЛОВА:** зігнутий кристал, поворот пучка, ультрарелятивістська частинка, критичний кут осевого каналювання, критичний кут площинного каналювання.

При русі быстрых заряженных частиц в кристалле под малым углом к одной из кристаллических осей или плоскостей проявляются корреляции между последовательными столкновениями частицы с атомами решётки. В результате этих корреляций движение частицы в кристалле определяется, в основном, непрерывным потенциалом цепочек атомов кристалла или кристаллических атомных плоскостей, вблизи которых происходит движение [1,2]. Сильные внутрискристаллические поля позволяют на малых расстояниях оказывать существенное влияние на характеристики частиц пучка, приводя к значительным эффектам в рассеянии и излу-

нии. Особый интерес представляет прохождение частиц большой энергии через изогнутый кристалл, так как при этом возможен эффективный поворот пучка кристаллом малых размеров. Существует несколько механизмов отклонения частиц большой энергии изогнутым кристаллом, связанных с финитным (каналирование) и инфинитным (надбарьерное) их движением по отношению к изогнутым цепочкам атомов или кристаллическим плоскостям атомов [3–5]. Важную роль при исследовании этих механизмов поворотов пучков играет метод компьютерного моделирования движения частиц в изогнутом кристалле (см., например, работы [5–10] и ссылки в них).

В настоящей работе предложен метод, позволяющий с единой позиции рассмотреть различные механизмы поворотов пучков заряженных частиц большой энергии изогнутыми кристаллами. Этот метод основан на развитии предложенного в [9,10] метода моделирования движения частиц в поле изогнутых цепочек атомов кристалла, применительно к случаю движения частиц вблизи кристаллических плоскостей атомов. При этом кристаллические плоскости атомов рассматриваются как плоскости, образованные цепочками атомов кристалла, расположенными периодически в плоскости. На основе этого метода удается рассмотреть с единой точки зрения не только механизмы поворотов пучков изогнутыми кристаллами, связанные с плоскостным каналированием частиц, объемным отражением и многократным их рассеянием на цепочках атомов кристалла, но и исследовать промежуточные случаи.

Целью настоящей работы является рассмотрение с единой точки зрения различных механизмов поворота пучков заряженных частиц большой энергии изогнутыми кристаллами.

### ДВИЖЕНИЕ БЫСТРЫХ ЗАРЯЖЕННЫХ ЧАСТИЦ В ОРИЕНТИРОВАННОМ КРИСТАЛЛЕ

Рассмотрим движение быстрой заряженной частицы в кристалле под малым углом  $\psi$  к одной из кристаллографических осей (оси  $z$ ). Анализ этого процесса проведем на основе классической теории, возможность использования которой в рассматриваемой задаче определяется выполнением условия [2]

$$N_c Z e^2 / \hbar c \gg 1, \quad (1)$$

где  $N_c = R / (a\psi)$  — число атомов кристалла, с которыми эффективно взаимодействует частица,  $Z|e|$  — заряд ядра атома,  $a$  — постоянная решетки,  $R$  — радиус экранировки потенциала атома.

В классической теории движение частицы в кристалле определяется уравнением [2,9]

$$\frac{d}{dt} \frac{m\mathbf{v}}{\sqrt{1-v^2/c^2}} = -Q\nabla\Phi_c(\mathbf{r}), \quad (2)$$

где  $\mathbf{v}$  — скорость частицы,  $m$  и  $Q$  — её масса и заряд и  $\Phi_c(\mathbf{r})$  — потенциал совокупности атомов кристаллической решетки

$$\Phi_c(\mathbf{r}) = \sum_n \phi(\mathbf{r} - \mathbf{r}_n). \quad (3)$$

Нахождение траектории частицы в таком поле представляет собой довольно сложную задачу даже с использованием численных методов решения уравнения (2). В рассматриваемой нами задаче, однако, когда движение происходит под малым углом  $\psi$  к одной из кристаллических осей, могут быть достигнуты значительные упрощения при решении уравнения (2). Связано это с тем, что при малых значениях углов  $\psi$  проявляются корреляции между последовательными столкновениями частицы с атомами решетки. Корреляции проявляются в том, что изменения прицельного параметра между последовательными столкновениями частицы с атомами решетки малы по сравнению с прицельным параметром на больших участках пути частицы в кристалле. Движение частицы в этом случае определяется, в основном, непрерывным потенциалом цепочек атомов кристалла, расположенных параллельно оси  $z$ , который представляет собой усредненный по координате  $z$  потенциал решетки [1,2]:

$$\Phi(\mathbf{\rho}) = \frac{1}{L} \int_{-\infty}^{\infty} dz \Phi_c(\mathbf{\rho}, z), \quad (4)$$

где  $L$  — толщина кристалла и  $\mathbf{\rho} = (x, y)$  — координаты в плоскости, ортогональной оси  $z$ .

В поле (4) сохраняется составляющая импульса частицы  $\mathbf{p}_\parallel$ , параллельная оси  $z$ . При этом её движение в поперечной плоскости определяется двумерным уравнением [9]

$$\ddot{\mathbf{\rho}} = -\frac{c^2 Q}{E_\parallel} \frac{\partial}{\partial \mathbf{\rho}} \Phi(\mathbf{\rho}), \quad (5)$$

где  $E_\parallel = c\sqrt{p_\parallel^2 + (mc)^2}$ . Для ультррелятивистских частиц энергия  $E_\parallel$  близка к значению полной энергии частицы  $E$ , поэтому в дальнейшем мы будем полагать, что  $E_\parallel \approx E$ .

Положения атомов в кристалле

$$\mathbf{r}_n = \mathbf{r}_n^0 + \mathbf{\tau}_n \quad (6)$$

имеют некоторый разброс  $\tau_n$  относительно равновесных положений  $\mathbf{r}_n^0$ . Учет влияния теплового разброса положений атомов в решетке на движение частицы в кристалле в первом приближении может быть осуществлен путем рассмотрения движения частицы в потенциале (3), усредненным по тепловым колебаниям атомов. С этой целью запишем (3) в виде

$$\Phi_c(\mathbf{r}) = \overline{\Phi_c(\mathbf{r})} + \delta\Phi_c(\mathbf{r}), \quad (7)$$

где  $\delta\Phi_c(\mathbf{r})$  — флуктуация потенциала относительно его среднего значения по тепловым колебаниям атомов в решетке  $\overline{\Phi_c(\mathbf{r})}$ . Величина  $\delta\Phi_c(\mathbf{r})$  определяет некогерентные эффекты в рассеянии. В пренебрежении этими эффектами траектория частицы в кристалле будет определяться путем решения уравнения (5) со следующим выражением для непрерывного потенциала решетки

$$\overline{\Phi(\rho)} = \frac{1}{L} \int_{-\infty}^{\infty} dz \overline{\Phi_c(\rho, z)}. \quad (8)$$

Потенциал (8) может быть представлен в виде суммы непрерывных потенциалов отдельных цепочек атомов кристалла, расположенных параллельно оси  $z$ ,

$$\overline{\Phi(\rho)} = \sum_n \Phi_R(\rho - \rho_n), \quad (9)$$

где  $\rho_n$  — положения осей цепочек атомов в плоскости, ортогональной оси  $z$ . Полагая, что распределение атомов относительно их равновесных положений имеет гауссов вид со средним значением квадрата смещения вдоль одной из координат, равным  $\overline{\tau^2}$ , легко показать, что непрерывный потенциал цепочки атомов  $\Phi_R(\rho)$  имеет следующий вид

$$\Phi_R(\rho) = \frac{1}{2\pi d} \int_0^{\infty} q_{\perp} dq_{\perp} J_0(q_{\perp} \rho) \phi_{q_{\perp}} \exp(-q_{\perp}^2 \overline{\tau^2} / 2), \quad (10)$$

где  $d$  — расстояние между атомами в цепочке,  $J_0(x)$  — функция Бесселя и  $\phi_{q_{\perp}}$  — фурье-компонента потенциала атома решетки, соответствующая значению  $q_z = 0$ ,

$$\phi_{q_{\perp}} = \int d^2 \rho dz \phi(\rho, z) \exp(i\mathbf{q}_{\perp} \mathbf{c}). \quad (11)$$

В простейшем случае, когда  $\overline{\tau^2} = 0$  и потенциал атома представляет собой экранированный потенциал Кулона

$$\phi(r) = \frac{Z|e|}{r} \exp(-r/R), \quad (12)$$

непрерывный потенциал цепочки атомов (10) приобретает следующий вид

$$\Phi_R(\rho) = \frac{2Z|e|}{d} K_0(\rho/R), \quad (13)$$

где  $K_0(x)$  — модифицированная функция Бесселя второго рода нулевого порядка. Учет тепловых колебаний атомов приводит к сглаживанию функции (13) на малых расстояниях от оси цепочки  $\rho \leq \sqrt{\overline{\tau^2}}$ .

Функция (12) дает хорошую аппроксимацию реального потенциала атома при  $r \leq R$ . При рассмотрении движения частицы в кристалле, однако, необходимо знать потенциал атома решетки не только в области  $r \leq R$ , но и на значительно больших расстояниях. Хорошая аппроксимация реального потенциала атома как на малых, так и на больших расстояниях от оси цепочки достигается в модели Дойля-Тернера [11]. В этой модели непрерывный потенциал цепочки атомов (10) имеет следующий вид [12,13]

$$\Phi_R(\rho) = \frac{8\pi^2 \hbar^2}{|e|md} \sum_{i=1}^4 \frac{\alpha_i}{\beta_i + B} \exp\left(-\frac{4\pi^2 \rho^2}{\beta_i + B}\right), \quad (14)$$

где  $B = 8\pi^2 \overline{\tau^2}$ ,  $\alpha_i$  и  $\beta_i$  — коэффициенты, полученные в аппроксимации Дойля-Тернера. В частности [12,13], для кристалла кремния  $\alpha_i = (2,1293; 2,5333; 0,8349; 0,3216) \text{ \AA}$ ,  $\beta_i = (57,7748; 16,4756; 2,8796; 0,3660) \text{ \AA}^2$ .

Для такого потенциала отдельной цепочки атомов при нахождении непрерывного потенциала кристалла суммирование в (9) в ряде случаев может быть выполнено аналитически. В частности, для частицы, движущейся в кристалле кремния вблизи оси  $\langle 100 \rangle$ , суммарный непрерывный потенциал цепочки атомов (9) приобретает следующий вид

$$\overline{\Phi(\rho)} = \frac{8\pi^2 \hbar^2}{|e|md} \sum_{i=1}^4 \frac{\alpha_i}{\beta_i + B} \exp\left(-\frac{4\pi^2 \rho^2}{\beta_i + B}\right) \vartheta_3\left(\frac{4\pi i d_r x}{\beta_i + B} \middle| \frac{4\pi i d_r^2}{\beta_i + B}\right) \vartheta_3\left(\frac{4\pi i d_r y}{\beta_i + B} \middle| \frac{4\pi i d_r^2}{\beta_i + B}\right), \quad (15)$$

где  $d_r$  — расстояние между соседними цепочками атомов кристалла ( $d_r = a/2\sqrt{2}$ ) и  $\vartheta_3(v|w) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} e^{i\pi n^2 v} e^{2\pi i n w}$  — тета-функция Якоби [14].

Эквипотенциальные поверхности потенциальной энергии взаимодействия протона с цепочками атомов кристалла  $U(\rho) = Q\Phi(\rho)$ , соответствующие непрерывному потенциалу (15), представлены на рис.1. Цифры у линий соответствуют значениям потенциальной энергии в эВ. Значение потенциальной энергии в центре каждой ячейки принято равным нулю. Крестики обозначают положения осей цепочек атомов в плоскости, ортогональной оси  $\langle 100 \rangle$ . Вычисления проведены для кристалла, находящегося при комнатной температуре  $T=293^\circ$ , для которой  $\sqrt{\tau^2} = 0,075 \text{ \AA}$  [16]. Для отрицательно заряженных частиц эквипотенциалы необходимо взять с отрицательным знаком.

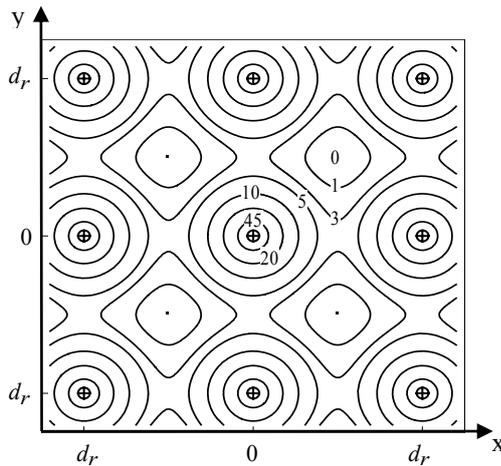


Рис.1. Эквипотенциальные поверхности непрерывной потенциальной энергии взаимодействия протона с цепочками атомов кристалла кремния в плоскости, ортогональной оси  $\langle 100 \rangle$

элементарной ячейки потенциала (9), на каждом из которых кристалл будем считать прямолинейным. Траектория частицы в пределах каждого из этих участков пути тогда определяется путем численного решения уравнения (2) с потенциалом (9). В таком подходе учет изогнутости кристалла осуществляется путем соответствующего изменения начальных условий для скорости частицы, связанных с изгибом кристалла, при переходе от одного участка разбиения траектории к другому.

Такой подход позволяет учесть также эффекты, связанные с некогерентным рассеянием частицы на тепловых колебаниях атомов решётки и на электронной подсистеме кристалла. В терминах угловых переменных  $\theta_x = \frac{v_x}{v}$ ,  $\theta_y = \frac{v_y}{v}$  учет влияния этих факторов на движение частицы в кристалле представляет собой следующие замены начальных условий при переходе от одного участка пути к другому

$$\begin{cases} \theta_{xi} \rightarrow \theta_{xi} - l_i / R_c + \theta_{xi}^{(n)} \\ \theta_{yi} \rightarrow \theta_{yi} + \theta_{yi}^{(n)} \end{cases}, \quad (16)$$

где  $\theta_{xi}$  и  $\theta_{yi}$  — значения углов  $\theta_x$  и  $\theta_y$  в конце  $i$ -го участка пути,  $l_i$  — длина этого участка пути вдоль оси  $z$ ,  $\theta_{xi}^{(n)}$  и  $\theta_{yi}^{(n)}$  — слагаемые, соответствующие некогерентному рассеянию на  $i$ -том участке пути.

Некогерентное рассеяние на тепловых колебаниях атомов решётки может быть учтено путем розыгрыша значений углов  $\theta_{xi}^{(n)}$  и  $\theta_{yi}^{(n)}$  как случайных величин, распределённых по гауссовому закону со среднеквадратичным их значением, равным [2,17]

$$\overline{\theta_i^2}(\rho) = \frac{16\pi Z^2 e^4 n(\rho) \ln(183Z^{-1/3})}{E^2} l_i, \quad (17)$$

где  $n(\rho)$  — плотность ядер атомов на расстоянии  $\rho$  от оси цепочки. Особенностью данного процесса, в отличие от процесса многократного рассеяния частиц в аморфной среде, является то, что плотность рассеивающих центров является функцией расстояния от оси цепочки атомов. Полагая, что распределение положений атомов в решетке относительно их равновесных положений имеет гауссов вид, функция  $n(\rho)$

Приведенные эквипотенциалы показывают, что частица в поперечной плоскости может совершать как финитное, так и инфинитное движение по отношению к цепочкам атомов кристалла. При этом в зависимости от начальных условий наряду с регулярным возможно существенно нерегулярное хаотическое движение частицы в поперечной плоскости [15]. Нахождение траектории частицы в таком сложном поле кристалла, как потенциал (15), может быть осуществлено на основе численного решения уравнения (2).

#### УЧЁТ ИЗОГНУТОСТИ КРИСТАЛЛА И НЕКОГЕРЕНТНЫХ ЭФФЕКТОВ В РАССЕЯНИИ

Рассмотрим теперь движение частицы в поле непрерывного потенциала изогнутых цепочек атомов кристалла. Для определенности будем полагать, что изгиб кристалла осуществляется вдоль оси  $x$  (рис.1). Кроме того, будем считать, что радиус изгиба кристалла  $R_c$  постоянен и настолько большой, чтобы при изгибе кристалл не разрушался.

Для нахождения траектории частицы в изогнутом кристалле разобьем её на большое число участков в пределах

определяется соотношением

$$n(\rho) = \frac{1}{2\pi\tau^2 d} \exp\left(-\frac{\rho^2}{2\tau^2}\right). \quad (18)$$

Аналогичным образом при моделировании может быть учтено некогерентное рассеяние на электронной подсистеме кристалла. При этом среднее значение квадрата угла многократного рассеяния на электронах кристалла следует учитывать в виде [2,17]

$$\overline{\theta_e^2}(\rho) = \frac{16\pi e^4 n_e(\rho) \ln(183)}{E^2} l_i, \quad (19)$$

где  $n_e(\rho)$  — плотность электронов на расстоянии  $\rho$  от оси каждой цепочки атомов. Для валентных электронов величина  $n_e(\rho)$  в вычислениях предполагалась постоянной. Для электронов же, связанных с атомами, использовалось следующее выражение для этой функции

$$n_e(\rho) = \frac{Z_c}{2\pi R_0^2 d} \exp\left(-\frac{\rho^2}{2R_0^2}\right), \quad (20)$$

где  $Z_c$  — число электронов, связанных с каждым атомом,  $R_0^2$  — среднеквадратичный радиус орбит связанных электронов в атоме.

### МЕХАНИЗМЫ ОТКЛОНЕНИЯ ПУЧКОВ ЗАРЯЖЕННЫХ ЧАСТИЦ БОЛЬШОЙ ЭНЕРГИИ ИЗОГНУТЫМИ КРИСТАЛЛАМИ

При входе быстрых заряженных частиц в кристалл под малым углом  $\psi$  к одной из кристаллографических осей могут быть созданы условия, при которых частицы будут совершать как финитное, так и инфинитное движение в поперечной плоскости. При этом в зависимости от начальных условий могут быть реализованы различные механизмы поворотов пучков частиц изогнутым кристаллом. Рассмотрим некоторые из них.

Если энергия поперечного движения  $\varepsilon_{\perp} = E\psi^2/2 + U(x, y)$  после входа частицы в кристалл меньше значения потенциальной энергии в седловой точке  $U_c$ , то частица будет двигаться в кристалле в одном из осевых каналов. Для положительно заряженных частиц такие каналы находятся в области между цепочками атомов. Глубина двумерной потенциальной ямки в этом случае определяется величиной  $U_c$ . Для отрицательно заряженных частиц оси каналов совпадают с осями цепочек атомов кристалла. Глубина потенциальной ямки для таких частиц  $U_{\max} = |U_0| - |U_c|$  значительно больше, чем для положительно заряженных частиц, где  $U_0$  — значение потенциальной энергии в центре осевого канала. (Для представленных на рис.1 эквипотенциалей  $U_c \approx 3$  эВ,  $U_0 \approx 85$  эВ).

При слабом изгибе кристалла, когда режим финитного движения частиц в осевых каналах сохраняется, частицы будут следовать за изгибом этих каналов, отклоняясь на угол поворота канала.

При  $\varepsilon_{\perp} > U_c$  частица будет совершать инфинитное движение по отношению к цепочкам атомов (см. рис.2а). Если при этом  $\varepsilon_{\perp} \lesssim U_{\max}$ , то для большинства начальных условий (точек влета частиц в кристалл) имеет место стохастический механизм рассеяния частицы в кристалле, при котором её столкновения с различными цепочками атомов можно рассматривать как случайные [15]. В этом случае происходит интенсивное рассеяние частицы вдоль азимутального угла  $\varphi$  в поперечной плоскости, в результате чего быстро устанавливается равномерное распределение частиц по углам  $\varphi$ . Такой режим движения сохраняется на больших толщинах кристалла и при слабом изгибе кристалла, в результате чего пучок будет следовать за изгибом цепочек атомов кристалла. Толщины, до которых имеет место такой стохастический режим поворота пучка изогнутым кристаллом, определяются по порядку величины неравенством [9,10]

$$L < \psi_c^2 R_c^2 / l, \quad (21)$$

где  $l$  — средняя длина пробега между последовательными столкновениями частицы с цепочками атомов кристалла в продольном направлении, на которой устанавливается равномерное распределение частиц по азимутальным углам рассеяния, и  $\psi_c = \sqrt{2U_{\max}/E}$  — критический угол осевого каналирования [1,2]. Длина  $l$  определяется соотношением [1,15]

$$l^{-1} = nd\psi \int_{-\infty}^{\infty} db(1 - \cos \varphi(b)), \quad (22)$$

где  $n$  — плотность атомов в кристалле,  $\varphi(b)$  — функция отклонения частицы в поле отдельной цепочки атомов в плоскости, ортогональной оси цепочки и  $b$  — прицельный параметр падающей частицы в этой плоскости. При выполнении условия (21) практически для всех частиц пучка осуществляется поворот на угол  $\alpha_{\text{tot}} = L/R_c$ .

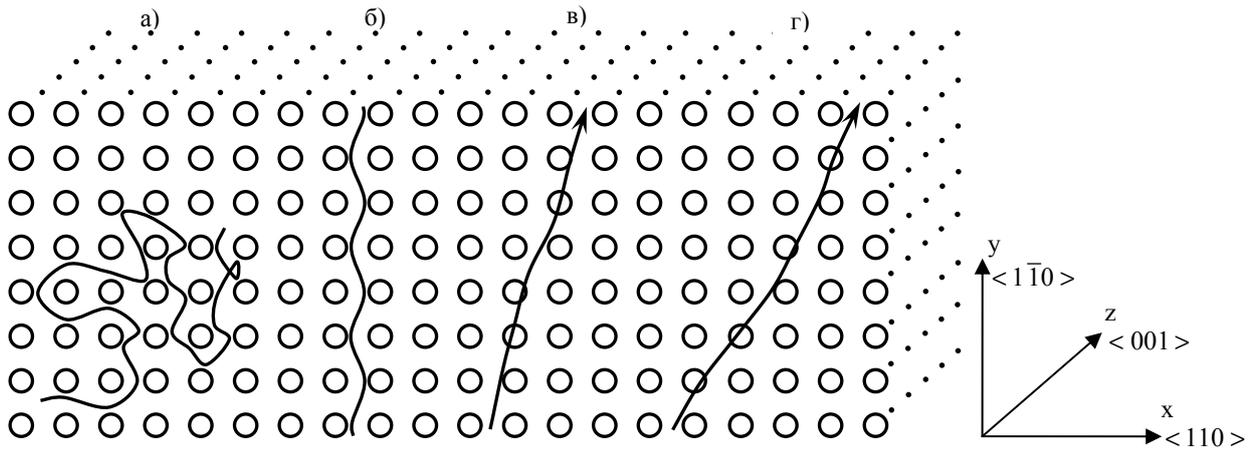


Рис.2. Различные режимы движения положительно заряженной частицы в кристалле вблизи оси  $\langle 100 \rangle$ : а) стохастический режим многократного рассеяния на цепочках атомов (надбарьерное движение при  $U_c < \varepsilon_{\perp} \lesssim U_{\max}$ ); б) режим плоскостного каналирования; в) режим надбарьерного движения по отношению к кристаллическим плоскостям атомов при  $\varepsilon_{\perp} \gtrsim U_{\max}$ ; г) режим многократного рассеяния на цепочках атомов при  $\varepsilon_{\perp} \gg U_{\max}$ .

При  $\varepsilon_{\perp} \gg U_{\max}$  в зависимости от ориентации поперечной составляющей импульса частицы относительно кристаллических осей возможны явления плоскостного каналирования и надбарьерного движения частиц относительно кристаллических плоскостей атомов, образованных цепочками атомов (см. рис.2б,в). В этом случае могут быть выполнены также условия, при которых плоскостные эффекты во взаимодействии частицы с цепочками атомов проявляться не будут (см. рис.2г). При слабом изгибе плоскостных каналов режим плоскостного каналирования не разрушается и частицы будут двигаться вдоль изгиба кристаллических плоскостей атомов [3,7].

При надбарьерном движении в поле изогнутых кристаллических плоскостей атомов возможен эффект их отражения от этих плоскостей [4]. Такой эффект носит название эффекта объемного отражения от изогнутых кристаллических плоскостей атомов. Благодаря ему возможен поворот пучка на углы, не превышающие двух критических углов плоскостного каналирования  $\theta_c$ , причем отклонение пучка в этом случае осуществляется в сторону, противоположную направлению изгиба кристаллических плоскостей.

Учет некогерентных эффектов в рассеянии приводит к возможности взаимных переходов между различными режимами движения частицы в изогнутом кристалле. В целом картина движения частицы в изогнутом кристалле является довольно сложной. Поэтому при описании движения частицы в таком кристалле важную роль играет метод численного моделирования.

Таким образом, в зависимости от ориентации падающего пучка относительно кристаллических осей могут быть реализованы различные механизмы поворотов пучков быстрых заряженных частиц изогнутым кристаллом. Приведем сравнительный анализ этих механизмов поворотов пучков.

На рис.3–5 представлены результаты моделирования прохождения положительно (б) и отрицательно (в) заряженных частиц с зарядом  $|Q| = |e|$  и энергией 400 ГэВ через изогнутый кристалл кремния толщиной  $L = 1$  см при отмеченных выше начальных условиях входа пучка в кристалл относительно оси  $\langle 100 \rangle$ . Моделирование проводилось для пучка из 500 частиц, расходимость которого составляла  $\Delta\psi = \psi_c / 2$ . Изгиб кристалла осуществлялся путём изгибания оси  $z$ , параллельной оси  $\langle 100 \rangle$ , в направлении оси  $x$ , ортогональной плоскости  $(110)$ . Радиус изгиба составлял  $R = 40$  м. Жирные пятна на рис.3а, 4а и 5а соответствуют различным начальным условиям входа пучка в кристалл. Размер этих пятен соответствует расходимости частиц падающего пучка. Центры этих пятен соответствуют падению пучка вдоль оси  $\langle 100 \rangle$  (рис.3а), разориентации кристалла на углы  $\theta_x = 0$ ,  $\theta_y = 10\psi_c$  (рис.4а) и разориентации на углы  $\theta_x = 4\psi_c$ ,  $\theta_y = 10\psi_c$  (рис.5а). Точка на пересечении линий в правой части приведенных рисунков соответствует конечному направлению кристаллической оси  $\langle 100 \rangle$ . Точки на этих рисунках — результаты моделирования.

Представленные на рис.3 результаты моделирования иллюстрируют стохастический механизм поворота пучка изогнутым кристаллом, связанный с многократным рассеянием частиц на изогнутых цепочках атомов. Благодаря этому механизму практически все частицы пучка отклоняются в сторону изгиба кристаллической оси на углы, значительно превосходящие критический угол осевого каналирования (в рассматриваемом случае  $\psi_c = 20$  мкрад). При этом для положительно заряженных частиц (см. рис.3б) значительная часть частиц пучка вследствие многократного рассеяния на изогнутых цепочках атомов захватывается в плоскостные каналы и затем следует за изгибом этих плоскостей. Для отрицательно же заряженных частиц (см. рис.3в) такой

механизм захвата частиц в плоскостные каналы в рассматриваемом случае не реализуется. Вместе с тем, как показывает рис.3в, многократное рассеяние на изогнутых цепочках атомов приводит к значительному смещению пучка относительно его первоначального положения в сторону изгиба кристалла.

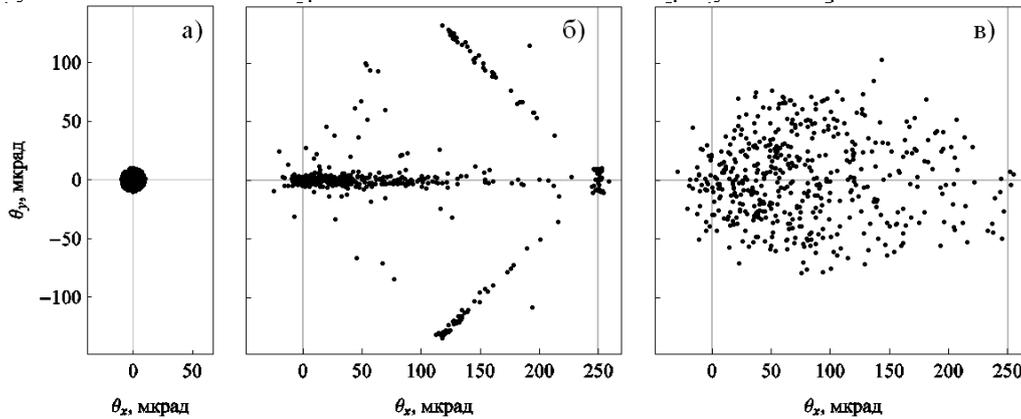


Рис.3. Угловые распределения заряженных частиц с энергией 400 ГэВ до а) и после б), в) прохождения 1 см изогнутого кристалла кремния в случае реализации стохастического механизма отклонения пучка изогнутым кристаллом; б) положительно заряженные частицы; в) отрицательно заряженные частицы

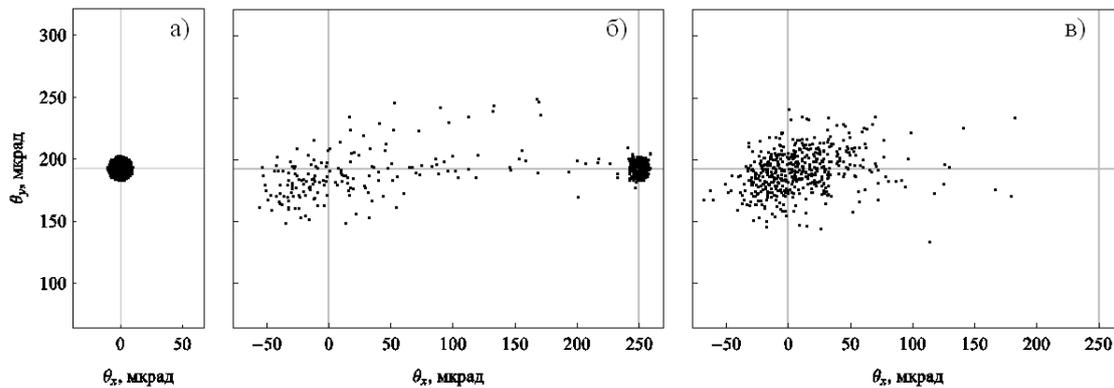


Рис.4. Угловые распределения заряженных частиц с энергией 400 ГэВ а) до и б), в) после прохождения 1 см изогнутого кристалла кремния в условиях плоскостного каналирования; б) положительно заряженные частицы; в) отрицательно заряженные частицы

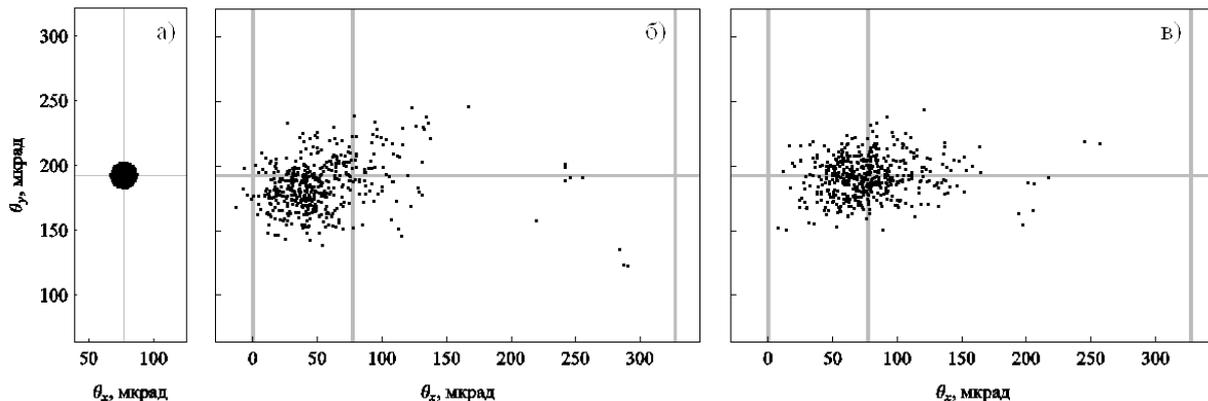


Рис.5. Угловые распределения заряженных частиц с энергией 400 ГэВ а) до и б), в) после прохождения 1 см изогнутого кристалла кремния в случае реализации механизма объёмного отражения; б) положительно заряженные частицы; в) отрицательно заряженные частицы

Начальные условия рис.4 соответствуют возможности захвата частиц при входе пучка в кристалл в плоскостные каналы. При этом значительная часть захваченных в канал положительно заряженных частиц (доля этих частиц составляет порядка 65% всех частиц падающего пучка) следует за изгибом кристаллических плоскостей и поворачивается на угол изгиба кристалла (см. рис.4б). Небольшой выход таких частиц из изогнутого плоскостного канала обусловлен некогерентным рассеянием на электронной подсистеме кристалла и на цепочках атомов, образующих кристаллические плоскости. Для отрицательно заряженных частиц (см. рис.4в) смещения пучка в рассматриваемом случае не происходит. Связано это, прежде всего, с интенсивным многократным рассеянием таких частиц на тепловых колебаниях атомов решетки, из-за которого движение

частиц в плоскостных каналах является весьма неустойчивым.

Представленные на рис.5 результаты моделирования соответствуют надбарьерному движению частиц при входе пучка в кристалл относительно плоскостей (110) под углом  $\theta_x \approx 8\theta_c$ , превышающим критический угол плоскостного каналирования  $\theta_c$  ( $\theta_c = 10$  мкрад). Для положительно заряженных частиц в этом случае имеет место эффект их отражения от изогнутых кристаллических плоскостей (см. рис.5б). При этом смещение большей части частиц пучка происходит на углы порядка  $\theta_c$  в направлении, противоположном направлению изгиба кристаллических плоскостей. Аналогичный эффект имеет место и для отрицательно заряженных частиц. Однако он выражен значительно слабее (см. рис.5в), чем для положительно заряженных частиц.

### СТОХАСТИЧЕСКИЙ МЕХАНИЗМ ПОВОРОТА ПУЧКОВ БЫСТРЫХ ЧАСТИЦ ИЗОГНУТЫМ КРИСТАЛЛОМ

С ростом толщины кристалла вследствие некогерентных процессов ориентационные эффекты в рассеянии частиц в изогнутом кристалле ослабевают. Это связано с выбыванием частиц из плоскостных и осевых каналов и нарушением условия (21). Особый интерес представляет в этом плане стохастический механизм поворота пучка, поскольку в этом случае с ростом толщины кристалла возможны переходы частиц из осевых режимов движения в плоскостные. Рассмотрим поэтому более подробно этот процесс.

На рис.6–7 представлены угловые распределения и горизонтальные профили этих угловых распределений (плотности частиц по углу  $\theta_x$ ) для пучков положительно и отрицательно заряженных частиц с энергией 400 ГэВ, рассеянных в изогнутом кристалле кремния с радиусом изгиба равным 40 м, при различных толщинах кристалла. Начальные условия и ориентация кристалла те же, что и на рис.3.

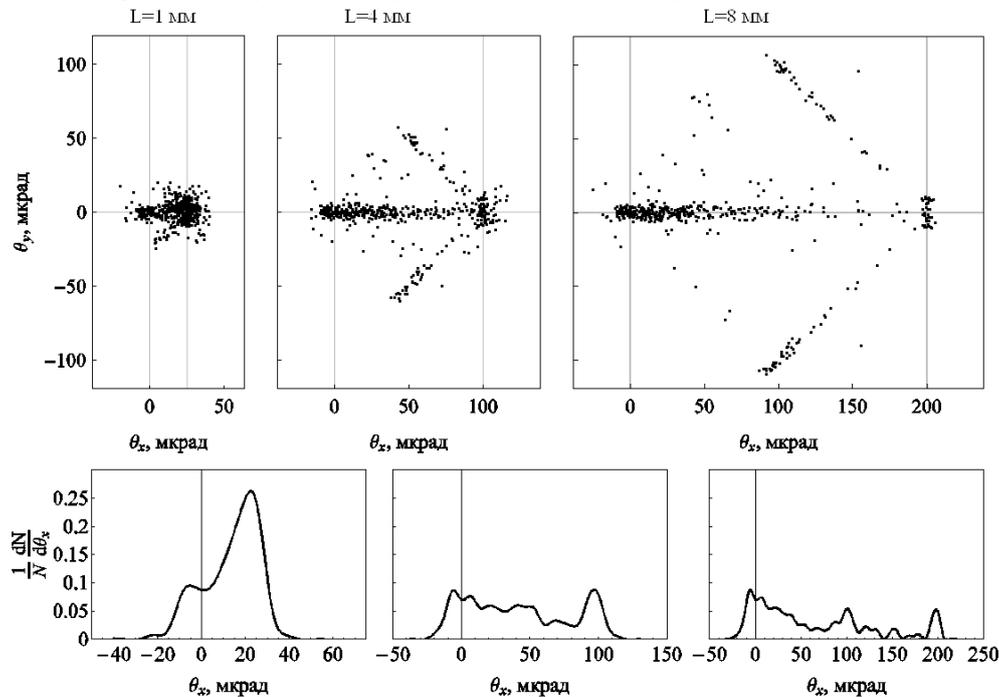


Рис.6. Эволюция с толщиной кристалла угловых распределений (верхние рисунки) и горизонтальных профилей этих распределений (нижние рисунки) для пучков положительно заряженных частиц с энергией 400 ГэВ в случае реализации стохастического механизма отклонения пучка изогнутым кристаллом

Результаты моделирования показывают, что в тонком кристалле значительная часть частиц падающего пучка следует за изгибом кристаллической оси, причём поворот пучка имеет место как для положительно, так и для отрицательно заряженных частиц. Данный эффект обусловлен стохастическим механизмом отклонения пучка частиц изогнутым кристаллом.

С ростом толщины кристалла для положительно заряженных частиц увеличивается доля частиц, выходящих из такого режима поворота пучка. Происходит это благодаря изгибу кристалла и некогерентным эффектам в рассеянии. При этом часть частиц пучка захватывается в плоскостные каналы (100) и (010) и следует за изгибом этих плоскостей. Кроме того, значительная часть частиц пучка, вышедших из стохастического механизма поворота, захватывается в плоскостной канал  $(1\bar{1}0)$  и устойчиво движется затем в этом канале. Для такого канала изгиб кристаллической плоскости отсутствует, поэтому движение частицы будет происходить в направлении, при котором произошел её захват в данный плоскостной канал. Благодаря этому происходит формирование углового распределения с плотным распределением частиц вдоль линии изгиба

кристаллической оси (линии с координатой  $\theta_y = 0$  на рис.6). Ширина этого углового распределения вдоль оси  $\theta_y$  порядка значения критического угла плоскостного каналирования для данной кристаллической плоскости  $\theta_c$ .

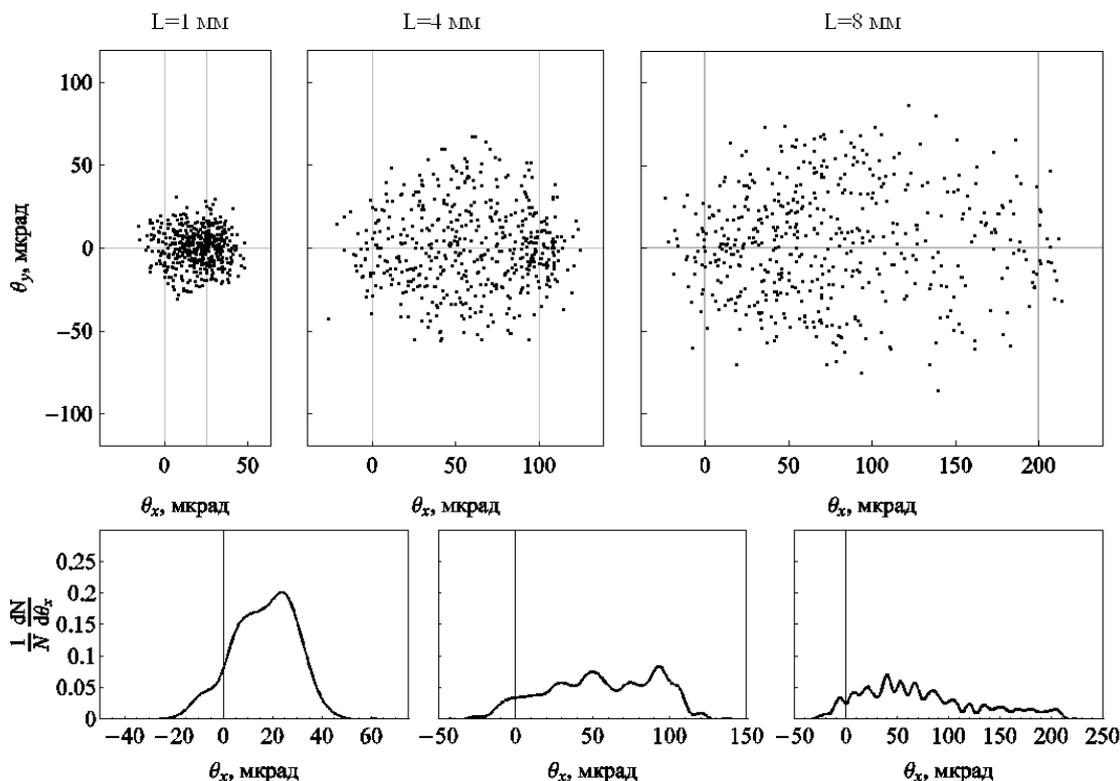


Рис.7. То же, что и на рис.6 для отрицательно заряженных частиц

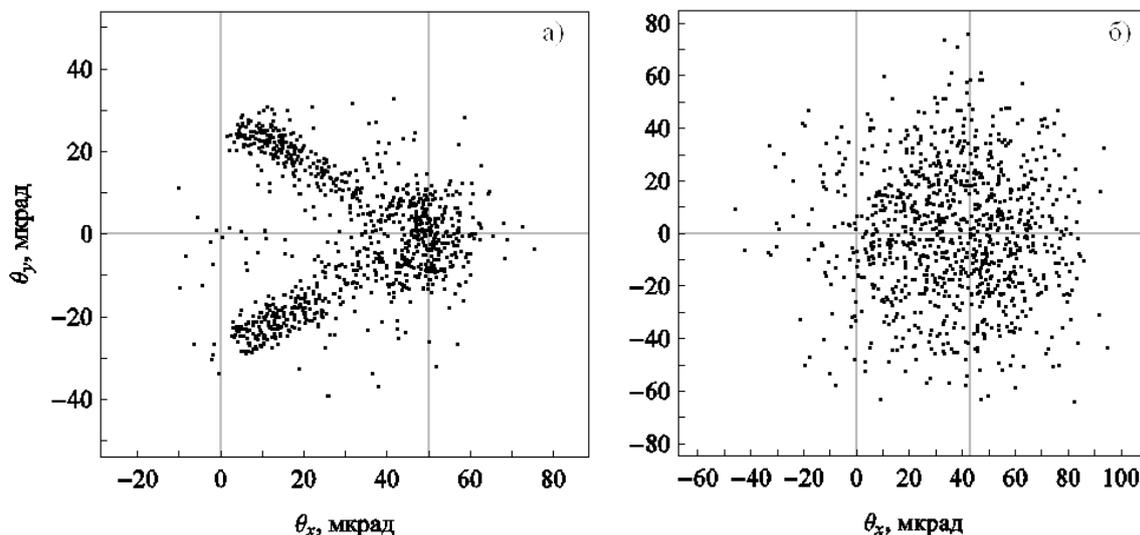


Рис.8. Угловое распределение а) протонов с энергией 400 ГэВ после прохождения 2-миллиметрового изогнутого кристалла кремния с радиусом кривизны 40 м и б)  $\pi^-$ -мезонов с энергией 150 ГэВ после прохождения 1,172-миллиметрового изогнутого кристалла кремния с радиусом кривизны 40 м

Таким образом, до захвата частицы в плоскостной канал  $(1\bar{1}0)$ , реализуется стохастический механизма поворота пучка, при котором частицы следуют за изгибом кристаллической оси. С ростом толщины кристалла такой механизм поворота пучка разрушается для все большей доли частиц пучка, что и приводит к формированию углового распределения вдоль линии  $\theta_x$  при  $\theta_y = 0$ .

Для отрицательно заряженных частиц, как показывает рис.7, эффект расщепления пучка на несколько пучков отсутствует. Это связано с тем, что движение таких частиц в плоскостных каналах в рассматриваемом

случае является весьма неустойчивым. Поворот пучка для таких частиц обусловлен стохастическим механизмом их многократного рассеяния на цепочках атомов при значениях угла  $\psi$  между импульсом частицы и текущим направлением кристаллической оси меньших, чем критический угол осевого каналирования  $\psi_c$ . С ростом толщины кристалла такой режим движения (для  $\psi < \psi_c$ ) разрушается для все большей части частиц пучка. При этом формирование углового распределения для таких частиц определяется особенностями их многократного рассеяния на цепочках атомов при  $\psi > \psi_c$  (см. [15,18]).

Возможность стохастического механизма отклонения положительно и отрицательно заряженных частиц высоких энергий изогнутым кристаллом была недавно подтверждена экспериментально на ускорителе ЦЕРН [19,20]. Результаты компьютерного моделирования при условиях экспериментов [19,20] представлены на рис.8. Результаты моделирования находятся в хорошем согласии с экспериментальными данными.

### ВЫВОДЫ

Приведенные результаты показывают, что динамика быстрых заряженных частиц в периодическом поле изогнутых цепочек атомов кристалла является весьма сложной. При этом в зависимости от начальных условий входа пучка в кристалл могут быть реализованы механизмы поворота пучка изогнутым кристаллом, связанные с плоскостным и осевым каналированием частиц в изогнутых кристаллах, отражением частиц от изогнутых кристаллических плоскостей атомов и стохастический механизм поворота пучка, связанный с некоррелированным многократным рассеянием частиц на изогнутых цепочках атомов. На основе изложенного метода численного моделирования движения частиц в изогнутых кристаллах удается с единой позиции рассмотреть все эти механизмы поворота пучков и провести сравнительный их анализ.

Анализ полученных результатов показывает, что для положительно заряженных частиц весьма эффективным является механизм поворота пучка, связанный с явлением плоскостного каналирования частиц в изогнутых плоскостных каналах. Большая часть частиц пучка, захваченных в плоскостные каналы, в этом случае может отклоняться на углы, значительно превышающие критический угол плоскостного каналирования. Для отрицательно заряженных частиц такой механизм поворота пучка не реализуется в рассматриваемом диапазоне энергий частиц. Причина этого в быстром выбывании частиц из плоскостных каналов, связанным с их интенсивным рассеянием на тепловых колебаниях атомах решетки. В этом основная причина того, что данный механизм поворота пучка для отрицательно заряженных частиц экспериментально не наблюдался. Это, однако, не исключает того, что при более высоких энергиях, недостижимых на существующих ускорителях, он может быть реализован.

При отражении же пучка положительно заряженных частиц от изогнутых кристаллических плоскостей атомов поворот пучка возможен на углы, не превышающие двух критических углов плоскостного каналирования независимо от толщины кристалла. Причем поворот пучка в этом случае осуществляется в направлении, противоположном направлению изгиба кристалла. Аналогичный эффект возможен и для отрицательно заряженных частиц. Эффективность поворота пучка таких частиц, однако, как показывают результаты моделирования, гораздо слабее, чем для пучка положительно заряженных частиц.

Новые возможности открываются при реализации условий стохастического механизма поворота пучка изогнутым кристаллом. При этом для положительно заряженных частиц появляется возможность расщепления пучка на несколько пучков, движущихся в различных направлениях. Кроме того, открываются новые возможности в преобразовании круглых пучков в узкие плоские пучки с расходимостью частиц по углам порядка критического угла плоскостного каналирования. Для отрицательно же заряженных частиц благодаря этому механизму появляется возможность эффективного поворота пучка на углы значительно превышающие критический угол осевого каналирования.

### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Линдхард Й. Влияние кристаллической решетки на движение быстрых заряженных частиц // УФН. – 1969. – Т.99, вып. 2. – С.249–296.
2. Ахизер А.И., Шульга Н.Ф. Электродинамика высоких энергий в веществе. – М.: Наука, 1993. – 344 с.
3. Tsyganov E.N., 1976 Preprint Fermilab TM-682, TM-684.
4. Taratin A.M., Vorobiev S.A. "Volume Reflection" of High-Energy Charged Particles in Quasi-Channeling States in Bent Crystals // Phys. Lett. A. – 1987. – Vol.119. – P.425–431.
5. Гриненко А.А., Шульга Н.Ф. О повороте пучка заряженных частиц высоких энергий при рассеянии на цепочках атомов изогнутого кристалла // Письма в ЖЭТФ. – 1991. – Т.54. – С.520–524.
6. Bak J F, Jenesen P R et al. Detailed Investigation of the Channeling Phenomena Involved in Bending of High-Energy Beams by Means of Crystals // Nucl. Phys. B. – 1984. – Vol.242. – P.1–30.
7. Biryukov V.M., Chesnokov Yu.A., Kotov V.I. Crystal Channeling and its Application at High-Energy Accelerators. – Berlin: Springer, 1997. – 219 p.
8. Таратин А.М. Каналирование частиц в изогнутом кристалле // ЭЧАЯ. – 1998. – Т.29. – С.1063–1118.
9. Ахизер А.И., Шульга Н.Ф., Трутен В.И., Гриненко А.А., Сыщенко В.В. Динамика заряженных частиц высоких энергий в прямых и изогнутых кристаллах // УФН. – 1995. – Т.165. – С.1165–1192.
10. Greenenko A.A., Shul'ga N.F. Passage of fast charged particles through bent crystals and nanotubes // Nucl. Instr. Meth. B. –

2002. – Vol.193. – P.133–138.
11. Базылев В.А., Жеваго Н.К. Излучение быстрых частиц в веществе и во внешних полях. – М.: Наука, 1987. – 272 с.
  12. Doyle P.A., Turner P.S. Relativistic Hartree-Fock X-ray and Electron Scattering Factor // *Acta Cryst. A.* – 1968. – Vol.24. – P.390–397.
  13. Dudarev S.L., Peng L.-M., Whelan M.J. On the Doyle-Turner representation of the optical potential for RHEED calculations // *Surface Science* – 1995. – Vol.330. – P.86-100.
  14. Корн Г., Корн Т. Справочник по математике. – М.: Наука, 1974. – 832 с.
  15. Akhiezer A.I., Truten' V.I., Shul'ga N.F. Dynamical chaos in the motion of charged particles through a crystal // *Phys. Rep.* – 1991. – Vol.203. – P.289-343.
  16. Gemmell D.S. Channeling and related effects in the motion of charged particles through crystals // *Rev. of Mod. Phys.* – 1974. – Vol.46. – P.129-227.
  17. Тер-Микаелян М.Л. Влияние среды на электромагнитные процессы при высоких энергиях. – Ереван: Изд-во АН АрмССР, 1969. – 457 с.
  18. Шульга Н.Ф., Трутень В.И., Фомин С.П. Ориентационные эффекты при взаимодействии частиц высокой энергии с цепочками атомов кристалла // *ЖЭТФ.* – 1984. – Т.87. – С.250-263.
  19. Scandale W., Vomiero A. et al. High-efficiency Deflection of High-Energy Protons through Axial Channeling in a Bent Crystal. // *Phys. Rev. Lett.* – 2008. – Vol.101. – 164801.
  20. Scandale W., Vomiero A. et al. High-efficiency deflection of high-energy negative particles through axial channeling in a bent crystal. // *Phys. Lett. B.* – 2009. – Vol.680. – P.301–304.