

УДК 539.412:539.1.09

АДИАБАТИЧЕСКИЕ ИНВАРИАНТЫ ПРИ АКСИАЛЬНОМ КАНАЛИРОВАНИИ В ИЗОГНУТОМ КРИСТАЛЛЕ (В СОПУТСТВУЮЩЕЙ СИСТЕМЕ ОТСЧЕТА)

© 2022 г. Н. П. Калашников^{1,*}, А. С. Ольчак^{1,**}

¹ Национальный исследовательский ядерный университет “МИФИ”, Москва, 115409, Россия

*e-mail: kalash@mephi.ru

**e-mail: asolchak@mephi.ru

Поступила в редакцию 06.05.2022 г.

После доработки 17.07.2022 г.

Принята к публикации 26.07.2022 г.

Релятивистский электрон в режиме аксиального каналирования в монокристалле движется по спиралевидной траектории вокруг одной из цепочек положительно заряженных ионов кристаллического остова (ось каналирования). В сопутствующей системе отсчета, движущейся вдоль оси каналирования со скоростью, равной продольной компоненте скорости электрона, такое движение по сути является реализацией модели двумерного 2D-атома, причем с управляемыми параметрами. Глубина и форма потенциала ионной оси каналирования зависят как от химического состава, кристаллической структуры и ориентации кристалла, так и от величины энергии движущегося в канале электрона. Важно, что режим движения в канале сохраняет устойчивость даже в том случае, когда кристалл и его ионные цепочки изогнуты. Используя расчет адиабатических инвариантов движения, в работе оценивается максимальный угол изгиба монокристалла, при котором движение в режиме аксиального каналирования все еще сохраняет устойчивость. Демонстрируется, что предельный угол изгиба монокристалла не должен превышать критический угол каналирования Линдхарда, что ограничивает гипотетическую возможность использовать изогнутые монокристаллы для отклонения пучков ускоренных частиц лишь небольшими углами отклонения.

Ключевые слова: аксиальное каналирование, ультрарелятивистские электроны, изогнутый монокристалл, адиабатические инварианты, правила квантования Бора–Зоммерфельда, критический угол Линдхарда

DOI: 10.56304/S2304487X22020079

1. ВВЕДЕНИЕ

Теоретически, движение ультрарелятивистских частиц в режиме каналирования в монокристалле может сохранять устойчивость даже в том случае, когда канал (плоскостной или осевой) несколько искривлен (в результате механического изгиба монокристалла, например). Эта возможность любопытна в плане теоретического исследования, но потенциально имеет и прикладное значение как достаточно простой и дешевый способ управления пучками релятивистских протонов и электронов (см., например, [1]). В предыдущей работе авторов [2] была выполнена оценка предельной величины угла изгиба кристалла, при которой все еще сохраняется устойчивость режима движения электронов в плоскостном канале. В настоящей работе предлагается аналогичная оценка, выполненная тем же методом расчета адиабатических инвариантов движения, но для

режима спиралевидного движения электронов в аксиальном канале.

2. АКСИАЛЬНОЕ КАНАЛИРОВАНИЕ ЭЛЕКТРОНОВ – “2D–АТОМ”

В этой работе, как и в предшествующей работе [2], мы будем рассматривать движение каналированных частиц p в так называемой сопутствующей системе отсчета (ССО) [2–6], движущейся вдоль направления каналирования со скоростью, равной продольной компоненте скорости каналированной частицы. В сопутствующей системе отсчета движение аксиально каналированной частицы финитно и аналогично движению атомарных электронов по “орбитам” в центральном поле (аналог движения электронов в атоме, но с пониженной размерностью 2D). В литературе известны разные модельные потенциалы, использовавшиеся для описания такого движения. Исторически первой моделью усредненного по-

тенциала атомной цепочки был т.н. “стандартный потенциал Линдхарда” [3]:

$$U(\rho) = -\frac{Ze^2}{a} \ln \left[\frac{3R_{T-F}^2}{\rho^2} \right] + 1, \quad (1)$$

где ρ — радиальная координата (расстояние до оси каналирования), a — межатомное расстояние в цепочке, Z — атомный номер кристалла, R_{T-F} — радиус экранирования Томаса—Ферми. Для аналитического расчета спектральных характеристик и интенсивности излучения электрона в режиме аксиального каналирования потенциал фактически не пригоден.

В работе [5] выполнено точное усреднение потенциала цепочки атомов, описываемых экспоненциально экранированными кулоновскими потенциальными функциями, приводящее к специальным функциям Макдональда, дальнейшая работа с которыми возможна только численно.

В работах [4, 6] предлагалось аппроксимировать непрерывный потенциал атомной цепочки двумерной кулоновской потенциальной функцией

$$U(\rho) = -c \frac{Ze^2 R_{T-F}}{\rho a}, \quad (2)$$

где c — подгоночный параметр порядка единицы.

Функция (2) весьма далека от реального усредненного потенциала цепочки атомов, однако она позволяет аналитически исследовать некоторые особенности движения в аксиальном двумерном потенциале и выявить его характерные свойства. В работе [5] был выполнен квантовый анализ решения волнового уравнения с потенциалом (2)

$$\frac{\hbar^2}{2\mu} \left(\frac{d^2 R}{d\rho^2} + \frac{1}{\rho} \frac{dR}{d\rho} - \frac{m^2}{\rho^2} R \right) = (U(\rho) - \varepsilon) R, \quad (3)$$

и было показано, что энергия частицы в двумерной задаче Кеплера для потенциала типа (2) может принимать значения

$$\varepsilon_n = -\frac{\mu e^4 Z^2}{2\hbar^2 \left(n + |m| + \frac{1}{2} \right)^2}, \quad (4)$$

где $(n = 0, 1, 2, \dots, |m| = 0, 1, 2, \dots)$,

что незначительно отличается от известной формулы для обычного трехмерного атома водорода (формула Бора, [7]). Соответственно, было предложено классифицировать квантовые состояния по аналогии с атомной физикой 1s, 2s, 2p и т.д. Расчетные значения энергий некоторых уровней совпали с экспериментально наблюдаемыми значениями. Были также получены волновые функции состояний с квантовыми числами n, m

$$\Psi_{nm}(\rho, \varphi) = r^{im\varphi} \frac{1}{\sqrt{\rho}} e^{-\gamma \frac{\rho}{a}} \left(\frac{\rho}{a} \right)^{|m|+\frac{1}{2}} \sum_{k=0}^n a_k \left(\frac{\rho}{a} \right)^k, \quad (5)$$

однако, дальнейший аналитический расчет интенсивности возникающего излучения в квантовом подходе даже с таким упрощенным потенциалом, как (2), весьма затруднен.

Мы попробуем исследовать случай, когда квантовые состояния аксиально каналированной частицы (2D-атома) можно рассмотреть в “классическом” приближении. Как известно, квазиклассическое приближение, а именно правило квантования Бора—Зоммерфельда [8], применимо к описанию квантовых состояний с большими квантовыми числами. В одномерном случае правило Бора—Зоммерфельда записывается в виде [8]:

$$\oint p dx = 2\pi\hbar n \quad (6)$$

Для двумерного потенциала (2) компоненты импульса p_φ и p_ρ квантуются отдельно и им соответствуют разные квантовые числа:

$$\oint p_\varphi d\varphi = \hbar l, \quad \oint p_\rho d\rho = \hbar k \quad (7)$$

где l — азимутальное квантовое число и k — так называемое радиальное квантовое число — являются неотрицательными целыми числами. Первое правило дает квантование момента импульса: $L = \hbar l$. Второе правило приводит к соотношению:

$$\sqrt{\frac{2\pi^2 m e^4}{(-\varepsilon)}} - 2\pi L = \hbar k. \quad (8)$$

Вводя “главное квантовое число” $n = l + k$, и учитывая связь поперечной энергии и радиальной компоненты импульса частицы, получаем выражение для значений уровней поперечной энергии, аналогичное известной в атомной физике формуле Бальмера:

$$\varepsilon_n = -\frac{m e^4}{2\hbar^2 n^2} \quad (9)$$

3. АДИАБАТИЧЕСКИЕ ИНВАРИАНТЫ

Рассмотрим теперь механическую систему, совершающую двумерное финитное движение в потенциале (2), центр которого в сопутствующей системе координат находится в точке:

$$\rho_0 = \rho_0(t). \quad (10)$$

Если параметр ρ_0 меняется со временем, но не слишком быстро (незначительно за один период T движения системы, но заметно за много периодов), такие изменения называют адиабатическими. Условие адиабатичности изменений можно записать в форме

$$T \frac{d\rho_0}{dt} \ll a. \quad (11)$$

Адиабатически меняющаяся система, строго говоря, не является замкнутой, ее энергия ϵ_n не сохраняется, а скорость изменения энергии ϵ'_n пропорциональна скорости $\dot{\rho}_0$ изменения параметра ρ_0 . И в квантовой, и в классической механике показывается [8, 9], что в этой ситуации существует такая комбинация кинематических параметров движения, которая при движении системы остается неизменной. Эту комбинацию называют **адиабатическим инвариантом** [8, 9].

В режиме аксиального каналирования остается постоянным при изменении параметра ρ_0 интеграл $I = \frac{1}{2\pi} \oint p_\rho d\rho$, который и является адиабатическим инвариантом движения. Это означает, что при выполнении условия адиабатичности энергия поперечного движения аксиально каналированной частицы ϵ_n (9) устойчиво сохраняется.

4. АКСИАЛЬНОЕ КАНАЛИРОВАНИЕ В ИСКРИВЛЕННОМ МОНОКРИСТАЛЛЕ

Оценим возможность устойчивого каналированного движения в искривленном кристалле с поворотом кристаллографической оси на угол Θ . В этом случае в сопутствующей системе отсчета двумерная “потенциальная яма” (2), в которой находится аксиально каналированная частица, движется со скоростью:

$$\rho'_0 = V_{\parallel} \tan \Theta \approx V_{\parallel} \Theta, \quad (12)$$

где $V_{\parallel}$ — скорость сопутствующей системы отсчета (продольная составляющая скорости каналированной частицы), а Θ — угол изгиба кристаллографической оси.

Таким образом, условие адиабатичности движения оси канала $\rho'_0 \ll \frac{a}{T}$, где T — период финитного движения частицы в двумерной “потенциальной яме”:

$$T \sim \frac{a}{v_n} = a \sqrt{\frac{m}{2\epsilon_n}}. \quad (13)$$

Следовательно, $(V_{\parallel} \Theta) \ll \sqrt{\frac{m}{2\epsilon_n}}$, т.е. скорость перемещения оси канала должна быть много меньше скорости поперечного движения частицы в режиме аксиального каналирования. Из этого рассмотрения можно оценить предельный угол кривизны монокристалла, допускающий движение в режиме аксиального каналирования:

$$\Theta \ll \sqrt{\frac{m}{2\epsilon_n}} / V_{\parallel}, \quad (14)$$

т.е. $\Theta \ll \Theta_L$ и предельный угол изгиба монокристалла, как и в случае плоскостного каналирования [2], не должен превышать критический угол Линдхарда [3].

5. ВЫВОДЫ

Как было показано в работе [2] для случая каналирования плоскостного, и как показано в настоящей работе для каналирования аксиального, сохранение устойчивости движения ультрарелятивистской частицы в изогнутом канале возможно, однако ограничено лишь небольшими углами изгиба кристалла, не превышающими критического угла каналирования Линдхарда, убывающего с ростом энергии E релятивистской частицы:

$$\theta < \theta_L \sim (U_0/E)^{1/2}. \quad (15)$$

Здесь U_0 — глубина потенциала канала, имеющая для большинства кристаллов и кристаллографических направлений величину порядка нескольких десятков эВ как в плоскостном, так и в аксиальном случаях [1, 3, 4]. $E \gg mc^2$ — релятивистская энергия частицы, значительно превосходящая ее энергию покоя mc^2 в ультрарелятивистском случае.

Для электронов условие (15) численно выражается соотношением

$$\theta < \theta_L \sim 0.01 (mc^2/E)^{1/2} \sim 0.5^\circ (mc^2/E)^{1/2}.$$

Поворот пучка частиц изогнутым кристаллом возможен только на незначительные углы в малые доли углового градуса, как правило, меньшие величины статистического разброса электронов в пучке по направлениям движения.

БЛАГОДАРНОСТИ

Работа выполнена в рамках Программы стратегического академического лидерства “ПРИОРИТЕТ 2030”.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Tsyganov E.N. // Preprint Fermilab. 1976. ТМ-682, ТМ-684.
2. Калашников Н.П., Ольчак А.С. Адиабатические инварианты при плоскостном каналировании в изогнутом кристалле (в сопутствующей системе отсчета) // Вестник НИЯУ МИФИ, 2022. Т. 11. № 1. С. 5–8.
3. Линдхард Й. Влияние кристаллической решетки на движение быстрых заряженных частиц // УФН. 1969. Т. 99. № 2. С. 249–296.
4. Калашников Н.П., Ольчак А.С. Явление каналирования как 1-D и 2-D — модели атома в сопутствующей системе координат // Поверхность. Синхро-

- тронные и нейтронные исследования, 2022. № 5. С. 1–5.
5. Калашников Н.П. Когерентные взаимодействия заряженных частиц в монокристаллах. М.: Атомиздат, 1981. 224 с.
 6. Khokonov M.Kh., Bekulova I.Z., Lomonosov V.S. // Reports of the L-th International Tulinov's Conference "Interaction of Charged Particles with Crystals", 2021. P. 71.
 7. Фано У., Фано Л. Физика атомов и молекул. М.: ГРФМЛ. Наука. 1980. 658 с.
 8. Мессиа А. Квантовая механика. Т. 1. М.: ГИФМЛ "Наука", 1978. 480 с.
 9. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Механика. Т. I. М.: ГИФМЛ "Наука", 1958. 206 с.

Vestnik Natsional'nogo Issledovatel'skogo Yadernogo Universiteta "MIFI", 2022, vol. 11, no. 2, pp. 97–100

Adiabatic Invariants for Axial Channeling in a Bending Crystal (in the Accompanying Reference System)

N. P. Kalashnikov^{a,#} and A. S. Olchak^{a,##}

^a National Research Nuclear University MEPhI (Moscow Engineering Physics Institute), Moscow, 115409 Russia

[#]e-mail: kalash@mephi.ru

^{##}e-mail: asolchak@mephi.ru

Received May 6, 2022; revised July 17, 2022; accepted July 26, 2022

Abstract—A relativistic electron in the axial channeling regime in a single crystal moves along a helical trajectory around some regular chain of positive ions, forming an axial channel. In the accompanying reference frame moving along the channel axis at a velocity equal to the longitudinal component of the electron velocity, the channeling motion is finite and can be considered as an implementation of the two-dimensional relativistic atom model with controlled parameters. The depth and shape of the effective potential of the ionic chain depends on the chemical composition of the crystal, its crystallographic structure, and orientation, as well as on the relativistic energy of the particle moving in the channel. The motion in the axial channeling regime even in the bent crystal and its axial channels remains stable if the bending angle is not too large. The maximum possible bending angle is estimated using calculated adiabatic invariants of motion. It is demonstrated that the channeling motion regime can be stable only if the bending angle does not exceed the Lindhard critical channeling angle. Thus, the possibility of deflecting beams of accelerated charged particles by bent crystals is limited to just small angles of deflection.

Keywords: axial channeling, ultrarelativistic electrons, bent single crystal, adiabatic invariants, Bohr–Sommerfeld quantization rule, Lindhard angle

DOI: 10.56304/S2304487X22020079

REFERENCES

1. Tsyganov E.N. *Preprint Fermilab*, 1976. TM-682, TM-684.
2. Kalashnikov N.P., Olchak A.S. Adiabaticheskie invarianty pri ploskostnom kanalirovanii v izognutom kristalle (v soputstvuyushchej sisteme otscheta). [Adiabatic invariants for planar channeling in a bending crystal (in the accompanying reference system)]. *Vestnik NIYaU MIFI*, 2022, vol. 11, no. 1, pp. 5–8. (in Russian)
3. Lindhard J. Vliyanie kristallicheskoj reshetki na dvizhenie bystrykh zaryazhennykh chastic [Influence of the Crystal Lattice on the Motion of Fast Charged Particles]. *UFN*, 1969, vol. 99, no. 2, pp. 249–296. (in Russian)
4. Kalashnikov N.P., Olchak A.S. Yavlenie kanalirovaniya kak 1–D i 2–D – modeli atoma v soputstvuyushchej sisteme koordinat [The phenomenon of channeling as 1–D and 2–D models of the atom in the comoving coordinate system]. *Poverhnost'. Sinhrotronnye i nejtronnye issledovaniya*, 2022, vol. 5, no. 5, pp. 1–5. (in Russian)
5. Kalashnikov N.P. *Kogerentnye vzaimodejstviya zaryazhennykh chastic v monokristallah* [Coherent Interactions of Charged Particles in Single Crystals]. Moscow, Atomizdat Publ, 1981, 224 p.
6. Khokonov M.Kh., Bekulova I.Z., Lomonosov V.S. *Reports of the L-th International Tulinov's Conference "Interaction of Charged Particles with Crystals"*, Moscow, 2021, p. 71.
7. Fano U., Fano L. *Fizika atomov i molekul*. [Physics of Atoms and Molecules]. Moscow, GRFML Nauka Publ., 1980. 658 p.
8. Messia A. *Quantum mechanics. T. 1*. [Quantum mechanics. vol. 1]. Moscow, GIFML Nauka Publ., 1978, 480 p.
9. Landau L.D., Lifshits E.M. *Mechanics*. [Mechanics. vol. I]. Moscow, GIFML Nauka Publ., 1958, 206 p.