

УДК 538.9

## МЕХАНИЗМЫ ОБЪЕМНОГО ЗАХВАТА БЫСТРЫХ ЗАРЯЖЕННЫХ ЧАСТИЦ В ИЗОГНУТОМ МОНОКРИСТАЛЛЕ

© 2025 г. Е. А. Мазур<sup>a, b, \*</sup>

<sup>a</sup>Национальный исследовательский центр “Курчатовский институт”, Москва, 123182 Россия

<sup>b</sup>Национальный исследовательский ядерный университет МИФИ, Москва, 115409 Россия

\*e-mail: eugen\_mazur@mail.ru

Поступила в редакцию 15.06.2024 г.

После доработки 28.08.2024 г.

Принята к публикации 28.08.2024 г.

Изучен эффект объемного захвата быстрых заряженных частиц в изогнутом кристалле. Исследованы потери поперечной энергии, эффект зависания и критерий объемного захвата быстрых заряженных частиц. Рассмотрены возможные механизмы объемного захвата: потери поперечной энергии вследствие возбуждения кристалла быстрой заряженной частицей (протоном, лептоном); многократное рассеяние частиц в изогнутом кристалле; упругое рассеяние и дифракция частиц в изогнутом кристалле. Показано, что в области зависания отношение скоростей поперечных и продольных потерь энергии быстрых заряженных частиц существенно увеличивается по сравнению с отношением значений продольной и поперечной энергии и по порядку величины равно отношению недиагональных элементов обратной матрицы диэлектрической проницаемости к диагональным. Установлено, что за эффект объемного захвата быстрых протонов (лептонов) отвечают процессы дифракции в изогнутом кристалле, а также эффекты затухания недиагональных элементов матрицы плотности частиц. Предложенный дифракционный механизм основан на учете квантового когерентного рассеяния быстрого протона (лептона) в изогнутом кристалле.

**Ключевые слова:** канализование, объемный захват, матрица диэлектрической проницаемости, недиагональные элементы, плазмон, фонон, резонансная генерация, кристалл, ориентированная частица.

**DOI:** 10.31857/S1028096025030021, **EDN:** EKSVDY

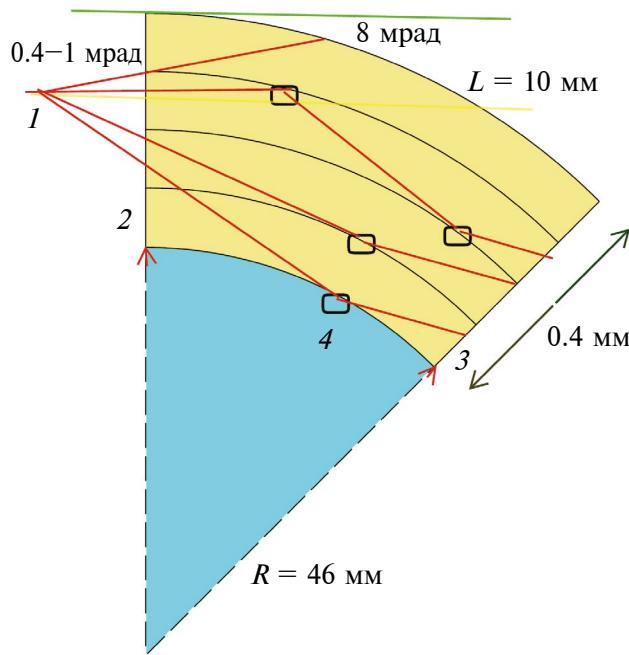
### ВВЕДЕНИЕ

В настоящее время интенсивно исследуют проблемы, связанные с использованием изогнутого кристалла для поворота пучков высокоэнергетических заряженных частиц [1]. В [2] развита классическая, а в [3] — квантовая теория канализирования быстрых заряженных частиц в изогнутом кристалле. В [4, 5] установлена формула для локальных потерь энергии частицы:

$$\begin{aligned} -\frac{dE}{dx}(\mathbf{r}) = & \frac{2\pi Ze^2}{v} \int \frac{d^3\mathbf{q}d\omega}{q^2} (\mathbf{qv}) \times \\ & \times \sum_{\mathbf{G}} \text{Im}\epsilon^{-1}(\mathbf{q}, \mathbf{q} + \mathbf{G}, \omega) \delta(\omega - \mathbf{qv}) \exp(i\mathbf{Gr}), \end{aligned} \quad (1)$$

где  $\text{Im}\epsilon^{-1}$  — мнимая часть обратной матрицы диэлектрической проницаемости кристалла;  $Ze$  и

$v$  — соответственно, заряд и скорость быстрой частицы;  $\mathbf{G}$  — вектор обратной решетки;  $\omega$  и  $q$  — переданные кристаллу импульс и энергия быстрых заряженных частиц в единицах  $\hbar = 1$ . Теория потерь энергии квантовой канализированной частицы развита в [6]. В [7–10] осуществлен эксперимент по объемному захвату широкого пучка быстрых заряженных частиц в режиме канализирования в изогнутом кристалле. Основная идея заключается в том, что частица может быть захвачена в режиме канализирования в областях кристалла, где ее траектория проходит по касательной к изогнутым кристаллографическим плоскостям (рис. 1). Это можно использовать для увеличения эффективности поворота пучка и коллимации широких пучков быстрых частиц. В [11, 12] отмечена и исследована важная роль “зависания” быстрой заряженной частицы над



**Рис. 1.** Схема эксперимента по захвату в режим канализирования в объеме изогнутого кристалла: 1 — пучок протонов; 2 — входной торец кристалла; 3 — выходной торец кристалла; 4 — области захвата в режиме канализирования в объеме кристалла;  $L$  — длина по пучку;  $R$  — радиус изгиба кристалла.

изогнутой кристаллографической плоскостью вблизи точки обращения траектории при объемном захвате. Роль эффектов многократного рассеивания быстрой заряженной частицы при объемном захвате изучена в [11]. Проведено со-поставление роли различных механизмов в процессе объемного захвата. Тем не менее до настоящего момента последовательная и исчерпывающая теоретическая интерпретация эффекта отсутствует. Рассмотрим возможные механизмы объемного захвата: потери поперечной энергии вследствие возбуждения кристалла быстрым заряженным протоном; многократное рассеяние быстрой заряженной частицы в изогнутом кристалле; ее упругое рассеяние в изогнутом кристалле; рассеяние на дискретных особенностях в поле потенциала; неупругое отражение частицы от изогнутой кристаллографической плоскостью.

## ОБЪЕМНЫЙ ЗАХВАТ В ПРИБЛИЖЕНИИ “ВЯЗКОЙ ПЛОСКОСТИ”

Движение быстрой заряженной частицы с кинетической энергией  $K \approx 1$  ГэВ можно считать классическим, пренебрегая эффектами дифракции. Рассмотрим уравнение движения в координатном пространстве на потенциаль-

ном рельефе изогнутой кристаллографической плоскости  $U_{\text{cr}}(r)$  с учетом сил динамического трения  $F_K(r)$ , действующих на частицу при генерации ею одночастичных и коллективных возбуждений в кристалле (приближение вязкой плоскости):

$$m\ddot{r} = -\nabla_r U_{\text{cr}}(r) + F_C(r), \quad (2)$$

где  $m$  — релятивистская масса частицы. В уравнении (2) вклад в тормозящую “кильватерную” силу, действующую на частицу, вносят процессы возбуждения плазмонов [5, 6], внутренних электронов и валентных электронно-дырочных пар [5, 6], фононов, акустических плазмонов [13]. Кроме того, происходит процесс генерации виртуальных пар Френкеля в треке пролетающей частицы, влияющий на процесс объемного захвата. Особенно интенсивно все эти процессы идут при зависании быстрой заряженной частицы над изогнутой кристаллографической плоскостью.

При плотностях электронов  $n \approx 10^{23}$  см<sup>-3</sup>, характерных для валентных электронов полупроводника, энергия плазона составляет  $\hbar\omega_p = 16$  эВ (Ge) или  $\hbar\omega_p = 17$  эВ (Si) [14]. Частота таких плазмонов  $\omega_p \sim 2 \times 10^{16}$  рад/с, а длина волны  $\lambda_p = \frac{2\pi c}{\omega_p} \approx 0.15$  мкм. Затухание плазмонов

в кристалле обусловлено взаимодействием с колебаниями решетки (фононами), примесями и другими неоднородностями. Для получения явного вида  $F_{\perp C}(r)$  — радиальной составляющей силы торможения, действующей на быструю заряженную частицу, и для вычисления потерь поперечной энергии учтем, что в отдельном акте взаимодействия частицы со средой полная передача энергии классической частицы  $qv / m$  разделяется на потерю поперечной и продольной составляющих  $q_{\perp}v_{\perp} / m$  и  $q_{\parallel}v_{\parallel} / m$  соответственно. Для локальных поперечных потерь энергии быстрой заряженной частицы при прохождении области поля потенциала с резко неоднородным профилем электронной плотности в области зависания частицы над изогнутой кристаллографической плоскостью в формализме, учитывающем неоднородность электронной плотности [6] и, следовательно, недиагональные по импульсу элементы матрицы диэлектрической проницаемости, на расстоянии между отражающей и предшествующей отражению изогнутыми плоскостями получено выражение:

$$\begin{aligned} -dE_{\perp}(\mathbf{r}) = & \frac{2\pi Ze^2}{v} \int \frac{d^3\mathbf{q}}{q^2} \int d\omega \hbar \mathbf{qv}(t) \sqrt{RR_0} \times \\ & \times \sum_{\mathbf{G}} \text{Im} \epsilon^{-1}(\mathbf{q}, \mathbf{q} + \mathbf{G}, \omega) \delta(\omega - \mathbf{qv}(t)) \times , \quad (3) \\ & \times \exp(i\mathbf{Gr}(t)), \end{aligned}$$

где  $\mathbf{v}$  — полная скорость частицы,  $R$  — радиус изгиба кристалла,  $R_0$  — характерный поперечный размер отражающей кристаллографической плоскости. Анализ формул для  $F_{\perp C}$  и  $F_{\parallel C}$  показывает, что в области зависания отношение скоростей поперечных и продольных потерь существенно увеличивается по сравнению с отношением  $E_{\perp} / E_{\parallel}$  и по порядку величины равно  $\text{Im} \epsilon_{\text{nondiag}}^{-1} / \text{Im} \epsilon_{\text{diag}}^{-1}$ , т.е. отношению недиагональных элементов обратной матрицы диэлектрической проницаемости к диагональным. Таким образом, в области обращения движения частицы в радиальном направлении потери поперечной энергии резко возрастают. В векторном виде с учетом сил динамического трения  $F_C$  в цилиндрической системе координат уравнение движения быстрой заряженной частицы (2) записывается в виде:

$$\begin{aligned} (\ddot{r} + r\ddot{\phi}^2)\mathbf{i}_1 + (2\dot{r}\dot{\phi} + r\ddot{\phi})\mathbf{i}_2 = \\ = -\frac{1}{m} \frac{\partial U_{\text{cr}}}{\partial r} \mathbf{i}_1 + \frac{1}{m} F_{\parallel C} \mathbf{i}_2 + \frac{1}{m} F_{\perp C} \mathbf{i}_1, \quad (4) \end{aligned}$$

где  $\mathbf{i}_1$  — орт радиус-вектора частицы, а  $\mathbf{i}_2$  — перпендикулярный ему орт. Учитывая, что продольная составляющая сил динамического трения  $F_{\parallel C}$  слабо сказывается на потере продольного импульса высокогенеретической быстрой заряженной частицы, точно интегрируем уравнение (4) в проекции на орт  $\mathbf{i}_2$ , получая в результате

$$mr^2\dot{\phi} = M(r_0, V_0), \quad (5)$$

где момент импульса налетающей частицы  $M = P_{0\parallel}r_0$  есть функция начальных координат  $r_0$  и импульсов частицы. При больших пробегах быстрой заряженной частицы в изогнутом кристалле необходимо учитывать отклонения от закона сохранения (5). К несохранению момента импульса приведет и отклонение потенциала кристаллографических плоскостей от усредненного значения. С учетом (5) уравнение радиального движения быстрой заряженной частицы имеет вид:

$$m\ddot{r} = -\nabla_r U_{\text{cr}}(r) + F_{\perp C}(r) + M^2 / mr^3. \quad (6)$$

При учете поперечной составляющей сил торможения  $F_{\perp C}$  поперечная энергия быстрой заря-

женной частицы, связанная с ее движением по-перек изогнутой кристаллографической плоскости, более не сохраняется [11]. В выражении (6) эффективная “сила” за счет центробежного барьера  $F_{\text{CENT}} = M^2 / mr^3$  крайне слабо меняется при движении частицы в кристалле, что позволяет аппроксимировать такую силу константой  $F = M^2 / mr^3$ . Сила  $F_{\text{cr}}(r) = -\nabla_r U(r)$ , действующая на быструю заряженную частицу со стороны изогнутой кристаллографической плоскости, является периодической функцией радиальной координаты  $r$  с периодом, равным межплоскостному расстоянию  $a$ ,  $F_{\text{cr}}(r+a) = F_{\text{cr}}(r)$ . Поперечная тормозящая сила может быть записана в виде  $F_{\perp C} = -\beta\dot{r}$ , где  $\beta$  — функция полной скорости частицы  $V_0$ , практически не зависящая от радиальной скорости  $\dot{r}$ , однако весьма резко зависящая от радиального положения быстрой частицы относительно изогнутых кристаллографических плоскостей. Ограничимся для простоты рассмотрением поведения частицы в потенциальной яме вблизи точки обращения ее траектории в кристалле, т.е. в области вблизи поворота по  $r$ . В этой области потенциальную яму можно считать параболической. Таким образом, вблизи поворота частицы уравнение (6) сводится к виду:

$$m\ddot{r} = -Kr - \beta\dot{r} - F, \quad (7)$$

где  $\partial U_{\text{cr}} / \partial r \approx (U_0 / a) \sin(r/a) \approx (U_0 / a^2)r$ , откуда получаем  $K = \frac{U_0}{a^2}$  ( $U_0 \approx 20$  эВ — глубина потенциальной ямы между изогнутыми кристаллографическими плоскостями):

$$F = M^2 / mr^3 \approx mV_0^2 / R \approx 2K_0 / R, \quad (8)$$

$K_0$  — полная кинетическая энергия быстрой заряженной частицы при влете в кристалл,  $R$  — радиус кривизны кристалла. Из (1) вытекает выражение для радиальной составляющей силы, действующей на быструю частицу, генерирующую при пролете электронные возбуждения в кристалле:

$$\begin{aligned} F_{\perp K}(\mathbf{r}) = & -\frac{dE_{\perp}}{dr}(\mathbf{r}) = \frac{2\pi Ze^2}{v} \int \frac{d^3\mathbf{q}}{q^2} \int d\omega \hbar q_{\perp} \times \\ & \times \sum_{\mathbf{G}} \text{Im} \epsilon^{-1}(\mathbf{q}, \mathbf{q} + \mathbf{G}, \omega) \delta(\omega - \mathbf{qv}(t)) \times \\ & \times \exp(i\mathbf{Gr}(t)) v_r(t), \quad (9) \end{aligned}$$

где  $q_{\perp}$  — радиальная составляющая передачи импульса кристаллу быстрой заряженной частицей, так что зависящий от радиального положения частицы коэффициент  $\beta[\mathbf{r}(t)]$  записывается в виде:

$$\beta[\mathbf{r}(t)] = \frac{2\pi Ze^2}{v} \int \frac{d^3\mathbf{q}}{q^2} \int d\omega \hbar q_\perp \sum_G \text{Im}\epsilon^{-1} \times \\ \times (\mathbf{q}, \mathbf{q} + \mathbf{G}, \omega) \delta(\omega - \mathbf{q}\mathbf{v}(t)) \exp(i\mathbf{G}\mathbf{r}(t)). \quad (10)$$

Суммирование по векторам обратной решетки в выражении для  $\beta[\mathbf{r}(t)]$  приводит к резкому возрастанию коэффициента  $\beta$  при зависании быстрой заряженной частицы над отражающей изогнутой кристаллографической плоскостью. Для определения коэффициента  $\beta$  в уравнении (7) воспользуемся выражением для потерь энергии протона в электронной жидкости [15]:

$$\frac{dE}{dl} = \frac{2}{3\pi} \frac{2Ry}{a_0} \frac{1}{\alpha} ug(u, \alpha), \quad (11)$$

$$\text{где } g(u, \alpha) = \ln(3\pi n^2 / \alpha) / u^3, u = \frac{V}{V_F}, \alpha = e^2 / \hbar V_F.$$

Применимость выражения (11) к описанию торможения быстрой заряженной частицы в полупроводниковом кристалле объясняется “квазиметалличностью” такого полупроводника, как кремний, в котором плотность “квазиметаллических” валентных электронов  $n \approx 2 \times 10^{23} \text{ см}^{-3}$ , а соответствующая энергия Ферми  $\epsilon_F \approx 10 \text{ эВ}$ ,  $V_F \approx \sqrt{2\epsilon_F / m_{\text{эл}}} \approx 1.6 \times 10^6 \text{ м/с}$ , а  $u \approx V_0 / V_F \approx 10^2$ .

Для  $\alpha$  справедливо

$$\alpha = e^2 / \hbar V_F = (e^2 / \hbar c)(c / V_F) \approx (1 / 137)10^2 \approx 1.$$

Подставляя найденные параметры в уравнение (11), для полных потерь энергии  $K_0 \approx 1 \text{ ГэВ}$  получаем:

$$(dE / dl) \sim 10^{-3} \text{ эВ/}\text{\AA}. \quad (12)$$

При прохождении быстрым протоном расстояния между отражающей и предшествующей отражению изогнутыми кристаллографическими плоскостями с учетом его зависания над плоскостью на продольной длине  $\sqrt{RR_0}$  потери поперечной энергии протона составляют  $(dE)_\perp = (dE)_\parallel = a(dE / dl)\sqrt{RR_0} / a$ , тогда коэффициент  $\beta$  в уравнении (7) определится из соотношения:

$$\beta = (dE / dl)\sqrt{RR_0} / v_r a, \quad (13)$$

где  $m$  — релятивистская масса протона, отличающаяся на лоренц-фактор порядка двух от массы покоя протона. Решая уравнение (7) с начальными условиями  $\dot{r}(0) = V_{0\perp}$  и  $r(0) = 0$  (здесь начало

отсчета выбрано на изогнутой плоскости, предшествующей отражающей), для  $r(t)$  получаем:

$$r(t) = (F/K) \times \\ \times \left\{ -1 + \exp\left(-\frac{\beta t}{m}\right) \left[ \cos \omega t - \sin \omega t \left( \frac{KV_0}{F\omega} + \frac{\beta}{m\omega} \right) \right] \right\}, \quad (14)$$

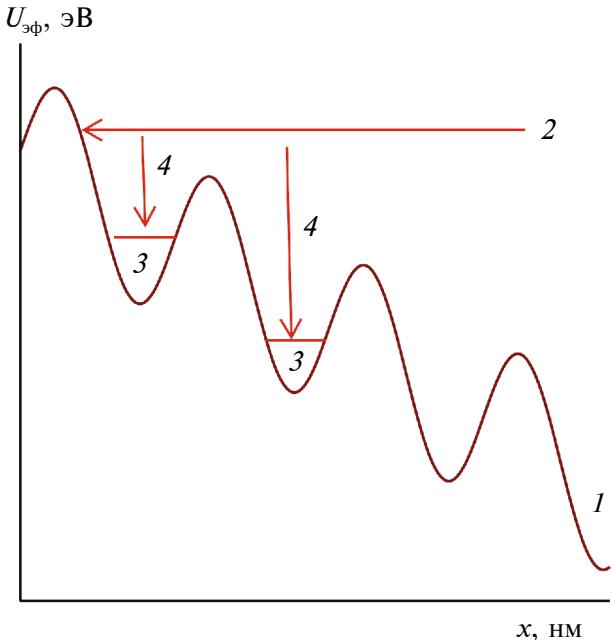
где  $\omega = (K / m - \beta^2)^{1/2}$ . Условие отсутствия объемного захвата — возврат протона на некоторое время к исходной радиальной координате  $r(t_0) = 0$ . Невозможность такого возврата будет свидетельствовать о факте объемного захвата протона. Таким образом, условием объемного захвата будет решение следующего уравнения относительно  $t_0$ :

$$(1 + \theta^2)^{1/2} \cos(\omega t_0 + \arctg \theta) = \exp(\beta t_0 / m), \quad (15)$$

где

$$\theta = KV_0 / F\omega + \beta / m\omega. \quad (16)$$

Учитывая, что при найденных ранее параметрах  $K, F, \beta \theta \ll 1$ , и решая уравнение (15) при  $\theta \ll 1$ ,



**Рис. 2.** График эффективного потенциального рельефа в изогнутом кристалле вблизи точки обращения траектории заряженной быстрой частицы: 1 — потенциальный рельеф в изогнутом кристалле; 2 — начальное энергетическое состояние частицы; 3 — квантовые переходы частицы; 4 — конечные энергетические состояния частицы.

для доли протонов  $\mu$ , захватываемых в связанное состояние при отражении от мягкой плоскости, получаем:

$$\eta = m\tilde{V}_{0\perp}^2/2\Delta U = 8\pi^2(\beta a^2/TU_0)(E_0/U_0)(a/R), \quad (17)$$

где  $m\tilde{V}_{0\perp}^2/2$  — потеря кинетической энергии частицей при отражении от мягкой плоскости,  $\Delta U$  — разность потенциалов между двумя соседними изогнутыми плоскостями,  $\Delta U = Fa = E_0a/R$  (рис. 2),  $T = 2\pi/\omega = 2\pi(ma^2/8U_0)^{1/2} \approx 2 \times 10^{-14}$  с. Подстановка найденных выше параметров в уравнение (17) дает

$$\eta = m\tilde{V}_{0\perp}^2/2\Delta U \approx 10^{-1}. \quad (18)$$

Таким образом, в модели “мягкой” плоскости общее количество протонов  $\eta \sim 10^{-1}$  может быть захвачено в связанное состояние, что, безусловно, может объяснить результат эксперимента [7–10], где получено значение  $\eta \sim 0.09$ . Найденное значение  $\eta \sim 10^{-1}$  дает также оценку вклада неупругих процессов в эффект объемного захвата. Такой скорости потерь энергии достаточно для сброса разности потенциалов между двумя соседними плоскостями вследствие изгиба  $\Delta U = M^2a/mR^3 \sim 2K_0a/R \sim 1$  эВ в условиях, приведенных

в [7]. То есть этого достаточно для объемного захвата, поскольку сброс попечных потерь быстрой заряженной частицы, рассчитанный по уравнениям (14)–(18) для энергии частицы  $K_0 = 1$  ГэВ, на радиальном расстоянии  $a = 3 \times 10^{-10}$  м составит  $\Delta E \approx 2$  эВ.

## МНОГОКРАТНОЕ РАССЕЯНИЕ И ОБЪЕМНЫЙ ЗАХВАТ БЫСТРЫХ ЗАРЯЖЕННЫХ ЧАСТИЦ

Рассмотрим теперь роль многократного рассеяния быстрой заряженной частицы на ядрах и электронах изогнутого кристалла как возможный механизм объемного захвата. Такие процессы описываются функцией распределения  $f(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t)$  быстрых заряженных частиц в кристалле типа Фоккера–Планка [16]. Строгий переход к диффузионному приближению типа Фоккера–Планка в кинетическом уравнении для диагональных элементов матрицы плотности быстрых заряженных частиц приведен в [17]. Уравнение Фоккера–Планка для функции распределения частиц в фазовом пространстве  $f(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t)$  можно записать в виде [18]:

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \frac{p}{m} \frac{\partial f}{\partial r} + p \nabla_p f = \frac{\overline{\Delta P_x^2}}{2\Delta t} \left[ \frac{\partial^2 f}{\partial P_x^2} + \frac{\partial^2 f}{\partial P_y^2} \right] + \frac{\overline{\Delta P_z^2}}{2\Delta t} \frac{\partial^2 f}{\partial P_z^2}. \quad (19)$$

Здесь ось  $z$  выбрана вдоль направления налетающего пучка. Переходя к новым переменным:

$$E_\perp = (P_r^2 + P_y^2)/2m + U(r) + M_y^2/2mr^2, \quad (20)$$

$$M_y = rP_\phi, r = (x^2 + y^2)^{1/2}, \phi = \arctg(y/x),$$

где  $P_r, P_\phi$  — проекции импульса частицы на орты цилиндрической системы координат, связанной с центром кривизны кристалла, получаем в стационарном по времени приближении:

$$\begin{aligned} \frac{P}{m} \frac{\partial f}{\partial r} + \left[ -\frac{\partial U_{cr}(r)}{\partial r} + \frac{M^2}{mr^3} \right] \frac{\partial f}{\partial P_\perp} = \\ = \frac{\overline{\Delta P_y^2}}{2\Delta t} \frac{\partial^2 f}{\partial P_y^2} + \frac{\overline{\Delta P_y^2}}{2\Delta t} \times \\ \times \left[ r^2 \frac{\partial^2 f}{\partial M_y^2} + \frac{\partial}{\partial E_\perp} \left( V_\perp^2 \frac{\partial f}{\partial E_\perp} \right) + \frac{1}{m} \frac{\partial}{\partial M_y} \times \right. \\ \left. \times \left( M_y \frac{\partial f}{\partial E_\perp} \right) + \frac{1}{M_y} \frac{\partial}{\partial E} \left( M_y \frac{\partial f}{\partial M_y} \right) \right]. \end{aligned} \quad (21)$$

В уравнении (21) пренебрегли разбросом продольного импульса, а следовательно, и членом  $\left( \frac{\Delta P_z^2}{\Delta t} - \frac{\Delta P_x^2}{\Delta t} \right) \frac{\partial^2 f}{\partial P_z^2}$  в уравнении (19). Учтено, что лапласиан  $\partial^2 / \partial P_x^2 + \partial^2 / \partial P_y^2 + \partial^2 / \partial P_z^2$  трансформируется в сумму вторых производных  $\partial^2 / \partial P_\phi^2 + \partial^2 / \partial P_y^2 + \partial^2 / \partial P_\perp^2$  при переходе к проекциям импульса на орты цилиндрической системы координат. Отметим, что выбранные новые переменные  $E_\perp$  и  $M_y$  являются интегралами движения при прохождении частицы через изогнутый кристалл [11]. Здесь  $P_\perp = (2m)^{1/2} \times \sqrt{E_\perp - M_y^2/2mr^2 - U(r)}$ , а  $V_\perp = P_\perp/m$ . Отметим теперь, что  $\Delta M_y^2/2\Delta t = \frac{r(\Delta P_\phi)^2}{2\Delta t}$ , т.е. соответствует среднеквадратичному изменению продольного импульса частицы  $P_\phi$ , существенно меньшему, нежели изменение попечного импульса  $(\Delta P_\perp)^2/2\Delta t$ . Поэтому диффузией по моменту импульса  $M$  в изогнутом кристалле в первом приближении можно пренебречь.

В результате уравнение (21) принимает вид:

$$\begin{aligned}
 & P_\phi \frac{1}{r} \frac{\partial f}{\partial \phi} (r, \phi, E_\perp, P_y) + P_\perp \frac{\partial f}{\partial r} + \\
 & + V_\perp \left( -\frac{\partial U_{cr}}{\partial r} + \frac{M^2}{mr^3} \right) \frac{\partial f}{\partial E_\perp} = \\
 & = \frac{\overline{\Delta P_y^2}}{2\Delta t} \frac{\partial^2 f}{\partial P_y^2} + \frac{\overline{\Delta P_x^2}}{2\Delta t} \frac{\partial}{\partial E_\perp} \left( V_\perp^2 \frac{\partial f}{\partial E_\perp} \right).
 \end{aligned} \quad (22)$$

Условию захвата частицы в канал будет соответствовать часть распределения с отрицательной поперечной энергией  $E_\perp$ . Захват в канал либо вы свобождение частицы из канала не изменяет количества интегралов движения, как это происходит, например, в случае осевого канализования в прямом кристалле [19], что позволяет решать уравнение (22) как в надбарьерной, так и в подбарьерной областях, не прибегая к сшивке двух решений. Вклад многократного рассеяния вдоль изогнутых плоскостей кристалла  $\sim \partial^2 f / \partial P_y^2$  в уравнении (22) может быть опущен как не приводящий к существенному изменению вероятности захвата. Возможно и альтернативное описание пространственной переменной в выражении (21). В цилиндрической системе координат с центром, помещенным в точечный широкоугловой источник (рис. 1), левая часть уравнения (22) может быть записана в виде:

$$V \frac{\partial f}{\partial r} (s, \alpha, E_\perp) V_s \partial f / \partial s + V_\alpha \frac{1}{R_0 + s} \partial f / \partial \alpha, \quad (23)$$

где  $s$  — путь, проходимый частицей в кристалле по направлению, задаваемому углом  $\alpha$ . В случае не очень широких пучков вкладом  $\partial f / \partial \alpha$  в (23) можно пренебречь. Тем не менее зависимость от угла в решении уравнения для  $f$  сохраняется как функция углового распределения. Уравнение для функции распределения (19) с учетом уравнения (22) примет вид:

$$\frac{\partial f}{\partial S} (S, E_\perp) + M(s) \frac{\partial f}{\partial E_\perp} = \frac{\overline{\Delta P_x^2}}{2\Delta S} \frac{\partial}{\partial E_\perp} \left( V_\perp^2 \frac{\partial f}{\partial E_\perp} \right). \quad (24)$$

В уравнении (24) обозначено:

$$\begin{aligned}
 M(s) = & \left( -\frac{\partial U_{cr}(r(s))}{\partial r} + \frac{M^2}{mr^3(s)} \right) \times \\
 & \times \left[ E_\perp - \frac{M^2}{mr^2(s)} - U(r(s)) / 2mV_\parallel^2 \right]^{1/2}.
 \end{aligned} \quad (25)$$

На первой стадии эволюции широкоуглового пучка в изогнутом кристалле до наступления момента зависания частиц над барьером [11] по-

перечный импульс можно также считать сохраняющейся величиной, что позволяет записать уравнение (24) в виде уравнения диффузии и дрейфа по поперечному импульсу  $P_\perp$  в зависимости от пройденного пути  $S$  и начального углового распределения. Аналитическое решение уравнения (21) с учетом вклада  $\partial U_{cr} / \partial r$  позволяет исследовать различные предельные случаи для одновременно протекающих процессов дрейфа и диффузии быстрой заряженной частицы в кристалле. Для оценки влияния многократного рассеяния частицы на эффективность объемного захвата оценим степень диффузионного распыления поперечной энергии  $\Delta E_\perp \sim (D_\perp a)^{1/2}$ . В области зависания, где  $E_\perp \approx 20$  эВ,  $D_\perp \approx 40$  эВ<sup>2</sup>/мкм [24], так что  $\Delta E_\perp \approx 2 \times 10^{-2} < 1$  эВ, что недостаточно для объемного захвата. Таким образом, следует признать, что за объемный захват отвечают процессы упругого рассеяния протонов на изогнутом кристалле.

## ОБЪЕМНЫЙ ЗАХВАТ–ДИФРАКЦИЯ ПРОТОНОВ НА ИЗОГНУТЫХ КРИСТАЛЛОГРАФИЧЕСКИХ ПЛОСКОСТИХ

Для протона с кинетической энергией  $K = 1$  ГэВ [7] размерами волнового пакета в продольном направлении можно полностью пренебречь (движение в высокой степени классическое), так как его продольный волновой вектор  $K_0$  составит:

$$K_0 = P/\hbar = \left[ K(K + 2m_0c^2) \right]^{1/2} / \hbar c = 10^{16} \text{ м}^{-1},$$

а соответствующая длина волны  $\lambda_{0\parallel} = 10^{-16}$  м. Поперечная же по отношению к изогнутой плоскости длина волны меняется по мере продвижения протона в кристалле от  $\lambda_{0\perp} = \lambda_{0\parallel} P_{0\perp} / P_\parallel \approx \lambda_{0\parallel} / \theta_{in} \approx 10^{-13}$  м при влете в кристалл до  $\lambda_\perp \approx \lambda_{0\parallel} / \theta_L \approx 10^{-12}$  м в области его зависания и отражения от изогнутой плоскости, т.е. в области объемного захвата. Здесь  $\theta_{in}$  — угол влета частиц в кристалл относительно изогнутой плоскости,  $\theta_c$  — угол подлета к ней в области объемного захвата, примерно равный углу Линдхарда ( $\theta_L \sim (V_0/E_0)^{1/2} \approx 0.05$  мрад),  $E_0 \approx 20$  эВ — глубина потенциальной ямы, описывающей изогнутую плоскость в кремнии. Эффекты подхода протонов строго по касательной к изогнутой плоскости в данной ситуации отсутствуют. Таким образом, эффектами дифракции протонов на изогнутой плоскости вдали от области захвата можно пренебречь, так как длина волны протона существенно меньше характерной толщины изогнутой плоско-

сти  $R_0 \sim 0.3 \times 10^{-10}$  м, например, в кремнии. В области же захвата [11], т.е., например, за десять и меньшее количество изогнутых плоскостей до отражающей плоскости,  $\lambda_{\perp}$  соизмерима с  $R_0$ , что приводит к эффектам некогерентной дифракции протонов на отдельных изогнутых плоскостях, причем взаимодействие быстрого протона с атомами отдельной плоскости когерентно. Отметим попутно, что длина, на которой становятся существенными эффекты дифракции, в несколько раз меньше соответствующей длины волны неупругих процессов [21]. Рассмотрим сначала дифракцию при отражении протона от изогнутой плоскости. Угол подлета протонов к такой плоскости может лежать в пределах от  $\theta_0 = ((U_0 - \Delta U_{\perp})/E_0)^{1/2}$  до  $\theta_L = (U_0/E_0)^{1/2}$ . Условием захвата стало бы уменьшение угла при отражении протона от плоскости до значений  $\theta < \theta_L$ . В частности, в наиболее благоприятном случае для протонов, падающих под углом  $\theta > \theta_L$ , отклонение от зеркального угла при отражении должно составлять  $\Delta\theta_0 = \Delta U_{\perp} / 2\sqrt{E_0(U_0 - \Delta U_{\perp})} \approx 3 \times 10^{-6}$ . Существенно, что отражение быстрых частиц от бесконечной плоскости или оси происходит зеркально [21], т.е. по существу эффекты когерентной дифракции отсутствуют. Факт изгиба бесконечной плоскости позволяет эффективно заменить ее фрагментом длиной  $L$ , оцениваемой из условия отклонения плоскости вследствие изгиба на расстояние, равное толщине  $R_0$ , так что  $R_0 \sim L^2/R$ , а  $L \sim (R_0 R)^{1/2} \sim 4 \times 10^{-6}$  м при  $R = 0.5$  м [7], что составит для кремния примерно  $10^4$  атомных слоев. Поскольку  $\theta_L \approx 1.5 \times 10^{-3} \gg \gg 3 \times 10^{-5}$  (в условиях, приведенных в [7, 8]), угловое распределение отраженных частиц сильно анизотропно в зависимости от угла отражения [21]. Учитывая дискретную цепочечную структуру изогнутой плоскости, воспользуемся результатами исследования рассеяния быстрых положительно заряженных частиц цепочкой атомов [21]. Для амплитуды рассеяния можем записать:

$$f_{\theta_0}(\theta) = \sqrt{\frac{2l^3 P}{\pi\theta_0}} 4L\theta_0 \exp \times \\ \times \left[ \frac{iPL}{2} (\theta^2 - \theta_0^2) - 1 \right] / pL(\theta^2 - \theta_0^2). \quad (26)$$

Поскольку  $1/p\theta_0 R_0 \gg 1$ , зависимостью амплитуды рассеяния от азимутального угла вылета можно пренебречь. Сечение рассеяния  $|f|^2 d\Omega$  осциллирует в зависимости от  $\theta$  с уменьшающейся по мере увеличения  $\theta$  амплитудой. Края центрального пика интенсивности определяются из усло-

вия  $\theta = (\theta_0^2 + 4\pi/pL)^{1/2}$ , так что при условии  $4\pi/pL\theta_0^2 \ll 1$  полуширина центрального пика  $\delta\theta \sim 2\pi/pL\theta_0$ . Эффективность объемного захвата определяется соотношением между полушириной центрального дифракционного пика  $\delta\theta$  и требуемым для эффективного захвата отклонением  $\Delta\theta_0$  отраженного протона от зеркального угла, поскольку доля частиц, дифрагировавших вне области центрального пика, составляет всего лишь

$8.2\%$ . В условиях [7, 8]  $\frac{4\pi}{pL\theta_0^2} \sim 10^{-2}$  и, считая, что  $\delta\theta \geq \Delta\theta_0$ , получаем следующий критерий эффективного объемного захвата:

$$[2\pi/(pa)](R/R_0)^{1/2} \geq 1. \quad (27)$$

Прямая подстановка параметров из [7, 8] в левую часть неравенства (27) дает 0.25, т.е. меньше единицы. Однако и в таком случае, не самом оптимальном для эффективного объемного захвата, 25% частиц переходят в режим канализации. Проведем с помощью амплитуды рассеяния (26) прямой расчет доли частиц, рассеянных на угол  $\Delta\theta_0$  и в более благоприятную сторону при отражении от изогнутой плоскости. С помощью выражения (26) получаем:

$$\eta = \frac{\Delta\sigma}{\sigma} = \int_0^{\theta_0} |f|^2 d\theta 2\pi/\sigma \approx \int_{p\Delta\theta_0/2}^{\infty} \sin^2 x/x^2 \times \\ \times dx/\pi = \int_4^{\infty} \left( \frac{\sin^2 x}{x^2} \right) dx/\pi \approx 0.046. \quad (28)$$

Аналогично для вероятности объемного захвата при дифракции протона на изогнутых плоскостях, предшествующих отражательной, получаем 3.3, 1.47% и т.д. Полное суммирование вероятностей объемного захвата быстрой заряженной частицы по изогнутым плоскостям до и после возможного отражения приводит к итоговому значению около 25%. Превышение этой цифры над наблюдаемыми экспериментально 12% объясняется эффектом деканализации.

## ОБЪЕМНЫЙ ЗАХВАТ–ОТРАЖЕНИЕ ПРОТОНОВ (ЛЕПТОНОВ) ОТ “ВЯЗКИХ” ИЗОГНУТЫХ КРИСТАЛЛОГРАФИЧЕСКИХ ПЛОСКОСТЕЙ, ИЛИ “ПРОБОЙ” ПЛОСКОСТЕЙ

Отражение быстрых протонов (лептонов) от изогнутых кристаллографических плоскостей происходит с потерей энергии радиального движе-

ния на возбуждение электронной подсистемы изогнутой плоскости, а также на возбуждение коллективных ангармонических колебаний ограниченного набора атомов плоскости в месте соударения частицы с плоскостью. В случае, когда энергия, передаваемая быстрой заряженной частицей, отражающей изогнутой кристаллографической плоскости, превышает энергию, необходимую для образования дефекта решетки, например, вакансии, происходит “пробой” отражающей плоскости при подходе к ней частицы с образованием кристаллического дефекта и одновременным резким уменьшением радиальной скорости и поперечной энергии частицы. Это приводит к эффекту объемного захвата быстрой заряженной частицы в изогнутом кристалле. Такая мгновенная потеря поперечной энергии частицы при зависании над изогнутой плоскостью в случае определенных кристаллических модификаций может быть достаточна для сброса разности потенциалов между двумя соседними изогнутыми плоскостями вследствие изгиба

$$\Delta U = \frac{M^2 a}{m R^3} \sim \frac{2K_0 a}{R} \sim 1 \text{ эВ в условиях, приведен-}$$

ных в [7]. То есть этого будет достаточно для объемного захвата, поскольку потеря поперечной энергии частицы на образование вакансии в изогнутом кристалле-мишени с энергией 1 эВ [22, 23] при энергии частицы  $K_0 = 1 \text{ ГэВ}$  составит при “пробое” плоскости кристалла  $\Delta E \approx 1 \text{ эВ}$ , в результате чего частица перейдет в состояние финитного движения в радиальном направлении между двумя изогнутыми плоскостями (рис. 2). В случае, когда неупругое отражение частицы с возбуждением изогнутой плоскости сопровождается потерей поперечной энергии, недостаточной для “пробоя” плоскости, имеет место эффект объемного отражения частицы от изогнутой плоскости.

## ВЫВОДЫ

Из (27) (также [24]) следует, что эффективность объемного захвата с возрастанием энергии частиц непрерывно падает и, в частности, при энергии протона  $E \approx 1 \text{ ТэВ}$  объемный захват практически будет отсутствовать. При уменьшении кинетической энергии протонов от 1 ГэВ [7] до оптимального значения 100 МэВ левая часть выражения (23) будет равна уже 0.25, а количество захватываемых частиц увеличивается до 43%. Уменьшение радиуса кривизны кристалла  $R$  позволяет увеличивать расходимость падающего на кристалл пучка, и в то же время для каждой частицы вероятность объемного захвата с уменьшением  $R$  падает в соответствии с выражениями (27), (28). Изменение температуры кристалла слабо влияет на дифракцию и, следова-

тельно, на объемный захват быстрой заряженной частицы. Выбор же системы кристалла-мишени существенен для объемного захвата. Для конкретного кристалла оптimalен выбор системы плоскостей с минимальным межплоскостным расстоянием  $a$ . Критическим экспериментом по проверке изложенных оценок мог бы быть эксперимент по прохождению широкого пучка ионов в изогнутом кристалле, где эффективность объемного захвата должна упасть в известное число раз. Отметим, что изменение межплоскостного расстояния в наиболее широких пределах в зависимости от ориентации кристалла можно осуществить в щелочно-галоидных кристаллах или в кристаллах со структурой цинковой обманки, где при определенных ориентациях кристалла каждая вторая изогнутая плоскость может оказаться квазинейтральной. При прохождении широкого пучка ионов с той же кинетической энергией эффективность объемного захвата должна возрасти в известное число раз вследствие увеличения поперечных размеров волнового пакета такой частицы. Таким образом, явление объемного захвата имеет дифракционную природу в отличие от эффекта захвата в режим канализования в неизогнутом кристалле [25], где работают механизмы потерь поперечной энергии и многократного рассеяния. Эксперименты по объемному захвату с вариацией массы частицы или ее энергии, а также с перебором системы изогнутых плоскостей кристалла (разные мишени и различные ориентации кристалла-мишени) являются критическими для идентификации механизма объемного захвата.

Уравнение для матрицы плотности быстрой заряженной частицы учитывает недиагональные элементы  $\rho_{ss'} (s \neq s')$  и их затухание по мере эволюции частицы в объеме кристалла за счет некогерентного упругого и неупругого рассеяния. Переход частицы в состояние канализования в глубине кристалла — объемному захвату — будет соответствовать появление при эволюции частицы диагонального элемента  $\rho_{\tilde{s}\tilde{s}}$ , где  $\tilde{s}$  отвечает подбарьерному состоянию  $\tilde{s}$  частицы, т.е. состоянию канализования в изогнутом кристалле при одновременном затухании недиагональных элементов  $\rho_{\tilde{s}s'} (s' \neq \tilde{s})$ . Недиагональные элементы  $\rho_{\tilde{s}s'}$  строго скоррелированы между собой. Если пренебречь их затуханием, то в глубине кристалла на некоторой толщине разность фаз, соответствующая основным в надбарьерном распределении состояниям, становится близкой к  $2\pi$ , что приводит к исчезновению эффекта объемного захвата на этой глубине. Таким образом, если пренебречь затуханием недиагональных элементов, то объемный захват будет осциллирующим с ростом тол-

чины кристалла. Такой случай соответствует чистой когерентной дифракции быстрой частицы в изогнутом кристалле. Наибольший вклад в затухание недиагональных элементов при установлении эффекта объемного захвата вносит упругое рассеяние, а также многократное рассеяние как низшее нулевое приближение по энергии, переданной быстрой частицей кристаллу. Три процесса конкурируют в многократном рассеянии частицы: рассеяние на статических особенностях дискретного характера в поле потенциала кристалла  $U_{pl}(\rho) - U_{cr}(r)$ , где  $\rho$  — радиус кривизны изогнутой плоскости; упругое рассеяние на виртуальных электронных возбуждениях кристалла; упругое рассеяние на фононах кристалла. Предложенный в настоящей работе дифракционный механизм основан на учете принципиально иного процесса упругого рассеяния в поле экранированного кулоновского потенциала изогнутых плоскостей атомов кремния по сравнению с предшествующими работами [12], поскольку рассмотрено квантовое когерентное рассеяние (дифракция) быстрого протона в изогнутом кристалле в отличие от рассматривавшегося ранее некогерентного многократного рассеяния. Дифракционные процессы обусловлены малоугловым когерентным рассеянием, определяющимся средним непрерывным потенциалом изогнутых плоскостей  $U_{pl}(\rho)$  (дискретными гладкими плоскостями), в то время как отклонения от  $U_{pl}(\rho)$  вследствие дискретной структуры этих плоскостей приводят к некогерентному рассеянию на большой угол. Для описания последнего процесса вводят коэффициент диффузии по поперечной энергии частицы  $D$ . Процессы же когерентного рассеяния (дифракции) имеют квантовые вклады и диффузионным образом принципиально не описываются. В области когерентности с поперечными размерами  $\Delta r_{\perp} = 1/q_{\perp}$  и продольными размерами  $\Delta r_{long} = 1/q_{long}$  ( $q$  — передаваемый быстрой частицей импульс) взаимодействие быстрой заряженной частицы с кристаллом не может быть разделено на отдельные акты. В этой области взаимодействие быстрой частицы (протона) с атомами кристалла происходит одновременно (когерентно). В рассматриваемом случае поперечная длина когерентности равна радиусу экранирования  $R_{el} \approx 0.3 \text{ \AA}$ , а продольная составит  $pa/\hbar \approx 5 \text{ мкм} (10^4 \text{ атомных слоев})$ .

## ФИНАНСИРОВАНИЕ РАБОТЫ

Работа выполнена с использованием оборудования центра коллективного пользования “Комплекс для моделирования и обработки данных с исследовательских установок мегакласса” при финансовой поддержке НИЦ “Кур-

чаторский институт” (рабочий идентификатор RFMEFI62117X0016).

## КОНФЛИКТ ИНТЕРЕСОВ

Авторы данной работы заявляют, что у них нет конфликта интересов.

## СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Tsyganov E.N. Estimates of Cooling and Bending Processes for Charged Particles Penetration through a Monocrystal. Fermilab-TM-0684. 1976. 9 p.*
2. *Каплин В.В., Воробьев С.А. // Письма в ЖТФ. 1978. Т. 4. Вып. 5. С. 196.*
3. *Феранчук В.Д. // ЖТФ. 1981. Т. 51. Вып. 2. С. 270.*
4. *Desalvo A., Rosa R. // J. Phys. C. 1977. V. 10. P. 1595.*
5. *Мазур Е.А. // Нестационарные процессы в диэлектриках и полупроводниках. М.: Энергоатомиздат, 1986. С. 7.*
6. *Мазур Е.А. // Исследования поверхностных и объемных свойств твердых тел по взаимодействию частиц. М.: Энергоатомиздат, 1984. С. 53.*
7. *Андреев В.А., Баублис В.В., Дамаскинский Е.А. и др. // Письма в ЖЭТФ. 1992. Т. 36. Вып. 9. С. 340.*
8. *Андреев В.А., Баублис В.В., Дамаскинский Е.А. и др. // Письма в ЖЭТФ. 1984. Т. 39. Вып. 2. С. 56.*
9. *Андреев В.А., Баублис В.В., Дамаскинский Е.А. и др. // Письма в ЖЭТФ. 1985. Т. 41. Вып. 9. С. 408.*
10. *Андреев В.А., Баублис В.В., Дамаскинский Е.А. и др. // Письма в ЖЭТФ. 1986. Т. 44. Вып. 2. С. 101.*
11. *Мазур Е.А. // Неравновесные явления в полупроводниках и диэлектриках. М.: Энергоатомиздат, 1988. С. 48.*
12. *Таратин А.М., Воробьев С.А. // ЖТФ. 1985. Т. 55. Вып. 8. С. 1598.*
13. *Mazur E.A. // J. Surf. Invest.: X-ray, Synchrotron Neutron Tech. 2023. V. 17. № 2. P. 371.*
14. *Давыдов А.С. Теория твердого тела. М.: Наука, 1976. 639 с.*
15. *Явлинский Ю.Н. // ЖЭТФ. 1981. Т. 80. Вып. 4. С. 1622.*
16. *Кумахов М.А., Ширмер Г. Атомные столкновения в кристаллах. М.: Атомиздат, 1980. 192 с.*
17. *Каган Ю.М., Кононец Ю.В. Квантовая теория канализации. М.: МИФИ, 1976. 86 с.*
18. *Ахиезер А.И., Пелетминский С.В. Методы статистической физики. М.: Наука, 1977. 366 с.*
19. *Белошицкий В.В., Кумахов М.А. // ЖЭТФ. 1982. Т. 82. Вып. 2. С. 462.*
20. *Оцуки У.-Х. Взаимодействие заряженных частиц с твердыми телами. М.: Мир, 1985. 280 с.*
21. *Калашников Н.П. Когерентные взаимодействия заряженных частиц в монокристаллах. М.: Атомиздат, 1981. 224 с.*
22. *Фистуль В.И. Новые материалы (состояние проблемы и перспективы). М.: МИСИС, 1995. 142 с.*
23. *Вавилов В.С. Киселев В.Ф. Мукашев Б.Н. Дефекты в кремнии и на его поверхности. М.: Наука, 1990. 216 с.*
24. *Мазур Е.А. // ЖТФ. 1988. Т. 58. № 5. С. 987.*
25. *Маркус А.М., Гегузин Я.Е., Файнштейн А.Л. // ЖЭТФ. 1971. Т. 61. Вып. 1. С. 332.*

## Mechanisms of Volume Capture of Fast Charged Particles in a Curved Single Crystal

E. A. Mazur<sup>1, 2, \*</sup>

<sup>1</sup>*National Research Center “Kurchatov Institute”, Moscow, 123182 Russia*

<sup>2</sup>*National Research Nuclear University MEPhI, Moscow, 115409 Russia*

\*e-mail: eugen\_mazur@mail.ru

The effect of volume capture of fast charged particles in a curved single crystal has been studied. The transverse energy losses, the hanging effect, and the criterion for volume capture of fast charged particles have been investigated. Possible mechanisms of volume capture are considered: transverse energy losses due to crystal excitation by a fast charged particle (proton, lepton); multiple scattering of particles in a curved crystal; elastic scattering and diffraction of particles in a curved crystal. It is shown that in the hanging region, the ratio of the velocities of transverse and longitudinal energy losses of fast charged particles increases significantly compared to the ratio of longitudinal and transverse energies and is equal in order of magnitude to the ratio of the off-diagonal elements of the inverse dielectric susceptibility matrix to the diagonal ones. It is established that the effect of volume capture of fast protons (leptons) is due to diffraction in a curved crystal, as well as the effects of damping of the off-diagonal elements of the particle density matrix. The proposed diffraction mechanism is based on taking into account quantum coherent scattering of a fast proton (lepton) in a curved crystal.

**Keywords:** channeling, volume capture, susceptibility matrix, off-diagonal elements, plasmon, resonant generation, crystal, oriented particle.