

О ФОРМИРОВАНИИ ВЫСОКОЭНЕРГЕТИЧЕСКИХ ПУЧКОВ ЗАРЯЖЕННЫХ ЧАСТИЦ КРИСТАЛЛАМИ

В. К. Федянин, Г. М. Гавриленко

Объединенный институт ядерных исследований, Дубна

Изложена общая схема описания каналируемых пучков высокоэнергетических заряженных частиц через изучение « Z -эволюции» малой подсистемы, находящейся в динамическом контакте с большой системой. Получено формально точное уравнение относительно одночастичной функции распределения частиц в пучке с глубиной проникновения в кристалл. Последовательно изучено два первых приближения этого уравнения. Установлена связь с «*continuum potential*» теорией Линдхарда. Изучено асимптотическое состояние распределения частиц при больших глубинах проникновения в кристалл. Обсуждены эффекты формирующего воздействия кристаллов на пучки высокоэнергетических протонов и ионов.

The general approach for the description of the energetic charged particle channelling through a crystal is developed as the description of the « Z -evolution» of the small system interacting with the large system. The formally exact equation for particle distribution function is obtained. The connection with Lindhard's theory, asymptotic distribution at large penetration depth and the form effects of the proton and ion beams are discussed.

ВВЕДЕНИЕ

В последнее десятилетие важным направлением теоретических и экспериментальных исследований является изучение особенностей взаимодействия и поведения высокоэнергетических заряженных частиц, движущихся в кристаллах под малыми углами к осям или плоскостям симметрии системы. К настоящему времени имеется обширная библиография по теоретическим и экспериментальным исследованиям этой проблемы [1—5]. Большинство физических эффектов, возникающих здесь, связано с появлением специфической ориентационной зависимости в наблюдаемых явлениях, обусловленной взаимодействием движущихся частиц со средой и аномально малыми потерями их энергии [6]. Это объясняется особым характером движения частиц, названным *каналированием*. Было показано, что такой характер движения возникает в результате сильно скоррелированного влияния на движущуюся частицу групп ионов кристалла, расположенных в плоскостях или осях

симметрии системы. В этой связи представляется интересным изучить вопрос о возможности эффективного формирования пучков высокоэнергетических заряженных частиц кристаллами. Подход, который мы будем использовать для описания рассматриваемого явления, сжато изложен в [7] и основан на методах классической неравновесной статистической механики и теории стохастических процессов [8, 9]. Не будем останавливаться здесь на правомерности классического описания каналирования, этот вопрос подробно обсужден в приведенной литературе [10]. Заметим лишь только, что на настоящий момент нет серьезных экспериментальных данных, дискредитирующих классическое описание каналирования для протонов и ионов, к описанию движения которых и будет применяться предлагаемая схема.

Существование в проблеме каналирования малого эффективно-го параметра, каким является отношение среднего значения трансверсальной составляющей скорости частицы к ее продольной компоненте $\epsilon = |V_{\perp}|/V_z \ll 1$, позволяет развивать по нему теорию возмущения, последовательно изучая появляющиеся эффекты в каждом порядке разложения по ϵ . Адиабатическое приближение [11, 12], в котором не учитываются процессы обмена энергией между каналируемой частицей и кристаллом (S -, Σ -системами в терминологии [7—9]), отвечает теории $o(\epsilon)$ -приближения. Поэтому оно позволяет описать только «входные характеристики» каналирования. Роль кристалла в этом приближении сводится лишь к формированию эффективных «стенок» потенциальной энергии, определяющих возможные направления каналирования частиц и энергетические характеристики захвата частиц в каналы движения. Такое описание полностью согласуется с описанием движения частиц при помощи «continuum potential» модели Линдхарда [1]. Важным моментом, который не учитывает адиабатическое приближение, является тот факт, что при движении частиц в каналах, они испытывают «нерегулярное» динамическое воздействие со стороны ионов кристалла, которое обуславливает процессы взаимной передачи энергии между S - и Σ -подсистемами и может привести к существенному изменению состояния S -подсистемы. Эффекты, связанные с учетом взаимного влияния S - и Σ -систем, появляются в теории $o(\epsilon^2)$ -приближения. К описанию их можно подходить двумя способами, отвечающими различной конкретизации физической ситуации.

1) Если возмущающее воздействие S -системы на Σ таково, что при этом изменением состояния Σ -системы по сравнению с S -системой можно пренебречь и «нерегулярная» часть этого возмущения мала по сравнению с «регулярной», тогда «нерегулярное» возмущение можно аппроксимировать действием на S -систему некоторых стохастических возмущающих сил, зависящих от времени. Конкретно для каналирования это означает, что под «регулярным»

воздействием Σ -системы на S можно считать среднее внутрикристаллическое поле, создаваемое ионами решетки, а влияние тепловых колебаний ионов около положения равновесия учитывается введением слабых стохастических сил. Гамильтонов подход к статистическому описанию действия такого вида возмущений развит в работе [8]. Получающиеся при этом уравнения для функции распределения S -системы имеют марковский фоккер-планковский вид, и их коэффициенты выражаются через спектральные характеристики возмущающих сил. Эффекты, связанные с описанием каналирования при помощи уравнений указанного типа, описываются в работах [13—18].

2. Если влиянием S на Σ пренебречь нельзя, что отвечает каналированию пучков частиц с большой плотностью «поперечной» энергии, или воздействие тепловых колебаний не предполагается малым, то необходимо рассмотреть проблему, используя гамильтониан $H(S) + H(\Sigma) + H_{вв}$, не зависящий от времени. В своей постановке второй подход носит более общий характер и должен включать в себя первый подход как частный случай.

В настоящей работе мы разовьем общую схему описания каналируемых пучков заряженных высокоэнергетических частиц через изучение « z -эволюции» малой подсистемы, находящейся в динамическом контакте с большой системой или термостатом. Получим формально точное уравнение относительно одночастичной функции распределения S -подсистемы $f(zS_{\perp})$, описывающее изменение распределения частиц в пучке с глубиной проникновения его в кристалл в плоскости фазовых переменных, трансверсальной направлению каналирования z, V_z . Изучим $o(\epsilon)$ - и $o(\epsilon^2)$ -приближения этого уравнения. Установим связь $o(\epsilon)$ -приближения с теорией «continuum potential» Линдхарда. Далее покажем, что « z -эволюция», которой подчиняется одночастичная функция распределения S -подсистемы $f(zS_{\perp})$ при учете взаимного влияния S -, Σ -систем друг на друга в $o(\epsilon^2)$ -приближении, есть некоторый динамический стохастический процесс, асимптотическое состояние которого при $z \rightarrow \infty$ полностью определяется термодинамическим состоянием кристалла и характером взаимодействия между каналируемой частицей и ионами кристалла*. Изучив уравнение этого процесса и его асимптотическое состояние $f(\infty, S_{\perp})$, обсудим эффекты формирующего воздействия кристаллов на пучки энергетических заряженных частиц. Забегая вперед, отметим, что налицо качественное отличие формирующего воздействия кристалла на пучки тяжелых ионов и протонов. Изучение процессов z -релаксации важно, так как, по данным работ [19—21], значи-

* Мы не будем учитывать влияние подсистемы свободных электронов проводимости в кристалле на S , что можно сделать, включив в рассмотрение соответствующие аддитивные члены взаимодействия.

тельное изменение состояния S -системы происходит уже на относительно малых глубинах проникновения (z) частиц в кристалл.

1. ФОРМАЛЬНО-ТОЧНОЕ УРАВНЕНИЕ Z -ЭВОЛЮЦИИ

Итак, приведем основные исходные понятия и предположения предлагаемого описания.

Состояние полной системы (кристалл плюс каналируемая частица) будет описываться полной функцией распределения $D(tS\Sigma)$, где S — фазовые переменные каналируемой частицы; Σ — фазовые переменные кристалла; t — время. Эволюция по t -функции $D(tS\Sigma)$ управляется уравнением Ляувилля:

$$\frac{\partial}{\partial t} D(tS\Sigma) = \mathcal{L}(S\Sigma) D(tS\Sigma), \quad (1)$$

где $\mathcal{L}(S\Sigma) = \mathcal{L}(S) + \mathcal{L}(\Sigma) + \mathcal{L}_{вз}$; $\mathcal{L}(S) = -\mathbf{V} \cdot \nabla_V$;

$$\mathcal{L}(\Sigma) = - \sum_{j=1}^N \mathbf{V}_j \nabla_{\mathbf{r}_j} + \sum_{i < j} \nabla_{\mathbf{r}_j} \varphi(\mathbf{r}_j - \mathbf{r}_i) \cdot \left(\frac{1}{m_j} \nabla_{\mathbf{V}_j} - \frac{1}{m_j} \nabla_{\mathbf{V}_i} \right);$$

$$\mathcal{L}_{вз} = \sum_{j=1}^N \nabla_{\mathbf{R}} U(\mathbf{R} - \mathbf{r}_j) \cdot \left(\frac{1}{M} \nabla_{\mathbf{V}} - \frac{1}{m_j} \nabla_{\mathbf{V}_j} \right), \quad S = \{\mathbf{V}, \mathbf{R}\};$$

$$\Sigma = \{\dots, \mathbf{r}_j, \mathbf{V}_i, \dots\}; \quad i = 1, 2, \dots, N,$$

где M — масса каналируемой частицы; N — число узлов кристаллической решетки (для простоты будем считать, что в каждом узле решетки находится один ион с массой m_j); $U(\mathbf{R})$ — потенциал взаимодействия между каналируемой частицей и ионами решетки, $\mathbf{a} \cdot \nabla_{\mathbf{b}} = a_x \nabla_{b_x} + a_y \nabla_{b_y} + a_z \nabla_{b_z}$; функция $D(tS\Sigma)$ предполагается нормированной на некоторую константу

$$\int (d\Sigma) (dS) D(tS\Sigma) = C,$$

не зависящую от времени; C может быть единицей, или плотностью числа частиц и т. п.

Получим замкнутое уравнение для редуцированной функции распределения $f(zS_{\perp})$, описывающее z -эволюцию каналируемой частицы [или пучка частиц, это зависит от нормировки функции $f(zS_{\perp})$] в «плоскости» фазовых переменных, перпендикулярной направлению каналирования.

Ориентируем систему координат, в которой будет описываться движение частицы так, чтобы ось z совпадала с направлением каналирования. В остальном ее можно выбрать пока произвольно. Тогда в проблеме каналирования имеется взаимоднозначное

соответствие между временем движения и положением частицы вдоль оси z ; координата z однозначно связана с моментом времени t , и наоборот. С учетом такой взаимоднозначной зависимости между t и z становится безразличным, в терминах какого параметра описывать эволюцию системы, т. е. изменение ее состояния. При рассмотрении каналирования в качестве эволюционного параметра удобно выбрать положение частицы вдоль оси z , тогда уравнения формулируются в виде, удобном для получения разложения по ϵ . Заметим, что факт взаимоднозначности между t и z — следствие физического наблюдения. В результате имеем

$$\frac{d}{dz} = \frac{\partial}{\partial z} + \left(\frac{\partial t}{\partial z} \right) \frac{\partial}{\partial t}. \quad (2)$$

Но $\partial t / \partial z = (V_z)^{-1}$. Находя из (2) $\partial / \partial t$ и подставляя его в уравнение (1), получаем

$$\begin{aligned} & \frac{d}{dz} D' (t (z), V_z, z, S_{\perp}, \Sigma) = \\ & = \frac{1}{V_z} \mathcal{L} (S_{\perp} \Sigma) D' (t (z), V_z, S_{\perp}, z, \Sigma), \end{aligned} \quad (3)$$

где

$$\begin{aligned} \mathcal{L} (S_{\perp} \Sigma) &= \mathcal{L} (S_{\perp}) + \mathcal{L} (\Sigma) + \mathcal{L}_{\text{вз}}; \quad \mathcal{L} (S_{\perp}) = \\ &= -\mathbf{V}_{\perp} \cdot \nabla_{R_{\perp}}; \quad S_{\perp} = \{\mathbf{V}_{\perp}, \mathbf{R}_{\perp}\}. \end{aligned}$$

В дальнейшем положим $D' (t (z), V_z, z, S_{\perp}, \Sigma) = D (z, V_z, S_{\perp}, \Sigma)$, тогда

$$\begin{aligned} & \frac{d}{dz} D' (t (z), V_z, z, S_{\perp}, \Sigma) = \frac{\partial}{\partial z} D (z, V_z, S_{\perp}, \Sigma); \\ & \frac{\partial}{\partial z} D (z, V_z, S_{\perp}, \Sigma) = \frac{1}{V_z} \mathcal{L} (S_{\perp} \Sigma) D (z, V_z, S_{\perp}, \Sigma). \end{aligned}$$

Уравнение (3) нельзя еще рассматривать как уравнение Лиувилля для $(S + \Sigma)$ -системы относительно z -эволюции, так как оно не сохраняет нормировку функции $D (z, V_z, S_{\perp}, \Sigma)$, т. е.

$$\int (dV_z dS_{\perp} d\Sigma) D (z, V_z, S_{\perp}, \Sigma) = \varphi (z).$$

В этом можно убедиться непосредственно, интегрируя по V_z, S_{\perp}, Σ обе части уравнения (3). Поэтому проведем дальнейшую редукцию фазового пространства с $V_z, S_{\perp}, \Sigma \Rightarrow S_{\perp}, \Sigma$. С этой целью будем считать, что зависимость $D (z, V_z, S_{\perp}, \Sigma)$ от V_z полностью определяется эволюционным, детерминированным параметром z и стохастическими переменными S_{\perp}, Σ , т. е. V_z является не независимой переменной описания, а наблюдаемой z -эволюционного процесса на фазовом пространстве событий S_{\perp}, Σ .

Отсюда имеем:

$$\left. \begin{aligned} & \frac{\partial}{\partial z} D(z, V_z(z, S_{\perp}, \Sigma), S_{\perp}, \Sigma) = \\ & = \frac{d}{dz} D(z, V_z(z, S_{\perp}, \Sigma), S_{\perp}, \Sigma) - \\ & - \frac{\partial}{\partial V_z} D(z, V_z(z, S_{\perp}, \Sigma), S_{\perp}, \Sigma) \frac{\partial V_z(z, S_{\perp}, \Sigma)}{\partial z}. \end{aligned} \right\} \quad (4)$$

Подставим (4) в левую часть уравнения (3) и приравняем коэффициенты при членах уравнения $\frac{\partial}{\partial V_z} D(z, V_z, S_{\perp}, \Sigma)$. Получим уравнение для $V_z(z, S_{\perp}, \Sigma)$:

$$\frac{\partial}{\partial z} V_z(z, S_{\perp}, \Sigma) = - \frac{1}{V_z(z, S_{\perp}, \Sigma) M} \sum_{j=1}^N \frac{\partial}{\partial z} U(\mathbf{R} - \mathbf{r}_j) \quad (5)$$

или

$$V_z(z, S_{\perp}, \Sigma) = \sqrt{V_0^2 - \frac{2}{M} \int_0^z \sum_{j=1}^N \frac{\partial}{\partial \tau} U_{\tau}(\mathbf{R} - \mathbf{r}_j) d\tau}, \quad (6)$$

где $V_0 = \sqrt{2E_0/M} = V_z(z, S_{\perp}, \Sigma) |_{z=0}$ ($z = 0$ отвечает входу частицы в кристалл); индекс τ у U означает, что z — координата вектора \mathbf{R} — заменена на τ . Проведенное выше обсуждение вполне аналогично известной гипотезе Боголюбова о сокращении описания для перенормировки теории возмущения и устранения «секулярной» зависимости от времени в работах по кинетической теории [22]. Из (6) имеем

$$\begin{aligned} \frac{1}{V_z(z, S_{\perp}, \Sigma)} &= \frac{1}{V_0} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(2n-1)!!}{2^n V_0^{2n}} \left(\frac{2}{M} \int_0^z d\tau \sum_{j=1}^N \frac{\partial}{\partial \tau} U_{\tau}(\mathbf{R} - \mathbf{r}) \right)^n = \\ &= \frac{1}{V_0} + F(z, S_{\perp}, \Sigma). \end{aligned} \quad (7)$$

После указанных преобразований уравнение (3) принимает вид

$$\frac{\partial}{\partial z} D(z, S_{\perp}, \Sigma) = \left[\frac{1}{V_0} + F(z, S_{\perp}, \Sigma) \right] L(S_{\perp}, \Sigma) D(z, S_{\perp}, \Sigma), \quad (8)$$

где

$$\frac{\partial}{\partial z} D(z, V_z, (z, S_{\perp}, \Sigma), S_{\perp}, \Sigma) = \frac{\partial}{\partial z} D(z, S_{\perp}, \Sigma).$$

Нетрудно убедиться, что нормировка функции $D(z, S_{\perp}, \Sigma)$, подчиняющейся уравнению (8), сохраняется при z -эволюции. Заметим, что проделанные над (3) преобразования тождественны в том смысле, что любое решение уравнения (8) является решением (3),

и наоборот, любое решение уравнения (3) с дополнительным условием (5) есть решение (8). Таким образом, наше предположение о характере зависимости $D(z, V_z, S_{\perp}, \Sigma)$ от V_z эквивалентно сужению интегрального многообразия (3). Уравнение (8) составит основу дальнейшего исследования. Оно будет рассматриваться как уравнение Лиувилля, описывающее z -эволюцию S - и Σ -систем. Для получения уравнения относительно функции $f(zS_{\perp})$ будем следовать [9], при этом определение функции $\Delta(zS_{\perp}, \Sigma)$, или, что тоже самое, выбор проекционных операторов [23—25], однозначно диктуется граничными условиями задачи:

$$D(zS_{\perp}, \Sigma)_{z=0} = f(0S_{\perp}) D_0(\Sigma),$$

где $D_0(\Sigma)$ — распределение Гиббса для кристалла; $f(0S_{\perp})$ — начальное распределение для частицы.

Определим проекционные операторы \hat{P}_0 , \hat{P} формулами:

$$\hat{P}_0 = \int (d\Sigma) \dots; \hat{P} = D_0(\Sigma) \hat{P}_0 \quad (9)$$

и функции $\Delta(zS_{\perp}, \Sigma)$ и $f(zS_{\perp})$:

$$f(zS_{\perp}) = \hat{P}_0 D(zS_{\perp}, \Sigma); \Delta(zS_{\perp}, \Sigma) = [1 - \hat{P}] D(zS_{\perp}, \Sigma). \quad (10)$$

Заметим, что

$$\Delta(zS_{\perp}, \Sigma)_{z=0} = 0. \quad (11)$$

Используя определения (9) и (10) из уравнения (8), можно получить следующую систему уравнений относительно функций $\Delta(zS_{\perp}, \Sigma)$, $f(zS_{\perp})$:

$$\left. \begin{aligned} \frac{\partial}{\partial z} f(zS_{\perp}) &= \hat{P}_0 \left[\frac{1}{V_0} + F(zS_{\perp}, \Sigma) \right] \mathcal{L}(S_{\perp}, \Sigma) D_0(\Sigma) f(zS_{\perp}) + \\ &+ \hat{P}_0 \left[\frac{1}{V_0} + F(zS_{\perp}, \Sigma) \right] \mathcal{L}(S_{\perp}, \Sigma) \Delta(zS_{\perp}, \Sigma); \\ \frac{\partial}{\partial z} \Delta(zS_{\perp}, \Sigma) &= [1 - \hat{P}] \left[\frac{1}{V_0} + F(zS_{\perp}, \Sigma) \right] \mathcal{L}(S_{\perp}, \Sigma) \Delta(zS_{\perp}, \Sigma) + \\ &+ [1 - \hat{P}] \left[\frac{1}{V_0} + F(zS_{\perp}, \Sigma) \right] \mathcal{L}(S_{\perp}, \Sigma) D_0(\Sigma) f(zS_{\perp}). \end{aligned} \right\} \quad (12)$$

Из системы уравнений (12) необходимо исключить функцию $\Delta(zS_{\perp}, \Sigma)$. Для этого рассмотрим уравнение

$$\frac{\partial}{\partial z} \varphi(zS_{\perp}, \Sigma) = \hat{\mathcal{L}}(z) \varphi(zS_{\perp}, \Sigma), \quad (13)$$

где $\hat{\mathcal{L}}(z) = [1 - \hat{P}] [1/V_0 + F(zS_{\perp}, \Sigma)] \mathcal{L}(S_{\perp}, \Sigma)$. Решение (13) с любой начальной $\varphi(0, S_{\perp}, \Sigma)$ можно формально представить

в виде

$$\varphi(zS_{\perp}\Sigma) = T \exp \left[\int_0^z d\tau \mathcal{L}'(\tau) \right] \varphi(0, S_{\perp}, \Sigma). \quad (14)$$

Символ T означает операцию упорядочения по параметру z .

Введем оператор $\hat{\Gamma}(z)$, который является левым обратным по отношению к оператору T -экспоненты от оператора $\mathcal{L}(z)$, т. е.

$$\hat{\Gamma}(z) T \exp \left[\int_0^z d\tau \mathcal{L}(\tau) \right] = 1. \quad (15)$$

После этого во втором уравнении (12) перейдем от функции $\Delta(zS_{\perp}\Sigma)$ к функции $\psi(zS_{\perp}\Sigma)$ по формуле

$$\Delta(zS_{\perp}\Sigma) = T \exp \left[\int_0^z d\tau \mathcal{L}(\tau) \right] \psi(zS_{\perp}\Sigma). \quad (16)$$

Для $\psi(zS_{\perp}\Sigma)$ имеем уравнение

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial z} \psi(zS_{\perp}\Sigma) &= \hat{\Gamma}(z) [1 - \hat{P}] \left[\frac{1}{V_0} + F(zS_{\perp}\Sigma) \right] \times \\ &\times \mathcal{L}(S_{\perp}\Sigma) D_0(\Sigma) f(zS_{\perp}); \quad \psi(zS_{\perp}\Sigma)_{z=0} = 0. \end{aligned} \quad (17)$$

Откуда для $\psi(zS_{\perp}\Sigma)$ имеем

$$\begin{aligned} \psi(zS_{\perp}\Sigma) &= \int_0^z d\tau \hat{\Gamma}(\tau) [1 - \hat{P}] \left[\frac{1}{V_0} + F(\tau S_{\perp}\Sigma) \right] \mathcal{L}_{\tau} \times \\ &\times (S_{\perp}\Sigma) D_0(\Sigma) f(\tau S_{\perp}), \end{aligned} \quad (18)$$

где $\mathcal{L}_{\tau}(S_{\perp}\Sigma)$ означает, что координата z в выражении $\mathcal{L}(S_{\perp}\Sigma)$ заменена на τ . Используя (16) — (18), получим

$$\begin{aligned} \Delta(zS_{\perp}\Sigma) &= T \exp \left[\int_0^z \mathcal{L}(\tau) d\tau \right] \int_0^z d\tau \hat{\Gamma}(\tau) \times \\ &\times [1 - \hat{P}] \left[\frac{1}{V_0} + F(\tau S_{\perp}\Sigma) \right] \mathcal{L}_{\tau}(S_{\perp}\Sigma) D_0(\Sigma) f(\tau S_{\perp}). \end{aligned} \quad (19)$$

Подставив (19) в первое уравнение (12), получим замкнутое, формально точное уравнение относительно $f(\tau S_{\perp})$:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial z} f(zS_{\perp}) &= \hat{P}_0 \left[\frac{1}{V_0} + F(zS_{\perp}\Sigma) \right] \mathcal{L}(S_{\perp}\Sigma) D_0(\Sigma) f(zS_{\perp}) + \\ &+ \hat{P}_0 \left[\frac{1}{V_0} + F(zS_{\perp}\Sigma) \right] \mathcal{L}(S_{\perp}\Sigma) T \exp \left[\int_0^z \mathcal{L}(\tau) d\tau \right] \times \\ &\times \int_0^z d\tau \hat{\Gamma}(\tau) [1 - \hat{P}] \left[\frac{1}{V_0} + F(\tau S_{\perp}\Sigma) \right] \mathcal{L}_{\tau}(S_{\perp}\Sigma) D_0(\Sigma) f(\tau S_{\perp}). \end{aligned} \quad (20)$$

Как уже неоднократно подчеркивалось выше (см. также [7]), уравнение (20) носит формальный характер. Для получения содержательной физической информации разовьем теорию возмущения для (20). С этой целью каждой физической величине припишем определенный характерный масштаб ее измерения, что делает уравнение (20) или систему уравнений (12) безразмерными. В результате появится возможность контроля по порядку величины каждого члена уравнения. Итак введем:

$$\left. \begin{aligned} \mathbf{R} &= \varepsilon \mathbf{R}; \mathbf{r}_j = \varepsilon \mathbf{r}_j; \mathbf{V}_\perp = v_\perp \mathbf{V}_\perp; \\ V_z &= V_0 V_z; V_0 = \sqrt{2E_0/M}; U(\mathbf{R}) = \Phi_0 U(\mathbf{R}). \end{aligned} \right\} \quad (21)$$

Для каналирования характерны следующие соотношения между масштабами величин (21):

$$\left. \begin{aligned} v_\perp/V_0 &= \varepsilon \ll 1; \Phi_0/(Mv_\perp^2) \sim 1; \Phi_0/(V_0 M v_\perp) \sim \varepsilon; \\ \Phi_0/E_0 &= 2\Phi_0 M v_\perp^2 / (M v_\perp^2 M V_0^2) \sim (v_\perp/V_0)^2 \sim (\varepsilon^2); l \sim a. \end{aligned} \right\} \quad (22)$$

Заметим, что в Φ_0 входит некий эффективный множитель, связанный с числом одновременно взаимодействующих с частицей ионов.

2. о (ε)-ПРИБЛИЖЕНИЕ

Используя (21), обезразмерим уравнение (20) и оставим в правой его части величины порядка $o(\varepsilon)$. В результате получим следующее простое уравнение:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial z} f(zS_\perp) &= -\sqrt{\frac{M}{2E_0}} \mathbf{V}_\perp \cdot \nabla_{\mathbf{R}_\perp} f(zS_\perp) + \frac{1}{\sqrt{2E_0 M}} \times \\ &\times \left\langle \sum_{j=1}^N \nabla_{\mathbf{R}_\perp} U(\mathbf{R} - \mathbf{r}_j) \right\rangle_\Sigma \nabla_{V_\perp} f(zS_\perp), \end{aligned} \quad (23)$$

где скобки $\langle \dots \rangle_\Sigma$ означают усреднение величины, стоящей в них, по распределению Гиббса для кристалла. Уравнение (23) описывает движение частицы массы M в поле кристаллической решетки без учета процессов взаимного обмена энергии между ними. Уравнение (23) можно сразу получить из (8), если искать $D(zS_\perp, \Sigma)$ в виде $D(zS_\perp, \Sigma) = D_0(\Sigma) f(zS_\perp)$, т. е. полностью пренебречь изменением состояния кристаллической подсистемы в результате z -эволюции. Поэтому естественно приближение (23) назвать *адиабатическим*. Роль кристалла в этом приближении сводится только лишь к формированию рельефа поверхности потенциальной энергии в конфигурационном пространстве частицы и обеспечивает возможные направления каналирования частиц. Все фазовое пространство состояний S_\perp частицы делится на две части, которые не пересекаются между собой в процессе z -эволюции; первая

отвечает захвату частиц в канал движения в данном направлении каналирования, вторая относится к деканалированию и обеспечивает пространственное распределение частиц в экспериментах по рассеянию. Естественно считать, что уравнение (23) описывает картину каналирования на очень малых глубинах проникновения и, по существу, пригодно только для расчета энергетических характеристик захвата частиц в каналы движения и описания рассеяния частиц на кристаллах в режиме каналирования на небольших глубинах проникновения z .

3. ОСЕВОЕ КАНАЛИРОВАНИЕ ПОЛОЖИТЕЛЬНО ЗАРЯЖЕННЫХ ЧАСТИЦ

Обратимся к расчету величины $\langle \sum_{j=1}^N U(\mathbf{R} - \mathbf{z}_j) \rangle_{\Sigma}$. Для простоты будем считать, что кристалл имеет симметрию кубической решетки и ограничимся его гармоническим приближением. Тогда согласно [26] имеем

$$\begin{aligned}
 \left\langle \sum_{j=1}^N U(\mathbf{R} - \mathbf{z}_j) \right\rangle_{\Sigma} &= \frac{1}{v} v(0) + \frac{2}{v} \sum_{n=1}^{\infty} v(q_0 n) \exp[-n^2 W_{\theta}(q_0)] \times \\
 &\times \cos(nq_0 z) \frac{2}{v} + \frac{2}{v} \sum_{m=1}^{\infty} v(q_0 m) \exp[-m^2 W_{\theta}(q_0)] \cos(mq_0 x) + \\
 &+ \frac{2}{v} \sum_{l=1}^{\infty} v(q_0 l) \exp[-l^2 W_{\theta}(q_0)] \cos(lq_0 y) + \\
 &+ \frac{4}{v} \sum_{n, m=1}^{\infty} v(q_0 \sqrt{n^2 + m^2}) \exp[-(n^2 + m^2) W_{\theta}(q_0)] \cos(nq_0 z) \times \\
 &\times \cos(mq_0 x) + \frac{4}{v} \sum_{n, l=1}^{\infty} v(q_0 \sqrt{n^2 + l^2}) \exp[-(n^2 + l^2) W_{\theta}(q_0)] \times \\
 &\times \cos(lq_0 y) \cos(nq_0 z) + \frac{4}{v} \sum_{l, m=1}^{\infty} v(q_0 \sqrt{l^2 + m^2}) \times \\
 &\times \exp[-(l^2 + m^2) W_{\theta}(q_0)] \cos(lq_0 y) \cos(mq_0 x) + \\
 &+ \frac{8}{v} \sum_{n, m, l=1}^{\infty} v(q_0 \sqrt{n^2 + m^2 + l^2}) \times \\
 &\times \exp[-(n^2 + m^2 + l^2) W_{\theta}(q_0)] \cos(lq_0 y) \times \\
 &\times \cos(mq_0 x) \cos(nq_0 z) \quad *, \tag{24}
 \end{aligned}$$

* Для некоторых видов далекодействующих потенциалов не существует $v(0)$. Однако значение потенциальной энергии (24) всегда можно переопределить на эту компоненту.

где $\nu = \Omega/N$; Ω — объем кристалла; n, m, l — целые положительные числа; N — число узлов, $q_0 = 2\pi/a$; a — постоянная решетки; $\nu(k)$ — фурье-образ потенциала взаимодействия частицы с ионом; $W_\Theta(q_0)$ — фактор Дебая — Валлера. В данном частном случае он дается выражением [28]

$$W_\Theta(q_0) = \frac{\nu \Theta(q_0^2)}{(2\pi)^3 6m} \sum_{S=1}^3 \int_0^{q_0} dq \frac{1}{\omega_S^2(q)}. \quad (25)$$

Конкретный вид (24) для $\langle \sum_{j=1}^N U(\mathbf{R} - \mathbf{r}_j) \rangle_\Sigma$ связан с частным выбором системы координат, в которой описывается движение частиц (рис. 1). Действительно, положению частицы $\mathbf{R}_\perp = 0$,

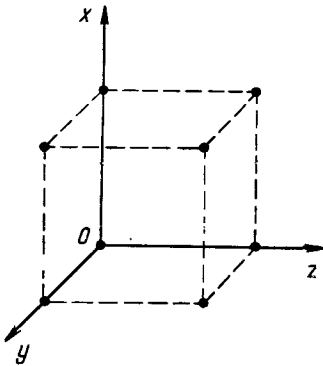


Рис. 1

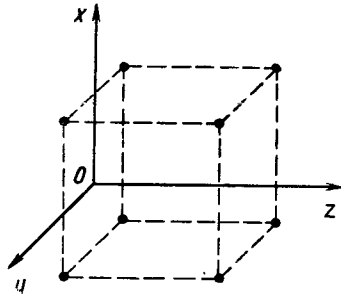


Рис. 2

согласно (24), отвечает максимум потенциальной энергии. (Для положительно заряженных частиц $U(\mathbf{R} - \mathbf{r}_j) > 0$.) Удобно при осевом каналировании выбрать систему координат, так как указано на рис. 2. Ось z совпадает с «серединой» канала движения частиц, отвечающей минимуму потенциальной энергии поля кристаллической решетки.

Такой выбор системы координат связан со следующей заменой в формуле (24):

$$\cos [mq_0x] \rightarrow (-1)^m \cos [mq_0x]; \quad \cos [lq_0y] \rightarrow (-1)^l \cos [lq_0y].$$

В итоге (24) можно представить в виде

$$\begin{aligned} & \left\langle \sum_{j=1}^N U(\mathbf{R} - \mathbf{r}_j) \right\rangle_\Sigma = \\ & = \frac{2}{\nu} \sum_{n=1}^{\infty} \nu(q_0 n) \exp[-n^2 W_\Theta(q_0)] \{ \cos(q_0 n z) + \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 &+ (-1)^n \cos(q_0 n x) + (-1)^n \cos(q_0 n y)] \} + \\
 &+ \frac{4}{v} \sum_{n, l=1}^{\infty} v(q_0 \sqrt{n^2 + l^2}) \times \\
 &\times \exp[-(n^2 + l^2) W_{\Theta}(q_0) \{(-1)^l \cos(l q_0 x) \cos(n q_0 z) + \\
 &+ (-1)^l (-1)^n \cos(l q_0 x) \cos(q_0 n y) + (-1)^l \cos(l q_0 y) \times \\
 &\times \cos(q_0 y z)\} + \frac{8}{v} \sum_{n, m, l=1}^{\infty} v(q_0 \sqrt{n^2 + m^2 + l^2}) \exp[-(n^2 + m^2 + l^2) \times \\
 &\times W_{\Theta}(q_0)] \cos(n q_0 z) (-1)^l (-1)^m \cos(l q_0 y) \cos(m q_0 x). \quad (26)
 \end{aligned}$$

Вернемся к уравнению (23). Оно имеет следующую структуру:

$$\frac{\partial}{\partial z} f(z S_{\perp}) = \varepsilon \hat{A}(z S_{\perp}) f(z S_{\perp}), \quad (27)$$

где

$$\begin{aligned}
 \hat{A}(z S_{\perp}) = & - \sqrt{\frac{M}{2E_0}} \mathbf{v}_{\perp} \cdot \nabla_{\mathbf{v}_{\perp}} + \\
 & + \frac{1}{\sqrt{2E_0 M}} \left\langle \sum_{j=1}^N \nabla_{\mathbf{R}_{\perp j}} U(\mathbf{R} - \mathbf{r}_j) \right\rangle \nabla_{\mathbf{v}_{\perp}}.
 \end{aligned}$$

Учитывая выражение (26), видим, что коэффициент при малом параметре, $\hat{A}(z S_{\perp})$, представляется в виде суммы двух операторов: операторозначной функции, не зависящей от z $\hat{A}_1(S_{\perp})$, и быстро осцилляторной операторозначной функции $A_2(z S_{\perp})$ по z . Уравнения такого типа можно решать методом усреднения [27], развитым в нелинейной механике. Суть его заключается в том, что уравнение (27) можно с определенной степенью точности аппроксимировать уравнением вида

$$\frac{\partial}{\partial z} f(z S_{\perp}) = \varepsilon \hat{Q}(S_{\perp}) f(z S_{\perp}), \quad (28)$$

где

$$\hat{Q}(S_{\perp}) = \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{T} \int_0^T d\tau \hat{A}(\tau S_{\perp}) = \hat{A}_1(S_{\perp}).$$

Усреднение операторов будем в дальнейшем обозначать чертой сверху. Так как операция $\nabla_{\mathbf{R}_{\perp j}}$ коммутирует с усреднением, то

можно усреднить сразу выражение (26):

$$\begin{aligned} & \left\langle \sum_j U(\mathbf{R} - \mathbf{r}_j) \right\rangle_{\Sigma} = \\ & = \frac{1}{v} v(0) + \frac{2}{v} \sum_{m=1}^{\infty} v(q_0 m) \exp[-m^2 W_{\Theta}(q_0)] \times \\ & \quad \times [\cos(mq_0 x) (-1)^m + \cos(mq_0 y) (-1)^m] + \\ & \quad + \frac{4}{v} \sum_{n, m=1}^{\infty} v(q_0 \sqrt{n^2 + m^2}) \times \\ & \quad \times \exp[-(n^2 + m^2) W_{\Theta}(q_0)] (-1)^m (-1)^n \cos(nq_0 x) \cos(mq_0 y). \quad (29) \end{aligned}$$

Но поле (29) есть не что иное, как «continuum potential» модель, предложенная Линдхардом для классического описания каналирования, при этом в (29) дополнительно проведено усреднение по фоновым колебаниям решетки [1]. Центральной идеей этой модели являлось предположение, что каналируемая частица не чувствует отдельного иона решетки, а взаимодействует сразу с рядами, или плоскостями, сильно скоррелированных ионов. Таким образом, $o(\epsilon)$ -приближение, или адиабатическое приближение, уравнения (20) приводит к модели Линдхарда. Учет индивидуального влияния «ребенки» ионов можно производить, решая (23) методом теории возмущения, используя в качестве нулевого приближения усредненное решение.

4. ГАРМОНИЧЕСКОЕ ПРИБЛИЖЕНИЕ ДЛЯ ТРАЕКТОРИИ КАНАЛИРУЕМОЙ ЧАСТИЦЫ

Решение усредненного уравнения (23)

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial z} f(zS_{\perp}) &= - \sqrt{\frac{M}{2E_0}} \mathbf{V}_{\perp} \cdot \nabla_{\mathbf{R}_{\perp}} f(zS_{\perp}) + \\ & + \frac{1}{\sqrt{2E_0 M}} \times \overline{\left\langle \sum_{j=1}^N \nabla_{\mathbf{R}_{\perp}} U(\mathbf{R} - \mathbf{r}_j) \right\rangle_{\Sigma}} \nabla_{\mathbf{V}_{\perp}} f(zS_{\perp}) \quad (30) \end{aligned}$$

можно представить в виде

$$f(zS_{\perp}) = g(T_{-z} S_{\perp}), \quad (31)$$

где $g(S_{\perp})$ — начальная функция распределения и оператор T_z , определенный на S_{\perp} уравнениями:

$$\left. \begin{aligned} \frac{\partial x}{\partial t} &= V_x; \\ \frac{\partial y}{\partial t} &= V_y; \\ t &= \sqrt{\frac{M}{2E_0}} z; \\ \frac{\partial}{\partial t} V_x &= -\frac{\partial}{\partial x} \left\langle \sum_{j=1}^N U(\mathbf{R} - \mathbf{r}_j) \right\rangle_{\Sigma} \frac{1}{M}; \\ \frac{\partial}{\partial t} V_y &= -\frac{\partial}{\partial y} \left\langle \sum_{j=1}^N U(\mathbf{R} - \mathbf{r}_j) \right\rangle_{\Sigma} \frac{1}{M}. \end{aligned} \right\} \quad (32)$$

Ограничимся в ряде (29) первым членом. Такое приближение может быть оправдано в случае, когда $U(\mathbf{R})$ носит дальнедействующий характер, что реально отвечает канализованию тяжелых ионов [2]. Тогда основной вклад в сумме (29) отвечает малым значениям (n, m) . В итоге из (32) получим

$$\left. \begin{aligned} \frac{\partial^2 x}{\partial t^2} &= -\frac{2q_0}{Mv} v(q_0) \sin(q_0 x) \exp[-W_{\Theta}(q_0)]; \\ \frac{\partial^2 y}{\partial t^2} &= -\frac{2q_0}{Mv} v(q_0) \sin(q_0 y) \exp[-W_{\Theta}(q_0)]. \end{aligned} \right\} \quad (33)$$

Система уравнений (32) при известных ограничениях на начальные условия (малые значения V_x^0, V_y^0) описывает колебания около положения равновесия, которые можно рассчитать в гармоническом приближении:

$$\left. \begin{aligned} q_0 x &\ll \pi/2; \quad q_0 y \ll \pi/2; \\ \frac{\partial^2}{\partial t^2} x &= -\Re(\Theta q_0) x; \quad \frac{\partial^2}{\partial t^2} y = -\Re(\Theta q_0) y; \\ \Re(\Theta q_0) &= \omega^2(\Theta) = \frac{2q_0^2}{Mv} v(q_0) \exp[-W_{\Theta}(q_0)]. \end{aligned} \right\} \quad (34)$$

Оператор T_z , отвечающий гармоническому приближению, есть

$$\left. \begin{aligned} T_z \begin{pmatrix} x \\ V_x \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} y \\ V_y \end{pmatrix} &= T_z \begin{pmatrix} x \\ V_x \end{pmatrix} \otimes T_z \begin{pmatrix} y \\ V_y \end{pmatrix}; \\ T_z &= \begin{pmatrix} \cos\left(\sqrt{\frac{M}{2E_0}} \omega_{\Theta} z\right) & \frac{1}{\omega_{\Theta}} \sin\left(\sqrt{\frac{M}{2E_0}} \omega_{\Theta} z\right) \\ -\omega_{\Theta} \sin\left(\sqrt{\frac{M}{2E_0}} \omega_{\Theta} z\right) & \cos\left(\sqrt{\frac{M}{2E_0}} \omega_{\Theta} z\right) \end{pmatrix}. \end{aligned} \right\} \quad (35)$$

Здесь символ \otimes означает тензорное произведение. Заметим, что в силу приближенного решения задачи (32) оператор T_z определен

не на всем фазовом пространстве. Можно получить оценки на область его определения. Ей отвечают внутренние точки эллипса [11]:

$$\begin{aligned}x^2 \omega_{\Theta}^2 + V_x^2 &= (\omega_{\Theta} a / 12)^2; \\ y^2 \omega_{\Theta}^2 + V_y^2 &= (\omega_{\Theta} a / 12)^2.\end{aligned}\quad (36)$$

Траектория частицы в гармоническом приближении имеет вид

$$\begin{bmatrix} x(z) \\ y(z) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} x_0 \\ y_0 \end{bmatrix} \cos \left(\sqrt{\frac{M}{2E_0}} \omega_{\Theta} z \right) + \frac{1}{\omega_{\Theta}} \begin{bmatrix} V_x^0 \\ V_y^0 \end{bmatrix} \sin \left(\sqrt{\frac{M}{2E_0}} \omega_{\Theta} z \right), \quad (37)$$

где $\begin{bmatrix} x_0 \\ y_0 \end{bmatrix}$, $\begin{bmatrix} V_x^0 \\ V_y^0 \end{bmatrix}$ — начальное положение и скорость частицы в точке $z = 0$.

Далее, учтем по теории возмущения члены уравнения (23), отброшенные при усреднении, и получим поправки к гармоническому приближению траектории (37) при каналировании. С учетом первых по величине членов быстроосцилляторного характера уравнение движения для $f(zS_{\perp})$ в гармоническом приближении имеет вид

$$\begin{aligned}\frac{\partial}{\partial z} f(zS_{\perp}) &= -\sqrt{\frac{M}{2E_0}} \mathbf{V}_{\perp} \cdot \nabla_{R_{\perp}} f(zS_{\perp}) + \\ &+ \sqrt{\frac{M}{2E_0}} [R(\Theta q_0) + h(\Theta q_0 z)] \left[x \frac{\partial}{\partial V_y} + y \frac{\partial}{\partial V_x} \right] f(zS_{\perp}),\end{aligned}\quad (38)$$

где

$$\begin{aligned}h(\Theta q_0 z) &= \frac{4q_0^2}{Mv} v(q_0 \sqrt{2}) \exp[-2W_{\Theta}(q_0)] \cos(q_0 z) - \\ &- \frac{8q_0^2}{Mv} v(q_0 \sqrt{3}) \exp[-3W_{\Theta}(q_0)] \cos(q_0 z).\end{aligned}$$

Используя в качестве нулевого приближения для траектории каналирования частицы выражение (37), получим для траектории частицы в гармоническом приближении в первом порядке теории возмущения следующее выражение:

$$\begin{bmatrix} x(z) \\ y(z) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} A_x(z) \\ A_y(z) \end{bmatrix} \cos \left(\omega_{\Theta} \sqrt{\frac{M}{2E_0}} z \right) + \begin{bmatrix} B_x(z) \\ B_y(z) \end{bmatrix} \sin \left(\omega_{\Theta} \sqrt{\frac{M}{2E_0}} z \right), \quad (39)$$

где

$$\begin{aligned}A_{\begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix}}(z) &= \begin{pmatrix} x_0 \\ y_0 \end{pmatrix} + \int_0^z d\tau \sqrt{\frac{M}{2E_0}} h(\Theta q_0 \tau) \left\{ \frac{1}{\omega_{\Theta}} \begin{pmatrix} x_0 \\ y_0 \end{pmatrix} \times \right. \\ &\times \sin \left(2\omega_{\Theta} \sqrt{\frac{M}{2E_0}} \tau \right) - \frac{1}{\omega_{\Theta}^2} \begin{pmatrix} V_x^0 \\ V_y^0 \end{pmatrix} \sin^2 \left(\omega_{\Theta} \sqrt{\frac{M}{2E_0}} \tau \right) \left. \right\};\end{aligned}$$

$$B_{\begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix}}(z) = \frac{1}{\omega_{\Theta}} \begin{pmatrix} V_0^x \\ V_0^y \end{pmatrix} + \sqrt{\frac{M}{2E_0}} \int_0^z d\tau h(\Theta q_0 \tau) \left\{ \frac{1}{2\omega_{\Theta}^2} \begin{bmatrix} V_0^x \\ V_0^y \end{bmatrix} \times \right. \\ \left. \times \sin \left(2\omega_{\Theta} \sqrt{\frac{M}{2E_0}} \tau \right) - \frac{1}{\omega_{\Theta}} \begin{pmatrix} x_0 \\ y_0 \end{pmatrix} \sin^2 \left(\omega_{\Theta} \sqrt{\frac{M}{2E_0}} \tau \right) \right\}.$$

Учет осцилляторных членов в уравнении (23) приводит к модуляции амплитуды каналируемой частицы, которая определяется проявлением индивидуального влияния ионов кристалла.

Используя выражение (29), можно оценить критический угол влета частиц в кристалл, который определяет захват частиц в режим каналирования. При осевом каналировании в кубическом кристалле

$$\frac{M(V_0 \sin \alpha_c)^2}{2} = \overline{\left\langle \sum_{j=1}^N U(\mathbf{R} - \mathbf{r}_j) \right\rangle_{\substack{\Sigma_{x=a/2} \\ y=0}}^*} = \overline{\left\langle \sum_{j=1}^N U(\mathbf{R} - \mathbf{r}_j) \right\rangle_{\substack{\Sigma_{x=0} \\ y=a/2}}^*}; \quad (40)$$

$$\overline{\left\langle \sum_j U(\mathbf{R} - \mathbf{r}_j) \right\rangle_{\Sigma}^*} = \overline{\left\langle \sum_{j=1}^N U(\mathbf{R} - \mathbf{r}_j) \right\rangle_{\Sigma}} - \overline{\left\langle \sum_{j=1}^N U(\mathbf{R} - \mathbf{r}_j) \right\rangle_{\substack{\Sigma_{x=0} \\ y=0}}}$$

Откуда с учетом того, что $\sin \alpha_c \sim \alpha_c$, при малых α_c имеем

$$\alpha_c = \left(\overline{\left\langle \sum_{j=1}^N U(\mathbf{R} - \mathbf{r}_j) \right\rangle_{\substack{\Sigma_{x=a/2} \\ y=0}}^*} / E_0 \right)^{1/2}. \quad (41)$$

5. ПЛОСКОСТНОЕ КАНАЛИРОВАНИЕ ПОЛОЖИТЕЛЬНО ЗАРЯЖЕННЫХ ЧАСТИЦ

Рассмотрим теперь ситуацию, когда направление канала движения частиц составляет произвольный угол с кристаллографической осью. Снова будем считать, что кристалл обладает кубической симметрией и применимо гармоническое приближение. В силу трансляционной симметрии решетки на средние вида

$$\overline{\left\langle \sum_{j=1}^N \exp(-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}) \right\rangle_{\Sigma}}$$

существуют определенные правила отбора по \mathbf{k} .

Однако если при плоскостном каналировании наша система координат расположена так, что оси симметрии кристалла не параллельны осям системы координат, то правила отбора по \mathbf{k} будут несколько иными, чем ранее. Обозначим o, x, y, z систему координат, в которой будем рассматривать движение частицы. Ось z направим вдоль канала движения частицы. Систему координат

o, x, x', y', z' выберем так, чтобы ее оси ox', oy', oz' совпадали с направлениями главных кристаллографических осей кубического кристалла. Таким образом, как видно из рис. 3, направление каналирования oz составляет угол α с направлением кристаллографической оси oz' . Ось ox совпадает с осью ox' . Уравнение (23) записано в системе координат o, x, y, z' . Правила же отбора на корреляционные средние по кристаллической подсистеме очень простым образом устанавливаются в системе координат o, x', y', z' , так как в ней главные оси симметрии группы трансляций кристалла совпадают с направлениями осей координат. Выражая значение $\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_j$ в системе координат o, x', y', z' , имеем

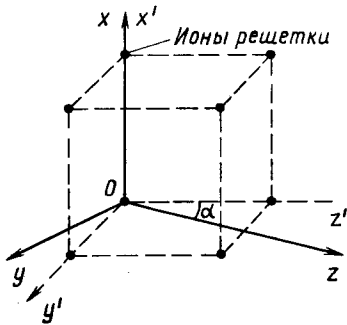


Рис. 3

$\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_j = k_x x_j + k_z z_j + k_y y_j;$
 $x_j = x'_j,$
 $y_j = y'_j \cos \alpha - z'_j \sin \alpha;$
 $z_j = z'_j \cos \alpha + y'_j \sin \alpha,$

$$(42)$$

откуда

$$\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_j = k_x x'_j + y'_j (k_y \cos \alpha + k_z \sin \alpha) + z'_j (k_z \cos \alpha - k_y \sin \alpha) \quad (43)$$

и

$$\left\langle \sum_{j=1}^N \exp(-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_j) \right\rangle_{\Sigma} = \left\langle \sum_{j=1}^N \exp[-ik_x x'_j - iy'_j (k_z \sin \alpha + k_y \cos \alpha) - iz'_j (k_z \cos \alpha - k_y \sin \alpha)] \right\rangle_{\Sigma}. \quad (44)$$

Так как оси ox, oy', oz' совпадают с главными осями трансляционной симметрии кристалла, то среднее (44) не должно измениться при трансляции в направлениях ox', oy', oz' на величину, кратную постоянной решетки. Отсюда для k_x, k_y, k_z имеем:

$$\begin{aligned} k_z &= q_0 (n \cos \alpha + l \sin \alpha); \\ k_y &= q_0 (l \cos \alpha - n \sin \alpha); \\ k_x &= q_0 m, \end{aligned} \quad (45)$$

где $q_0 = 2\pi/a$; n, m, l — целые положительные числа от $-\infty$ до $+\infty$.

Квадрат вектора при поворотах оси координат является инвариантом, поэтому $(\mathbf{k}')^2 = (\mathbf{k})^2$. Учитывая это, а также явный вид

выражения для фактора Дебая — Валлера [28], получаем

$$\begin{aligned} & \frac{1}{v} \sum_k v(k) \exp(\mathbf{ik} \cdot \mathbf{R}) \frac{1}{N} \left\langle \sum_{j=1}^N \exp(-\mathbf{ik} \cdot \mathbf{r}_j) \right\rangle_{\Sigma} = \\ & = \frac{1}{v} \sum_{n, m, l} v(q_0 \sqrt{n^2 + m^2 + l^2}) \exp [(-n^2 - l^2 - m^2) W_{\Theta}(q_0)] \times \\ & \times \exp [iq_0 m x] \exp [iq_0 n (z \cos \alpha - y \sin \alpha)] \exp [iq_0 l (z \sin \alpha + y \cos \alpha)]. \end{aligned} \quad (46)$$

В дальнейшем для описания эффекта каналирования будет удобно сдвинуть систему координат o, x, y, z на вектор \mathbf{b} так, чтобы ось каналирования oz совпадала с линией минимума потенциальной энергии на энергетической поверхности, отвечающей данному направлению α :

$$\mathbf{b} = (b_x, b_y, b_z) = (b_1, b_2 \cos \alpha - b_3 \sin \alpha, b_3 \cos \alpha + b_2 \sin \alpha). \quad (47)$$

В результате (46) можно переписать в виде

$$\begin{aligned} & \left\langle \sum_{j=1}^N U(\mathbf{R} - \mathbf{r}) \right\rangle_{\Sigma} = \frac{1}{v} v(0) + \frac{2}{v} \sum_{n=1}^{\infty} v(q_0 n) \times \\ & \times \exp[-n^2 W_{\Theta}(q_0)] \{ \cos [nq_0 (z \cos \alpha - y \sin \alpha) + nq_0 b_3] + \\ & + \cos (nq_0 x + nq_0 b_1) + \cos [nq_0 (z \sin \alpha + y \cos \alpha) + nq_0 b_2] \} + \\ & + \frac{4}{v} \sum_{n, m=1}^{\infty} v(q_0 \sqrt{n^2 + m^2}) \exp[-(n^2 + m^2) W_{\Theta}(q_0)] \times \\ & \times \{ \cos (mq_0 x + mq_0 b_1) \cos [nq_0 (z \cos \alpha - y \sin \alpha) + nq_0 b_3] + \\ & + \cos (mq_0 x + mq_0 b_1) \cos [nq_0 (y \cos \alpha + z \sin \alpha) + nq_0 b_2] \} + \\ & + \frac{2}{v} \sum_{n, l=1}^{\infty} v(q_0 \sqrt{n^2 + l^2}) \exp[-(n^2 + l^2) W_{\Theta}(q_0)] \times \\ & \times \{ \cos (nq_0 z \cos \alpha - nq_0 \sin \alpha y + lq_0 y \cos \alpha + \\ & + lq_0 z \sin \alpha + nq_0 b_3 + b_2 q_0 l) + \\ & + \cos (lq_0 z \sin \alpha + nq_0 y \sin \alpha + lq_0 z \sin \alpha + nq_0 b_3 + b_2 q_0 l) + \\ & + \cos (lq_0 z \sin \alpha + nq_0 y \sin \alpha + lq_0 y \cos \alpha - nq_0 z \cos \alpha - \\ & - nq_0 b_3 + b_2 q_0 l) \} + \frac{4}{v} \sum_{n, m, l=1}^{\infty} v(q_0 \sqrt{n^2 + m^2 + l^2}) \times \\ & \times \exp[-(n^2 + m^2 + l^2) W_{\Theta}(q_0)] \cos (mq_0 x + mq_0 b_1) \times \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} & \times \{ \cos (nq_0z \cos \alpha - nq_0y \sin \alpha + lq_0y \cos \alpha + \\ & + lq_0z \sin \alpha + nq_0b_3 + lq_0b_2) + \cos (lq_0z \sin \alpha + \\ & + nq_0y \sin \alpha + lq_0y \cos \alpha - nq_0z \cos \alpha - nq_0b_3 + lq_0b_2) \}. \quad (48) \end{aligned}$$

Полученное выражение (48) надо использовать для нахождения коэффициентов в уравнении (23). Случай $\alpha = 0$ соответствует осевому каналированию. Снова будем решать уравнение (23) методом осреднения, что будет соответствовать его решению с точностью до величин порядка $o(\epsilon)$ включительно:

$$\overline{\left\langle \sum_{j=1}^N U(\mathbf{R} - \mathbf{r}_j) \right\rangle_{\Sigma}} = \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{T} \int_0^T \left\langle d\tau \sum_{j=1}^N U_{\tau}(\mathbf{R} - \mathbf{r}_j) \right\rangle_{\Sigma}. \quad (49)$$

Значок τ у выражения U_{τ} указывает на то, что z компонента \mathbf{R} заменена на τ . В результате для $\overline{\left\langle \sum_j U(\mathbf{R} - \mathbf{r}_j) \right\rangle_{\Sigma}}$ имеем

$$\begin{aligned} & \overline{\left\langle \sum_{j=1}^N U(\mathbf{R} - \mathbf{r}_j) \right\rangle_{\Sigma}} = \frac{1}{v} v(0) + \frac{2}{v} \sum_{m=1}^{\infty} v(q_0 m) \times \\ & \times \exp[-m^2 W_{\Theta}(q_0)] \cos(mq_0 x + mq_0 b_1) + \\ & + \frac{2}{v} \sum_{l, n=1}^{\infty} v(q_0 \sqrt{n^2 + l^2}) \exp[-(l^2 + n^2) W_{\Theta}(q_0)] \times \\ & \times \cos[(nq_0 \sin \alpha + lq_0 \cos \alpha) y + b_2 l q_0 - b_3 n q_0] \Delta(lq_0 \sin \alpha - nq_0 \cos \alpha) + \\ & + \frac{4}{v} \sum_{n, m, l} v(q_0 \sqrt{n^2 + m^2 + l^2}) \exp[-(n^2 + m^2 + l^2) W_{\Theta}(q_0)] \times \\ & \times \cos(mq_0 x + mq_0 b_1) \cos[(nq_0 \sin \alpha + lq_0 \cos \alpha) y + b_2 l q_0 - b_3 n q_0] \times \\ & \times \Delta(lq_0 \sin \alpha - nq_0 \cos \alpha). \quad (50) \end{aligned}$$

В (50) $\alpha \neq 0$, $\Delta(x)$ -дельта — символ Кроннекера:

$$\Delta(x) = \begin{cases} 1, & x = 0; \\ 0, & x \neq 0. \end{cases}$$

В формуле (50) выделены те направления оси канала движения частицы, для которых выполнено равенство

$$l \sin \alpha - n \cos \alpha = 0; \quad \alpha = \text{arctg } n/l. \quad (51)$$

Эти направления назовем *каналами движения частиц*. Свяжем индексы n, l , определяющие направление каналирования с индексами Миллера [29]. Для этого рассмотрим рис. 4, где α задает направление каналирования, $ox'y'z'$ связана с главными осями

трансляционной симметрии кристалла; $ox'dz$ — плоскость, вдоль которой происходит каналирование. Заметим, что так же, как и индексы Миллера, направление α задаем наименьшими числами. Итак, выразим n , l через индексы Миллера плоскости, вдоль которой происходит каналирование частиц. Пусть индексы Миллера

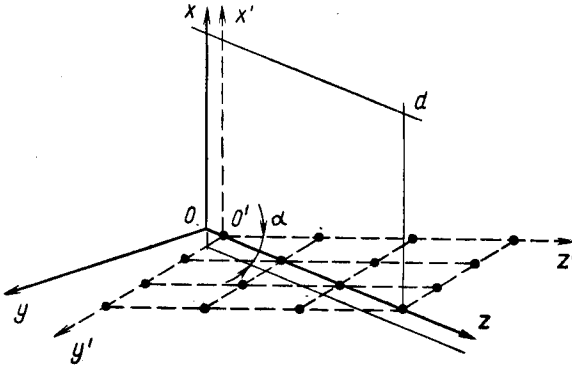


Рис. 4

есть (o, k', l') . Заметим, что k' всегда отрицательно, это связано с нашим выбором системы координат, ось oz направлена вдоль канала движения частиц. Тогда

$$\alpha = -\arctg(l'/k'); \tag{52}$$

$$\Delta(lq_0 \sin \alpha - nq_0 \cos \alpha) = \Delta(l + k'n/l'). \tag{53}$$

В (53) l , n — всегда целые числа, строго большие нуля. Отсюда следует, что $k'n/l'$ всегда также должно быть целым числом. Поэтому сумма в (50) всегда должна начинаться с члена l и справедливо следующее утверждение: в сумме (50) отличными от нуля членами являются те, для которых выполнено требование:

$$n = l'p; \quad l = -k'p; \quad p = 1, 2, 3, \dots \tag{54}$$

Обратимся теперь к определению координат вектора \mathbf{b} . Нетрудно видеть, что из ранее сформулированных условий на \mathbf{b} :

$$b_1 = a/2; \tag{55}$$

$$b_2 l q_0 - b_3 n q_0 = \pi p. \tag{56}$$

Уравнение (56) относительно b_2 , b_3 необходимо искать для наименьших возможных неотрицательных b_2 , b_3 . Это следует из определения \mathbf{b} , откуда

$$b_3 = 0; \quad b_2 = -(\pi p/2) l'/k'. \tag{57}$$

Выражение $nq_0 \sin \alpha + lq_0 \cos \alpha$, используя (53), (54), нетрудно представить в виде

$$nq_0 \sin \alpha + lq_0 \cos \alpha = pq_0 \sqrt{l'^2 + k'^2}. \quad (58)$$

Учитывая (52), (53), (57), (58) и переходя в (50) от суммирования по n, l к суммированию по p , имеем

$$\begin{aligned} \overline{\left\langle \sum_{j=1}^N U(\mathbf{R} - \mathbf{r}_j) \right\rangle_{\Sigma}} &= \frac{1}{v} v(0) + \frac{2}{v} \sum_{m=1}^{\infty} v(q_0 m) \exp[-m^2 W_{\Theta}(q_0)] \times \\ &\times (-1)^m \cos(mq_0 x) + \frac{2}{v} \sum_{p=1}^{\infty} v(q_0 p \sqrt{l'^2 + k'^2}) \times \\ &\times \exp[-(l'^2 + k'^2) p^2 W_{\Theta}(q_0)] (-1)^p \cos[q_0 \sqrt{l'^2 + k'^2} py] + \\ &+ \frac{4}{v} \sum_{m, p=1}^{\infty} v(q_0 \sqrt{m^2 + p^2(k'^2 + l'^2)}) (-1)^m (-1)^p \times \\ &\times \exp\{-[m^2 + p^2(l'^2 + k'^2)] W_{\Theta}(q_0)\} \times \\ &\times \cos(mq_0 x) \cos(q_0 py \sqrt{l'^2 + k'^2}). \end{aligned} \quad (59)$$

Наконец, так же, как и (40), переопределим поле (59) на константу, чтобы оси канала движения частиц отвечал нуль потенциальной энергии:

$$\begin{aligned} \overline{\left\langle \sum_{j=1}^N U(\mathbf{R} - \mathbf{r}_j) \right\rangle_{\Sigma}} &\Rightarrow \overline{\left\langle \sum_{j=1}^N U(\mathbf{R} - \mathbf{r}_j) \right\rangle_{\Sigma}^*} = \\ &= \frac{4}{v} \sum_{m=1}^{\infty} v(q_0 m) \exp[-m^2 W_{\Theta}(q_0)] (-1)^{m+1} \sin^2(mq_0 x/2) + \\ &+ \frac{4}{v} \sum_{p=1}^{\infty} v(q_0 p \sqrt{l'^2 + k'^2}) \exp[-p^2(l'^2 + k'^2) W_{\Theta}(q_0)] \times \\ &\times (-1)^{p+1} \sin^2\left[\frac{q_0 y p}{2} \sqrt{l'^2 + k'^2}\right] + \\ &+ \frac{4}{v} \sum_{p, m=1}^{\infty} v(q_0 \sqrt{m^2 + p^2(k'^2 + l'^2)}) (-1)^m (-1)^p \times \\ &\times \exp[-(m^2 + p^2(k'^2 + l'^2)) W_{\Theta}(q_0)] \times \\ &\times [\cos(mq_0 x) \cos(q_0 \sqrt{l'^2 + k'^2} py) - 1]. \end{aligned} \quad (60)$$

Выражение (60) можно использовать для аналогичного рассмотрения плоскостного каналирования. Заметим, что в этом случае

теряется симметрия между x, y координатами, характерная для осевого каналирования:

$$\max_{x(y=0)} \overline{\left\langle \sum_{j=1}^N U(\mathbf{R} - \mathbf{r}_j) \right\rangle_{\Sigma}^*} \neq \max_{y(x=0)} \overline{\left\langle \sum_{j=1}^N U(\mathbf{R} - \mathbf{r}_j) \right\rangle_{\Sigma}^*}.$$

Поэтому существуют два критических угла влета $\alpha_c^{(x)}, \alpha_c^{(y)}$:

$$\left. \begin{aligned} \alpha_c^{(x)} &= \left(\frac{\overline{\left\langle \sum_{j=1}^N U(\mathbf{R} - \mathbf{r}_j) \right\rangle_{\Sigma}^*}}{E_0} \right)^{1/2}; \\ \alpha_c^{(y)} &= \left(\frac{\overline{\left\langle \sum_{j=1}^N U(\mathbf{R} - \mathbf{r}_j) \right\rangle_{\Sigma}^*}}{E_0} \right)^{1/2}, \end{aligned} \right\} \quad (61)$$

где $\alpha_c^{(x)}$ — угол между осью канала движения частиц и x -компонентой скорости; $\alpha_c^{(y)}$ — соответствующий угол с y -компонентой скорости. Аналогично различны и частоты осцилляции траектории каналируемой частицы в x, y -направлениях. В рамках ранее указанного приближения имеем:

$$\begin{aligned} (\omega_{\Theta}^x)^2 &\approx \frac{2q_0^2}{Mv} v(q_0) \exp[-W_{\Theta}(q_0)]; \\ (\omega_{\Theta}^y)^2 &\approx \frac{2(l'^2 + k'^2)}{Mv} v(q_0 \sqrt{l'^2 + k'^2}) \exp[-(l'^2 + k'^2) W_{\Theta}(q_0)] - \\ &- \frac{4(l'^2 + k'^2)}{Mv} v(q_0 \sqrt{1 + l'^2 + k'^2}) \exp[-(1 + l'^2 + k'^2) W_{\Theta}(q_0)]. \end{aligned} \quad (62)$$

Если направление каналирования таково, что соотношения (51) не выполняются, т. е. направление каналирования не совпадает с каналом движения или же канал движения отвечает большим

индексам Миллера, тогда для $\overline{\left\langle \sum_{j=1}^N U(\mathbf{R} - \mathbf{r}_j) \right\rangle_{\Sigma}}$ имеем

$$\begin{aligned} \overline{\left\langle \sum_{j=1}^N U(\mathbf{R} - \mathbf{r}_j) \right\rangle_{\Sigma}} &\approx \frac{4}{v} \sum_{n=1}^{\infty} v(q_0 n) \times \\ &\times \exp[-n^2 W_{\Theta}(q_0)] (-1)^{n+1} \sin^2\left(\frac{q_0 n x}{2}\right). \end{aligned} \quad (63)$$

Это будет отвечать движению частиц в одной плоскости, и задача (23) сводится к одномерной.

6. о (ϵ^2)-ПРИБЛИЖЕНИЕ

Рассмотрим следующий порядок разложенного уравнения (20); при этом, чтобы не учитывать эффектов, связанных с неколективизированным влиянием ионов кристалла на S , приводящих

к быстроосцилляторной зависимости, проведем сразу осреднение системы уравнений (12). Введем фурье-представление потенциала взаимодействия согласно формуле

$$\sum_{j=1}^N U(\mathbf{R} - \mathbf{r}_j) = \frac{1}{\Omega} \sum_k v(k) \exp[i\mathbf{k}\mathbf{R}] \sum_{j=1}^N \exp[-i\mathbf{k}\mathbf{r}_j],$$

где Ω — объем кристалла; $v(k)$ — фурье-образ функции $U(\mathbf{R})$. Тогда после осреднения по \mathbf{z} для $\overline{J_{\text{ВЗ}}^\perp}$ имеем

$$\left. \begin{aligned} \overline{J_{\text{ВЗ}}^\perp} &= \frac{1}{\Omega} \sum_{\mathbf{k}_\perp} i\mathbf{k}_\perp v(k_\perp) \exp[i\mathbf{k}_\perp \mathbf{R}_\perp] \sum_{j=1}^N \exp(-i\mathbf{k}_\perp \mathbf{r}_j) \times \\ &\quad \times \left[\frac{1}{M} \nabla_{\mathbf{v}_\perp} - \frac{1}{m} \nabla_{\mathbf{v}_j^\perp} \right]; \quad (64) \\ \overline{J_{\text{ВЗ}}^\perp} \Big|_\Sigma &= \overline{J_{\text{ВЗ}}^\perp} \Big|_\Sigma; \quad v(k_\perp) = v(k)_{k_z=0}. \end{aligned} \right\}$$

В результате проделанных преобразований система уравнений (12) приведет к виду в приближении $o(\varepsilon^2)$;

$$\left. \begin{aligned} \frac{\partial}{\partial z} f(zS_\perp) &= \frac{1}{V_0} \overline{J(S_\perp \Sigma)} f(zS_\perp) + \left\langle \sum_{j=1}^N \nabla_{\mathbf{R}_\perp} U(\mathbf{R} - \mathbf{r}_j) \right\rangle_\Sigma \times \\ &\quad \times \int (d\Sigma) \sum_{j=1}^N \nabla_{\mathbf{R}_\perp} \overline{U(\mathbf{R} - \mathbf{r}_j)} \frac{1}{MV_0} \nabla_{\mathbf{v}_\perp} \Delta(zS_\perp \Sigma); \\ \frac{\partial}{\partial z} \Delta(zS_\perp \Sigma) &= \frac{1}{V_0} \overline{J(S_\perp \Sigma)} \Delta(zS_\perp \Sigma) + \\ &\quad + \frac{1}{V_0} [\overline{J_{\text{ВЗ}}^\perp} - \overline{J_{\text{ВЗ}}^\perp} \Big|_\Sigma D_0(\Sigma) f(zS_\perp) - \frac{1}{i} \\ &\quad - \frac{1}{V_0} D_0(\Sigma) \hat{P}_0 \overline{J_{\text{ВЗ}}^\perp} \Delta(zS_\perp \Sigma); \quad \overline{J(S_\perp \Sigma)} = \overline{J(S_\perp \Sigma)} \Big|_{J(S_\perp)}. \end{aligned} \right\} \quad (65)$$

Исключим из уравнений (65) функцию $\Delta(zS_\perp \Sigma)$ ($\Delta(zS_\perp \Sigma)_{z=0} = 0$) и оставим в правой части получившегося уравнения члены порядка малости до $o(\varepsilon^3)$:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial z} f(zS_\perp) &= \frac{1}{V_0} \left[-\mathbf{V}_\perp \nabla_{\mathbf{R}_\perp} + \right. \\ &\quad \left. + \left\langle \sum_j \nabla_{\mathbf{R}_\perp} \overline{U(\mathbf{R} - \mathbf{r}_j)} \right\rangle_\Sigma \frac{1}{M} \nabla_{\mathbf{v}_\perp} \right] f(zS_\perp) + \\ &\quad + \frac{1}{MV_0^2 \Omega^2} \int_0^z d\tau \nabla_{\mathbf{v}_\perp} \sum_{\mathbf{k}_\perp, \mathbf{k}'_\perp} i\mathbf{k}_\perp v(\mathbf{k}_\perp) v(\mathbf{k}'_\perp) \exp[i(\mathbf{k}_\perp + \mathbf{k}'_\perp) \mathbf{R}_\perp] \times \\ &\quad \times \left[\Phi_{kk'}(T) \frac{i\mathbf{k}'_\perp}{M} \nabla_{\mathbf{v}_\perp} + \frac{1}{\Theta} \frac{\partial}{\partial T} \Phi_{kk'}(T) \right] f(\tau S_\perp), \quad T = \frac{z - \tau}{V_0}, \quad (66) \end{aligned}$$

где $\Theta = k_B T^0$, k_B — постоянная Больцмана, T^0 — абсолютная температура;

$$\Phi_{hh'}(T) = \left\langle \sum_j \exp[-i\mathbf{k}_\perp \mathbf{r}_j^\perp] \exp[T\mathcal{H}(\Sigma)] \sum_j \exp[-i\mathbf{k}'_\perp \mathbf{r}_j^\perp] \right\rangle_\Sigma - \left\langle \sum_j \exp[-i\mathbf{k}_\perp \mathbf{r}_j^\perp] \right\rangle_\Sigma \left\langle \sum_j \exp[-i\mathbf{k}'_\perp \mathbf{r}_j^\perp] \right\rangle_\Sigma.$$

Интегродифференциальную часть уравнения (66) будем называть *интегралом столкновений*. Впервые уравнение типа (66) было получено в работе [9] при изучении эволюции малых подсистем, находящихся в слабом динамическом контакте с термостатом. Там же было показано, что оно описывает стохастический процесс, сходящийся при $t \rightarrow \infty$, в предположении близости системы к пространственно однородной, к максвелловскому распределению по импульсам (Σ — пространственно однородная система). Исследуем асимптотическое поведение уравнения (8) при $z \rightarrow \infty$, не предполагая слабости динамического контакта между S - и Σ -системами в случае, когда Σ — гармонический кристалл [29].

7. ИССЛЕДОВАНИЕ АСИМПТОТИЧЕСКОГО ПОВЕДЕНИЯ УРАВНЕНИЯ

(10) ПРИ $z \rightarrow \infty$

Преобразуем интеграл столкновений уравнения (66) к фоккер-планковскому виду. Под фоккер-планковским видом интеграла столкновений будем понимать такое его представление, в котором явно выделена некоторая операторная конструкция \hat{C} , обращающаяся в нуль на распределении Максвелла по скоростям, т. е. $\hat{C}\Phi_0(\mathbf{V}_\perp)$, где $\Phi_0(\mathbf{V}_\perp)$ — распределение Максвелла. Для этого достаточно преобразовать часть интеграла столкновений вида

$$Q_1 = \frac{1}{V_0^3 M \Omega^2 \Theta} \nabla_{\mathbf{V}_\perp} \int_0^z d\tau \sum_{\mathbf{k}_\perp, \mathbf{k}'_\perp} i\mathbf{k}_\perp v(\mathbf{k}_\perp) v(\mathbf{k}'_\perp) \times \times \exp[i(\mathbf{k}_\perp + \mathbf{k}'_\perp) \mathbf{R}_\perp] \frac{\partial}{\partial T} \Phi_{hh'}(T) f(\tau S_\perp). \quad (67)$$

Предложим следующий метод ее преобразования. Перебросим в (67), интегрируя по частям, производную по τ с функции $\Phi_{hh'}(T)$ на $f(\tau S_\perp)$. Для $\partial f(\tau S_\perp)/\partial \tau$ используем само уравнение, т. е. совершим один акт итерации и оставим в получающемся выражении те величины, которые дают вклад в интеграл столкновений уравнений (66) не выше, чем $o(\varepsilon^2)$ -порядка малости. Однако удобно с самого начала уравнение (66) сформулировать так, чтобы при указанной процедуре переброса производной вместо $\partial f(\tau S_\perp)/\partial \tau$ возникала величина по порядку малости выше, чем

$o(\varepsilon)$, так, чтобы ее можно было бы отбросить сразу. Для этого вернемся к системе уравнений (65).

Введем обозначения:

$$\left. \begin{aligned} \mathcal{L} &\equiv \mathcal{L}(S_{\perp}) + \langle \overline{J_{\text{вз}}^{\perp}} \rangle_{\Sigma} + \mathcal{L}(\Sigma); & A &\equiv \mathcal{L}(S_{\perp}) + \langle \overline{J_{\text{вз}}^{\perp}} \rangle_{\Sigma}; \\ \Psi &\equiv \overline{J_{\text{вз}}^{\perp}} - \langle \overline{J_{\text{вз}}^{\perp}} \rangle_{\Sigma} + \frac{1}{\Omega} \sum_{k_{\perp}} \mathbf{ik}_{\perp} \mathbf{v}(k_{\perp}) \times \\ &\quad \times \exp[\mathbf{ik}_{\perp} \cdot \mathbf{R}_{\perp}] \sum_j \exp[-\mathbf{ik}_{\perp} \cdot \mathbf{r}^{\perp}] \cdot \frac{1}{m_j} \nabla_{\mathbf{v}_j^{\perp}}; \\ G(z) &= \exp\left[\frac{z}{V_0} \mathcal{L}\right]; & \Psi^* &= \mathcal{L}(S_{\perp}) + \Psi; \\ J(z) &= \exp\left[\frac{z}{V_0} A\right]; & R(z) &= \exp\left[\frac{z}{V_0} \mathcal{L}(\Sigma)\right]. \end{aligned} \right\} \quad (68)$$

Так как операторы A и $\mathcal{L}(\Sigma)$ действуют на разные переменные функций от S_{\perp} , Σ , то они коммутируют между собой, т. е. $[A, \mathcal{L}(\Sigma)]_{(-)} = 0$. Отсюда справедливо равенство

$$G(z) = J(z) R(z) = R(z) J(z), \quad (69)$$

которое неоднократно будет использоваться далее. Для $\Delta(zS_{\perp}\Sigma)$ в обозначениях (69) из второго уравнения системы уравнений (65) с учетом начального условия имеем

$$\begin{aligned} \Delta(zS_{\perp}\Sigma) &= \frac{1}{V_0} \int_0^z d\tau G(z-\tau) \left[\Psi - \sum_{j=1}^N \nabla_{\mathbf{R}_{\perp}} \overline{U(\mathbf{R}-\mathbf{r}_j)} \times \right. \\ &\quad \left. \times \frac{1}{m_j} \nabla_{\mathbf{v}_j^{\perp}} \right] D_0(\Sigma) f(\tau S_{\perp}) + \\ &+ \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{V_0} \int_0^z d\tau_n G(z-\tau_n) \left[\Psi^* - \sum_j \nabla_{\mathbf{R}_{\perp}} \overline{U(\mathbf{R}-\mathbf{r}_j)} \frac{1}{m_j} \nabla_{\mathbf{v}_j^{\perp}} - \right. \\ &\quad \left. - D_0(\Sigma) \hat{P}_0 \overline{J_{\text{вз}}^{\perp}} \right] \dots \frac{1}{V_0} \int_0^{\tau_2} d\tau_1 G(\tau_2-\tau_1) \times \\ &\quad \times \left[\Psi^* - \sum_j \nabla_{\mathbf{R}_{\perp}} \overline{U(\mathbf{R}-\mathbf{r}_j)} \frac{1}{m_j} \nabla_{\mathbf{v}_j^{\perp}} - D_0(\Sigma) \hat{P}_0 \overline{J_{\text{вз}}^{\perp}} \right] \times \\ &\times \int_0^{\tau_1} d\tau G(\tau_1-\tau) \left[\Psi - \sum_j \nabla_{\mathbf{R}_{\perp}} \overline{U(\mathbf{R}-\mathbf{r}_j)} \frac{1}{m_j} \nabla_{\mathbf{v}_j^{\perp}} \right] D_0(\Sigma) f(\tau S_{\perp}). \quad (70) \end{aligned}$$

Ряд (70) есть не что иное, как формальный ряд Неймана [30] для одного из интегральных представлений уравнения (65). Если его подставить вместо $\Delta(zS_{\perp}\Sigma)$ в уравнение (65), то получим

формальное, замкнутое уравнение относительно функции $f(zS_{\perp})$. Нам же необходимо уравнение $o(\varepsilon^2)$ -приближения. Поэтому в (70) надо выделить члены, имеющие порядок не выше, чем $o(\varepsilon)$, остальными можно пренебречь. Рассмотрим величину

$$\Delta_1 = \frac{1}{V_0} \int_0^z d\tau G(z-\tau) \left[\Psi - \sum_j \nabla_{R_{\perp}} \overline{U(R-r_j)} \frac{1}{m_j} \nabla_{V_j^{\perp}} \right] \times \\ \times D_0(\Sigma) f(\tau S_{\perp}); \quad \Delta_1 = \Delta_1^{(1)} + \Delta_1^{(2)}. \quad (71)$$

Первое слагаемое

$$\Delta_1^{(1)} = \frac{1}{V_0} \int_0^z d\tau G(z-\tau) \left[\sum_j \nabla_{R_{\perp}} \overline{U(R-r_j)} - \left\langle \sum_j \nabla_{R_{\perp}} U(R-r_j) \right\rangle_{\Sigma} \right] \frac{1}{M} \nabla_{V_{\perp}} f(\tau S_{\perp}) D_0(\Sigma). \quad (72)$$

Преобразуем второе слагаемое $\Delta_1^{(2)}$. Проследим следующую цепочку равенств:

$$\Delta_1^{(2)} = -\frac{1}{V_0} \int_0^z d\tau G(z-\tau) \sum_j \nabla_{R_{\perp}} \overline{U(R-r_j)} \frac{1}{m_j} \nabla_{V_j^{\perp}} D_0(\Sigma) f(\tau S_{\perp}) = \\ = \frac{G(z)}{V_0} \int_0^z d\tau G(-\tau) \frac{1}{\Omega} \sum_{k_{\perp}} i\mathbf{k}_{\perp} v(k_{\perp}) \exp[i\mathbf{k}_{\perp} \cdot \mathbf{R}_{\perp}] \times \\ \times \sum_j \exp[-i\mathbf{k}_{\perp} \cdot \mathbf{r}_j^{\perp}] \left[\frac{V_j^{\perp}}{\Theta} D_0(\Sigma) f(\tau S_{\perp}) = \right. \\ \left. = -\frac{G(z)}{\Theta} \int_0^z d\tau \frac{1}{\Omega} \sum_{k_{\perp}} v(k_{\perp}) \exp[i\mathbf{k}_{\perp} \cdot \mathbf{R}(\tau)] \times \right. \\ \left. \times \frac{\partial}{\partial \tau} \left(\sum_j' \exp[-i\mathbf{k}_{\perp} \cdot \mathbf{r}_j^{\perp}(\tau)] \right) \right] D_0(\Sigma) G(-\tau) f(\tau S_{\perp}) = \\ = -\frac{G(z)}{\Theta} \int_0^z d\tau \frac{\partial}{\partial \tau} \left\{ \frac{1}{\Omega} \sum_{k_{\perp}} v(k_{\perp}) \times \right. \\ \left. \times \exp[i\mathbf{k}_{\perp} \cdot \mathbf{R}_{\perp}(\tau)] \sum_j' \exp[-i\mathbf{k}_{\perp} \cdot \mathbf{r}_j^{\perp}(\tau)] G(-\tau) D_0(\Sigma) f(\tau S_{\perp}) \right\} + \\ + \int_0^z d\tau \frac{1}{\Omega} \sum_{k_{\perp}} v(k_{\perp}) \left[\frac{\partial}{\partial \tau} \exp(i\mathbf{k}_{\perp} \cdot \mathbf{R}_{\perp}(\tau)) \right] \sum_j' \exp[-i\mathbf{k}_{\perp} \cdot \mathbf{r}_j^{\perp}(\tau)] \times$$

$$\begin{aligned} & \times G(-\tau) D_0(\Sigma) f(\tau S_{\perp}) + \int_0^z d\tau \frac{1}{\Omega} \sum_{k_{\perp}} v(k_{\perp}) \exp[i\mathbf{k}_{\perp} \mathbf{R}_{\perp}(\tau)] \times \\ & \times \sum_j' \exp[-i\mathbf{k}_{\perp} \cdot \mathbf{r}_j^{\perp}(\tau)] \frac{\partial}{\partial \tau} [G(-\tau) D_0(\Sigma) f(\tau S_{\perp})]. \end{aligned}$$

В преобразованиях были использованы равенства

$$\begin{aligned} \frac{1}{m_j} \nabla_{\mathbf{v}_j^{\perp}} D_0(\Sigma) &= -\frac{\mathbf{v}_j^{\perp}}{\Theta} D_0(\Sigma); \quad G(z-\tau) = G(z) G(-\tau); \\ G(-\tau) \varphi(\mathbf{R}_{\perp 1}, \mathbf{V}_{\perp 1}, \dots, \mathbf{r}_j^{\perp} \mathbf{V}_j^{\perp}, \dots) &= \\ &= \varphi(\mathbf{R}(\tau)_{\perp}, \mathbf{V}(\tau)_{\perp}, \dots, \mathbf{r}_j(\tau)^{\perp}, \mathbf{V}_j(\tau)^{\perp}, \dots); \\ G(-\tau) \varphi(\dots) \Psi(\dots) &= G(-\tau) \varphi(\dots) G(-\tau) \Psi(\dots); \\ \frac{\partial}{\partial \tau} [G(-\tau) \mathbf{r}_j^{\perp}] &= \mathbf{V}_j^{\perp}(\tau) \end{aligned}$$

и введено обозначение

$$\sum_j' \exp[-i\mathbf{k}_{\perp} \cdot \mathbf{r}_j^{\perp}(\tau)] = \sum_j \exp[-i\mathbf{k}_{\perp} \cdot \mathbf{r}_j^{\perp}(\tau)] - \chi,$$

где χ — некоторая функция, не зависящая от τ . Указанная неоднозначность преобразования $\Delta_1^{(2)}$ связана с тем, что под знак производной $\partial/\partial\tau$ можно подставить любую функцию, не зависящую от τ . Эту неоднозначность можно устранить, если потребовать, чтобы $\langle \Delta_1^{(2)} \rangle_{\Sigma} = 0$. Это свойство имело место до преобразования Δ_1^2 . Отсюда

$$\chi = \langle \sum_j \exp[-i\mathbf{k}_{\perp} \cdot \mathbf{r}_j^{\perp}] \rangle_{\Sigma}.$$

Величина $\frac{\partial}{\partial \tau} [G(-\tau) D_0(\Sigma) f(\tau S_{\perp})]$ имеет порядок малости выше, чем $o(\varepsilon)$. Действительно,

$$\frac{\partial}{\partial \tau} [G(-\tau) D_0(\Sigma) f(\tau S_{\perp})] = D_0(\Sigma) \frac{\partial}{\partial \tau} [J(-\tau) f(\tau S_{\perp})].$$

Сделаем в (65) замену переменных: $f(\tau S_{\perp})$ заменим на $g(\tau S_{\perp}) = J(-\tau) f(S_{\perp} \tau)$. Получим в результате для $g(\tau S_{\perp})$ уравнение

$$\frac{\partial}{\partial \tau} g(\tau S_{\perp}) = J_{\mathbf{e}}(\tau) \hat{P}_{\mathbf{e}}^{\Sigma} \sum_j \nabla_{\mathbf{R}_{\perp j}} \overline{U(\mathbf{R} - \mathbf{r}_j)} \frac{1}{MV_0} \nabla_{\mathbf{v}_{\perp}} \Delta(z S_{\perp} \Sigma),$$

из которого видно, что $\partial g(z S_{\perp})/\partial z \sim o(\varepsilon)$, так как $\Delta(z S_{\perp} \Sigma)$ само $\sim o(\varepsilon)$. Окончательно для Δ_1 с точностью до величин порядка

$o(\varepsilon^2)$ имеем

$$\begin{aligned} \Delta_1 = & \frac{1}{V_0} \int_0^z d\tau G(z-\tau) \left[\sum_j \nabla_{R_\perp} \overline{U(\mathbf{R}-\mathbf{r}_j)} - \left\langle \sum_{j=1}^N \nabla_{R_\perp} \overline{U(\mathbf{R}-\mathbf{r}_j)} \right\rangle \right] \times \\ & \times D_0(\Sigma) \left[\frac{1}{M} \nabla_{V_\perp} + \frac{V_\perp}{\Theta} \right] f(\tau S_\perp) - \frac{1}{\Theta} \left[\sum_j \overline{U(\mathbf{R}-\mathbf{r}_j)} - \right. \\ & \left. - \left\langle \sum_j U(\mathbf{R}-\mathbf{r}_j) \right\rangle_\Sigma \right] D_0(\Sigma) f(z S_\perp) + \frac{1}{\Theta} G(z) \times \\ & \times \left[\sum_j \overline{U(\mathbf{R}-\mathbf{r}_j)} - \left\langle \sum_j \overline{U(\mathbf{R}-\mathbf{r}_j)} \right\rangle_\Sigma \right] D_0(\Sigma) f(o S_\perp). \quad (73) \end{aligned}$$

Выделим в (73) члены порядка $o(1)$:

$$\begin{aligned} \Delta_1 \approx & -\frac{1}{\Theta} \left[\sum_j \overline{U(\mathbf{R}-\mathbf{r}_j)} - \left\langle \sum_j \overline{U(\mathbf{R}-\mathbf{r}_j)} \right\rangle_\Sigma \right] D_0(\Sigma) f(z S_\perp) + \\ & + \frac{G(z)}{\Theta} \left[\sum_j \overline{U(\mathbf{R}-\mathbf{r}_j)} - \left\langle \sum_j \overline{U(\mathbf{R}-\mathbf{r}_j)} \right\rangle_\Sigma \right] D_0(\Sigma) f(o S_\perp). \quad (74) \end{aligned}$$

Из (73) видно, что при переборе производной появятся члены, которые перенормируют в уравнении для $f(S_\perp z)$ член, описывающий влияние кристаллического поля, а так же слагаемые с памятью «пропорциональные» $f(o S_\perp)$. Такие члены будут во всех порядках ряда (70). Появлением они будут обязаны тем слагаемым ряда (70), которые содержат столько операторов $\nabla_{V_{j\perp}}$, каков их порядок по $1/V_0$, выделим их:

$$\begin{aligned} \Delta^*(z S_\perp \Sigma) = & \sum_n' \Delta_n^*(z S_\perp \Sigma); \\ \Delta_n^*(z S_\perp \Sigma) = & \frac{(-1)^n}{V_0^n} \int_0^z d\tau_1 G(z-\tau_1) \times \\ & \times \sum_j \nabla_{R_\perp} \overline{U(\mathbf{R}-\mathbf{r}_j)} \frac{1}{m_j} \nabla_{V_j^\perp} \dots \int_0^{\tau_{n-1}} d\tau_n G(\tau_{n-1}-\tau_n) \times \\ & \times \sum_j' \nabla_{R_\perp} \overline{U(\mathbf{R}-\mathbf{r}_j)} \frac{1}{m_j} \nabla_{V_j^\perp} D_0(\Sigma) f(\tau_n S_\perp). \quad (75) \end{aligned}$$

Чтобы убедиться в справедливости сформулированного ниже утверждения, изучим еще функцию Δ_n^* (в скобках вместо аргументов будем обозначать порядок точности рассматриваемой

величины):

$$\begin{aligned}
 \Delta_2^*(o(1)) &= -\frac{1}{V_0} \int_0^z d\tau_\perp G(z-\tau_\perp) \sum_j \nabla_{R_\perp} \overline{U(\mathbf{R}-\mathbf{r}_j)} \frac{1}{m_j} \nabla_{V_j^\perp} \times \\
 \times \Delta_1^*(\tau_1 o(1)) &= \frac{1}{V_0 \Theta} \int_0^z d\tau_\perp G(z-\tau_\perp) \sum_j \nabla_{R_\perp} \overline{U(\mathbf{R}-\mathbf{r}_j)} \frac{1}{m_j} \nabla_{V_j^\perp} \times \\
 &\times \left[\sum_j \overline{U(\mathbf{R}-\mathbf{r}_j)} - \left\langle \sum_j \overline{U(\mathbf{R}-\mathbf{r}_j)} \right\rangle_\Sigma \right] D_0(\Sigma) f(\tau_1 S_\perp) - \\
 &- \frac{1}{V_0 \Theta} G(z) \int_0^z d\tau_\perp G(-\tau) \sum_j \nabla_{R_\perp} \overline{U(\mathbf{R}-\mathbf{r}_j)} \frac{1}{m_j} \nabla_{V_j^\perp} G(\tau) \times \\
 &\times \left[\sum_j \overline{U(\mathbf{R}-\mathbf{r}_j)} - \left\langle \sum_j \overline{U(\mathbf{R}-\mathbf{r}_j)} \right\rangle_\Sigma \right] D_0(\Sigma) f(oS_\perp) \approx \\
 &\approx \frac{1}{\Theta^2} G(z) \int_0^z d\tau_1 \frac{\partial}{\partial \tau_1} \left[G(-\tau_1) \frac{1}{\Omega^2} \sum_{k_\perp, k'_\perp} \mathbf{v}(k_\perp) \times \right. \\
 &\times \mathbf{v}(k'_\perp) \exp[i\mathbf{k}_\perp \mathbf{R}_\perp + i\mathbf{k}'_\perp \mathbf{R}_\perp] \frac{1}{2!} D_2(k_\perp k'_\perp) D_0(\Sigma) f(\tau_1 S_\perp) \left. \right] - \\
 &- \frac{1}{V_0 \Theta} \int_0^z d\tau_1 G(z-\tau_\perp) \sum_{j=1}^N \nabla_{R_\perp} \overline{U(\mathbf{R}-\mathbf{r}_j)} \frac{1}{m_j} \nabla_{V_j^\perp} G(\tau_1) \times \\
 &\times \sum_{j=1}^N \overline{U(\mathbf{R}-\mathbf{r}_j)} D_0(\Sigma) f(oS_\perp) = \frac{1}{\Theta^2} \frac{1}{\Omega^2} \sum_{k_\perp, k'_\perp} \mathbf{v}(k_\perp) \mathbf{v}(k'_\perp) \times \\
 &\times \exp[i(\mathbf{k}_\perp + \mathbf{k}'_\perp) \cdot \mathbf{R}_\perp] \frac{1}{2!} D_2(k_\perp, k'_\perp) D_0(\Sigma) f(zS_\perp) - \\
 &- \frac{1}{\Theta^2 \Omega^2} G(z) \sum_{k_\perp, k'_\perp} \mathbf{v}(k_\perp) \mathbf{v}(k'_\perp) \exp[i(\mathbf{k}_\perp + \mathbf{k}'_\perp) \mathbf{R}_\perp] \frac{1}{2!} D_2(k_\perp, k'_\perp) \times \\
 &\times D_0(\Sigma) f(oS_\perp) - \frac{1}{V_0 \Theta} \int_0^z d\tau_1 G(z-\tau_1) \sum_{j=1}^N \nabla_{R_\perp} \overline{U(\mathbf{R}-\mathbf{r}_j)} \times \\
 &\times \frac{1}{m_j} \nabla_{V_j^\perp} G(\tau_1) \left[\sum_{j=1}^N \overline{U(\mathbf{R}-\mathbf{r}_j)} - \left\langle \sum_{j=1}^N \overline{U(\mathbf{R}-\mathbf{r}_j)} \right\rangle_\Sigma \right] \times \\
 &\times D_0(\Sigma) f(\tau_1 S_\perp).
 \end{aligned}$$

В этих преобразованиях было использовано равенство $\nabla_{V_j^\perp} D_0(\Sigma) = -\mathbf{V}_j^\perp D_0(\Sigma)/\Theta$ и соображения утверждения 2 дополнения 1;

там же вводятся функции $D_n(k_{\perp}^{(1)}, \dots, k_{\perp}^{(n)})$ и изучаются их некоторые свойства. Итак, функция $\Delta_2^*(o(1))$ представляется в виде

$$\Delta_2^*(o(1)) = \frac{1}{\Theta^2} \frac{1}{\Omega^2} \sum_{k_{\perp} k'_{\perp}} v(k_{\perp}) v(k'_{\perp}) \exp[i(\mathbf{k}_{\perp} + \mathbf{k}'_{\perp}) \cdot \mathbf{R}_{\perp}] \times \\ \times \frac{1}{2!} D_2(k_{\perp}, k'_{\perp}) D_0(\Sigma) f(zS_{\perp}) + G(z) \Psi_2 D_0(\Sigma) f(oS_{\perp}), \quad (76)$$

где Ψ_2 легко установить из сравнения с предыдущим выражением. Для Ψ_2 справедливо свойство

$$\langle \Psi_2 \rangle_{\Sigma} = 0. \quad (77)$$

Действуя далее точно также, можно убедиться, что для $\Delta_n^*(o(1))$ справедливо представление

$$\Delta_n^*(o(1)) = \frac{(-1)^n}{\Theta^n \Omega^n n!} \sum_{k_{\perp}^{(1)}, \dots, k_{\perp}^{(n)}} v(k_{\perp}^{(1)}) \dots v(k_{\perp}^{(n)}) \times \\ \times \exp[i(\mathbf{k}_{\perp}^{(1)} + \dots + \mathbf{k}_{\perp}^{(n)}) \cdot \mathbf{R}_{\perp}] D_n(k_{\perp}^{(1)}, \dots, k_{\perp}^{(n)}) D_0(\Sigma) f(zS_{\perp}) + \\ + G(z) \Psi_n f(oS_{\perp}) D_0(\Sigma), \quad (78)$$

где

$$\Psi_n = \frac{(-1)^{n+1}}{\Omega^n \Theta^n} \sum_{k_{\perp}^{(1)} \dots k_{\perp}^{(n)}} v(k_{\perp}^{(1)}) \dots v(k_{\perp}^{(n)}) \times \\ \times \exp[i(\mathbf{k}_{\perp}^{(1)} + \mathbf{k}_{\perp}^{(2)} + \mathbf{k}_{\perp}^{(n)}) \cdot \mathbf{R}_{\perp}] \frac{1}{n!} D_n(k_{\perp}^{(1)}, \dots, k_{\perp}^{(n)}) + \\ + \int_0^z d\tau G(-\tau) \tilde{\varphi}_n(\tau);$$

$\tilde{\varphi}_n(\tau)$ — некоторая функция, удовлетворяющая равенству $\langle \tilde{\varphi}_n(\tau) \rangle_{\Sigma} = 0$. При необходимости вид $\tilde{\varphi}_n$ можно находить для каждого n , но общее выражение для нее очень сложно. С помощью формулы (78) и формулы (2Д) дополнения 1 легко найти «перенормировку» кристаллического поля при сделанных преобразованиях:

$$\frac{1}{V_0} \hat{P}_0 \bar{\mathcal{L}}_{\text{вз}}^{\perp} \Delta(zS_{\perp}, \Sigma) = \frac{1}{V_0} \sum_{n=1}^{\infty} \hat{P}_0 \frac{(-1)^n}{\Theta^n \Omega^n} \bar{\mathcal{L}}_{\text{вз}}^{\perp} \times \\ \times \sum_{k_{\perp}^{(1)}, \dots, k_{\perp}^{(n)}} v(k_{\perp}^{(1)}) \dots v(k_{\perp}^{(n)}) \exp[i(\mathbf{k}_{\perp}^{(1)} + \dots + \mathbf{k}_{\perp}^{(n)}) \cdot \mathbf{R}_{\perp}] \times \\ \times \frac{1}{n!} D_n(k_{\perp}^{(1)}, \dots, k_{\perp}^{(n)}) D_0(\Sigma) f(zS_{\perp}) +$$

$$\begin{aligned}
 & + \frac{1}{V_0} \sum_{n=1}^{\infty} \hat{P}_0 \overline{J_{B3}^{\perp}} G(z) \Psi_n D_0(\Sigma) f(oS_{\perp}) = \\
 & = \frac{1}{V_0} \left\langle \overline{J_{B3}^{\perp}} \frac{\exp \left[-\frac{1}{\Theta} \sum_{j=1}^N \overline{U(R-r_j)} \right]}{\left\langle \exp \left[-\frac{1}{\Theta} \sum_{j=1}^N \overline{U(R-r_j)} \right] \right\rangle_{\Sigma}} \right\rangle_{\Sigma} f(zS_{\perp}) - \\
 & - \frac{1}{V_0} \left\langle \overline{J_{B3}^{\perp}} \right\rangle_{\Sigma} f(zS_{\perp}) + \frac{1}{V_0} \sum_{n=1}^{\infty} \left\langle \overline{J_{B3}^{\perp}} G(z) \Psi_n \right\rangle_{\Sigma} f(oS_{\perp}). \quad (79)
 \end{aligned}$$

В формуле (79) присутствуют слагаемые, связанные с памятью системы, т. е. величины, которые содержат функцию $f(oS_{\perp})$. Покажем, что такие члены становятся несущественными, когда $z \rightarrow \infty$, т. е. при больших z :

$$\begin{aligned}
 \left\langle \overline{J_{B3}^{\perp}} G(z) \Psi_n \right\rangle_{\Sigma} & = \\
 & = \left\langle \overline{J_{B3}^{\perp}} G(z) \frac{(-1)^{n+1}}{n! \Theta^{n\Omega^2}} \sum_{k_{\perp}^{(1)}, \dots, k_{\perp}^{(n)}} v(k_{\perp}^{(1)}) \dots v(k_{\perp}^{(n)}) \times \right. \\
 & \times \exp [i(\mathbf{k}_{\perp}^{(1)} + \dots + \mathbf{k}_{\perp}^{(n)}) \cdot \mathbf{R}_{\perp}] D_n(k_{\perp}^{(1)}, \dots, k_{\perp}^{(n)}) \left. \right\rangle_{\Sigma} + \\
 & + \left\langle \overline{J_{B3}^{\perp}} G(z) \int_0^z G(-\tau) \tilde{\varphi}(\tau) d\tau \right\rangle_{\Sigma}.
 \end{aligned}$$

Согласно принципу ослабления корреляций для структурных моментов (дополнение 2) имеем

$$\begin{aligned}
 & \left\langle \overline{J_{B3}^{\perp}} G(z) \sum_{k_{\perp}^{(1)}, \dots, k_{\perp}^{(n)}} v(k_{\perp}^{(1)}) \dots v(k_{\perp}^{(n)}) \times \right. \\
 & \times \exp [i(\mathbf{k}_{\perp}^{(1)} + \dots + \mathbf{k}_{\perp}^{(n)}) \cdot \mathbf{R}_{\perp}] D_n(k_{\perp}^{(1)}, \dots, k_{\perp}^{(n)}) \left. \right\rangle_{\Sigma, z \rightarrow \infty} = \\
 & = \left\langle \overline{J_{B3}^{\perp}} \right\rangle_{\Sigma} \sum_{k_{\perp}^{(1)}, \dots, k_{\perp}^{(n)}} v(k_{\perp}^{(1)}) \dots v(k_{\perp}^{(n)}) \times \\
 & \times \exp [i(\mathbf{k}_{\perp}^{(1)} + \dots + \mathbf{k}_{\perp}^{(n)}) \cdot \mathbf{R}_{\perp}] \left\langle D_n(\mathbf{k}_{\perp}^{(1)}, \dots, \mathbf{k}_{\perp}^{(n)}) \right\rangle_{\Sigma} = 0
 \end{aligned}$$

в силу утверждения 1.

Далее,

$$\begin{aligned}
 \left\langle \overline{J_{B3}^{\perp}} G(z) \int_0^z G(-\tau) \tilde{\varphi}_n(\tau) d\tau \right\rangle_{\Sigma} & = \left\langle \overline{J_{B3}^{\perp}} G(z) \int_0^{\infty} d\tau G(-\tau) \tilde{\varphi}_n(\tau) \right\rangle_{\Sigma} - \\
 & - \int_0^{\infty} d\tau \left\langle \overline{J_{B3}^{\perp}} G(z-\tau) \tilde{\varphi}_n(\tau) \right\rangle_{\Sigma}.
 \end{aligned}$$

Величина $\int_z^\infty d\tau < \overline{L_{B3}^\perp} G(z - \tau) \tilde{\varphi}_n(\tau) \rangle_\Sigma$ при $z \rightarrow \infty$ стремится к нулю; $\int_0^\infty G(-\tau) \tilde{\varphi}_n(\tau) d\tau$ — некоторая оператор-функция. При действии ее на функцию $D_0(\Sigma)$ всегда получается выражение типа

$$\int_0^\infty G(-\tau) \tilde{\varphi}_n(\tau) D_0(\Sigma) d\tau = \int_0^\infty d\tau G(-\tau) \tilde{\Psi}_n(\tau) D_0(\Sigma),$$

где $\tilde{\Psi}_n(\tau)$ имеет операторную структуру уже только по переменным S_\perp , так что относительно переменных Σ величина $\int_0^\infty d\tau G(-\tau) \times \times \Psi_n(\tau)$ — просто некоторая функция состояния кристалла, поэтому для нее справедливо разложение по нормальным колебаниям и при $z \rightarrow \infty$ справедлив принцип ослабления корреляций, т. е.

$$\begin{aligned} \left\langle \overline{L_{B3}^\perp} G(z) \int_0^\infty G(-\tau) \tilde{\Psi}_n(\tau) d\tau \right\rangle_{\Sigma, z \rightarrow \infty} &= \left\langle \overline{L_{B3}^\perp} \right\rangle_\Sigma J(z) \times \\ &\times \int_0^\infty G(-\tau) \langle \tilde{\Psi}_n(\tau) \rangle_\Sigma d\tau = 0. \end{aligned}$$

Таким образом, видим, что при больших z члены преобразованного кристаллического поля, содержащие память, становятся несущественными; происходит «стирание» памяти в результате « z -эволюции». Итак, при больших z имеем следующую замену при преобразованиях указанного типа:

$$\begin{aligned} \frac{1}{V_0} \left\langle \overline{L_{B3}^\perp} \right\rangle_\Sigma &\Rightarrow \frac{1}{V_0} \left\langle \frac{\exp \left[-\frac{1}{\Theta} \sum_{j=1}^N \overline{U(R-r_j)} \right]}{\left\langle \exp \left[-\frac{1}{\Theta} \sum_{j=1}^N \overline{U(R-r_j)} \right] \right\rangle_\Sigma} \overline{L_{B3}^\perp} \right\rangle_\Sigma = \\ &= -\frac{\Theta}{V_0} \nabla R_\perp \ln \left\langle \exp \left(-\frac{1}{\Theta} \sum_{j=1}^N \overline{U(R-r_j)} \right) \right\rangle_\Sigma \frac{1}{M} \nabla V_\perp. \quad (80) \end{aligned}$$

Чтобы получить перенормировку интеграла столкновения при указанных преобразованиях, необходимо в разложении (70) для $\Delta(zS_\perp \Sigma)$ выделить все члены, которые дадут вклад в порядок $o(\epsilon)$. Непосредственная реализация указанной программы сопряжена в этом случае с очень громоздкими вычислениями. Однако

можно поступить иначе. Заметим, что асимптотическая формула (80) однозначно восстанавливает вид проекционного оператора, связанного, в свою очередь, с получением совершенно определенного типа уравнений из уравнения Лиувилля для полной системы [25]. Поэтому, зная проекционный оператор, можно получить асимптотический вид «оператора столкновений» более коротким путем, начиная с уравнения (8). Уравнение (66) получено при следующих очевидных для проблемы каналирования начальных условиях:

$$D(zS_{\perp}\Sigma)_{z=0} = D_0(\Sigma) f(zS_{\perp})_{z=0},$$

что соответствовало следующей паре проекционных операторов

$$\hat{P}_0 = \int (d\Sigma) \dots; \hat{P} = D_0(\Sigma) \hat{P}_0.$$

Асимптотическая формула (80) диктует следующую пару операторов:

$$\hat{P}_0 = \int (d\Sigma) \dots; \hat{P} = P(S_{\perp}\Sigma) \hat{P}_0, \tag{81}$$

где

$$P(S_{\perp}\Sigma) = \frac{D_0(S_{\perp}\Sigma)}{\hat{P}_0 D_0(S_{\perp}\Sigma)} = \frac{\exp\left[-\frac{1}{\Theta} \sum_{j=1}^N \overline{U(\mathbf{R}-\mathbf{r}_j)}\right] D_0(\Sigma)}{\left\langle \exp\left[-\frac{1}{\Theta} \sum_j \overline{U(\mathbf{R}-\mathbf{r}_j)}\right] \right\rangle_{\Sigma}};$$

$D_0(S_{\perp}\Sigma)$ — распределение Гиббса для $(S_{\perp} + \Sigma)$ -системы. Заметим, что S_{\perp} — система двумерная как по \mathbf{R}_{\perp} , так и по V_{\perp} , функция взаимодействия между S_{\perp} и Σ имеет вид $\overline{U(\mathbf{R}-\mathbf{r}_j)}$. Повторяя тот же путь, что и при получении уравнения (66), но с парой операторов (81), получаем в $o(\varepsilon^2)$ -приближении следующее уравнение для $f(zS_{\perp})$, описывающее «z-эволюцию» системы S на больших z :

$$\left. \begin{aligned} & \frac{\partial}{\partial z} f(zS_{\perp}) = \\ & = \frac{1}{V_0} [-\mathbf{V}_{\perp} \nabla_{\mathbf{R}_{\perp}} + \hat{P}_0 P(S_{\perp}\Sigma) \overline{\mathcal{L}_{\text{вз}}^{\perp}}] f(zS_{\perp}) + Q(f(\tau S_{\perp})); \\ & Q(f(\tau S_{\perp})) = \\ & = \frac{1}{MV_0^2} \int_0^z d\tau \nabla_{\mathbf{V}_{\perp}} \langle \mathbf{F}; \mathbf{F}(T) \rangle \left[\frac{1}{M} \nabla_{\mathbf{V}_{\perp}} + \frac{1}{\Theta} \mathbf{V}_{\perp} \right] f(\tau S_{\perp}); \\ & \langle \mathbf{F}; \mathbf{F}(T) \rangle = \hat{P}_0 \sum_{j=1}^N \nabla_{\mathbf{R}_{\perp}} U(\mathbf{R}-\mathbf{r}_j) R(T) P(S_{\perp}\Sigma) \times \\ & \times \left[\sum_{j=1}^N \nabla_{\mathbf{R}_{\perp}} U(\mathbf{R}-\mathbf{r}_j) - \hat{P}_0 P(S_{\perp}\Sigma) \sum_{j=1}^N \nabla_{\mathbf{R}_{\perp}} U(\mathbf{R}-\mathbf{r}_j) \right]. \end{aligned} \right\} \tag{82}$$

В высокотемпературном пределе, или же при слабом взаимодействии между S и Σ , когда $\Theta^{-1} \sum_j U(\mathbf{R} - \mathbf{r}_j) \ll 1 \sim \delta$ в 0 (1 по δ), приближение (80) принимает вид уравнения, полученного в работе [27]. Из операторной структуры «интегралы столкновений» следует, что функция распределения по импульсам Максвелла обращает его в нуль. Таким образом, показано, что независимо от начального распределения $f(0S'_\perp)$ пучка каналируемых частиц сквозь кристалл $f(zS_\perp)$ при достаточно больших глубинах проникновения в кристалл z стремится к некоторому стационарному распределению с максвелловским распределением по \mathbf{V}_\perp . Сам процесс « z -эволюции» функции $f(zS_\perp)$ описывается типичным уравнением фоккер-планковского типа, но немарковского вида.

В заключение этого раздела приведем качественные соображения по оценке порядка величины z « z -эволюции» системы, при которых наступает термализация пучка. В термализованном состоянии $f_0(S_\perp)$ состояние S -системы полностью определяется термодинамическим состоянием кристалла и характером ее взаимодействия с кристаллом и не зависит от начального состояния пучка $f(oS_\perp)$ на входе в кристалл. Поэтому для оценки порядка величины z_c будем считать, что термализация определяется «моментом» полной потери «памяти» S -системы, т. е. возможностью пренебрежения членами в разложении (79), связанными с памятью системы, что дает основание переходить в описании от уравнения (66) к его асимптотическому варианту (82). Сам процесс стохастизации системы при « z -эволюции» определяется членами порядка величины $o(\varepsilon^2)$, и при выводе уравнений (66) и (82) приходится их учитывать во всех возникающих при разложении рядах. При больших z корреляционные функции, входящие в коэффициент при $f(oS_\perp)$ в формуле (79), затухают как V_0/z , т. е.

$$\sum_n \frac{1}{V_0} \langle J_{\text{вз}}^\perp G(z) \Psi_n \rangle_{z \rightarrow \infty} \sim \varepsilon B/z.$$

Памятью системы мы можем пренебречь, если величина $\varepsilon B/z$ будет порядка $o(\varepsilon^3)$. При анализе порядка величин членов в уравнениях (66) и (82) мы поступали следующим образом: вводили для каждой физической величины ее характеристический масштаб (21) и обезразмеривали уравнение. Получавшийся при этом безразмерный параметр при каждом члене уравнения указывал на его порядок: $\varepsilon z_M B/z \sim [1] z_M/z \sim \varepsilon^2$, где [1] — означает безразмерную величину порядка 1.

Для каналирования характеристический масштаб длин составляет расстояние порядка расстояний между ионами в кристаллах: $z_M \sim I \text{ \AA}$, $\varepsilon^2 = E_\perp^c/E_0$. Для протонов $E_\perp^c \approx 5 \text{ эВ}$ [1], а E_0 положим, например, порядка 0,5 МэВ; $\varepsilon^2 \sim 10^{-5} - 10^{-6}$, так что $z_c \approx 10^5 - 10^6 \text{ \AA}$. Для тяжелых ионов $E_\perp^c \approx 10^2 \text{ эВ}$ [2], при тех же значениях E_0 имеем $z_c \approx 10^6 - 10^7 \text{ \AA}$.

8. СТАЦИОНАРНОЕ СОСТОЯНИЕ

Предельное состояние находится из условий z -стационарности, т. е. $\partial f(zS_{\perp})/\partial z = 0$, и обращения в нуль «интеграла столкновений». Второе условие приводит к максвелловскому распределению по импульсам, для определения зависимости распределения в \mathbf{R}_{\perp} плоскости имеем уравнение

$$-\mathbf{V}_{\perp} \nabla_{\mathbf{R}_{\perp}} f_0(S_{\perp}) + \left\langle \frac{\exp \left[-\frac{1}{\Theta} \sum_{j=1}^N \overline{U(\mathbf{R}-\mathbf{r}_j)} \right]}{\left\langle \exp \left[-\frac{1}{\Theta} \sum_{j=1}^N \overline{U(\mathbf{R}-\mathbf{r}_j)} \right] \right\rangle_{\Sigma}} \times \right. \\ \left. \times \sum_j \nabla_{\mathbf{R}_{\perp}} \overline{U(\mathbf{R}-\mathbf{r}_j)} \right\rangle_{\Sigma} \frac{1}{M} \nabla_{\mathbf{V}_{\perp}} f_0(S_{\perp}) = 0. \quad (83)$$

Решение (83) с точностью до нормировочной константы следующее:

$$f_0(S_{\perp}) = \exp \left[-\frac{M\mathbf{V}_{\perp}^2}{2\Theta} \right] \left\langle \exp \left[-\frac{1}{\Theta} \sum_j \overline{U(\mathbf{R}-\mathbf{r}_j)} \right] \right\rangle_{\Sigma}, \quad (84)$$

где

$$\sum_j \overline{U(\mathbf{R}-\mathbf{r}_j)} = \frac{1}{\Omega} \sum_{k_{\perp} \neq 0} v(k_{\perp}) \exp[i\mathbf{k}_{\perp} \mathbf{R}_{\perp}] \sum_{j=1}^N \exp[-i\mathbf{k}_{\perp} \mathbf{r}_j^{\perp}] - \Theta U_0. \quad (85)$$

Часть взаимодействия, отвечающая в сумме (85) $k_{\perp} = 0$, включена в константу ΘU_0 . Константа U_0 подбирается из условия равенства нулю потенциальной энергии частицы в поле кристаллической решетки в центре канала движения. Введение такой константы уравнение (83) допускает:

$$U_0 = \ln \left\langle \exp \left(-\frac{1}{\Theta} \sum_{k_{\perp} \neq 0} v(k_{\perp}) \frac{1}{\Omega} \sum_j \exp[-i\mathbf{k}_{\perp} \mathbf{r}_j^{\perp}] \right) \right\rangle_{\Sigma}. \quad (86)$$

Обсудим некоторые эффекты формирования пучка высокоэнергетических частиц кристаллами. Исследуем для определенности случай осевого каналирования через кристалл с кубической решеткой Бравэ [29] (рис. 5). На рисунке числа 1, 2, 3, ... обозначают ионы кристалла; ось z совпадает с направлением каналирования; a — постоянная решетки; ионы 1, 6, 5, 3 лежат в плоскости, перпендикулярной направлению каналирования.

Рассмотрим величину

$$\Phi(\mathbf{R}_{\perp}) = \frac{1}{\Omega} \sum_{k_{\perp} \neq 0} v(k_{\perp}) \exp[i\mathbf{k}_{\perp} \mathbf{R}_{\perp}] \sum_j \exp(-i\mathbf{k}_{\perp} \mathbf{r}_j^{\perp}). \quad (87)$$

В (87) суммирование ведется по всем положениям ионов решетки. Введем индексы l, m_l , где l нумерует плотноупакованную цепочку ионов кристалла, параллельную направлению каналирования; m_l — маркирует положение ионов в l -й цепочке, тогда $j = \{l, m_l\}$. В силу независимости $\Phi(\mathbf{R})$ от координаты z имеем

$$\Phi(\mathbf{R}_\perp) = \sum_j \overline{U(\mathbf{R} - \mathbf{r}_j)} = \sum_j \overline{U(\mathbf{R} - \mathbf{r}_j - \mathbf{z})} = \Phi(\mathbf{R} - \mathbf{z}), \quad (88)$$

где \mathbf{z} — любой вектор с координатами $(0, 0, z)$. Выделим в (87) суммирование по l и m_l и для каждого фиксированного l просуммируем по m_l :

$$\begin{aligned} \Phi(\mathbf{R}_\perp) &= \frac{1}{a} \frac{1}{\Lambda^2} \sum_{k_\perp} v(k_\perp) \times \\ &\times \exp[ik_\perp \mathbf{R}_\perp] \sum_j \exp[-ik_\perp \mathbf{r}_j^\perp] = \\ &= \sum_l \frac{1}{a} \int_{-\infty}^{+\infty} dz U(\sqrt{z^2 + (\mathbf{R}_\perp - \mathbf{r}_\perp^l)^2}), \end{aligned} \quad (89)$$

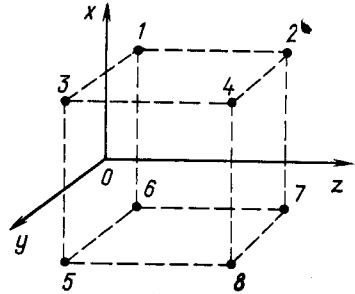


Рис. 5

где $\Lambda^3 = \Omega$, \mathbf{r}_\perp^l — координаты пересечения l -й цепочки ионов кристаллической ячейки с плоскостью oxy . В дальнейшем под элементарной ячейкой кристалла будем понимать двумерную структуру в плоскости oxy , составленную из l цепочек ионов решетки.

Функция $f(zS_\perp)$ при ее нормировке на единицу описывает распределение вероятностей состояния частицы по всем возможным реализациям ее состояний. При этом здесь присутствуют как состояния, отвечающие энергетическому захвату частицы в канал движения (такие состояния в дальнейшем будем называть *подбарьерными*), так и состояния деканалирования, т. е. *надбарьерные*. При нормировке $f(zS_\perp)$ на трансверсальную плотность частиц она будет описывать соответственно долю частиц, находящихся в канале движения, и долю деканализованных частиц. Уточним понятия подбарьерных и надбарьерных состояний. Каждому состоянию энергии частицы соответствует определенная доступная область элементарной ячейки кристалла [1]. Рассмотрим простейший случай квадратной решетки, образованной цепочками атомов (рис. 6). Точками на рисунке обозначены положения цепочек атомов, параллельных каналированию, заштрихованная область соответствует доступной части элементарной ячейки, отвечающей энергии E_\perp . При увеличении E_\perp область A растет и может случиться, что она соединится с подобными областями соседних эле-

ментарных ячеек, как показано на рис. 7. При этом частица уже не может локализоваться в пределах одной элементарной ячейки и будет переходить в соседние с ней. Критическое значение энергии E_{\perp} , при котором это начинает происходить, обозначим E_c . Для каналирования характерным является следующее соотношение

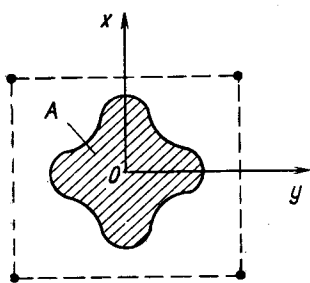


Рис. 6

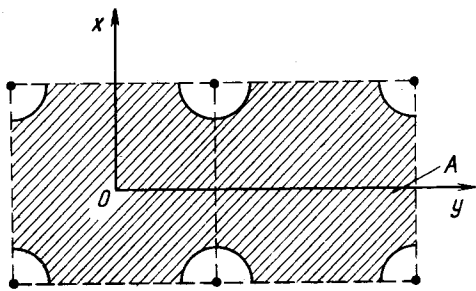


Рис. 7

[1, 2]: $E_c \gg \Theta$. Критическое значение E_c в рассматриваемом случае решетки кубической симметрии (см. рис. 5) определяется из следующего принципа минимакса:

$$E_c = \min_x \max_y \left\langle \sum_j \tilde{U}(\mathbf{R} - \mathbf{r}_j) \right\rangle_{\Sigma} = \max_x \min_y \left\langle \sum_j \tilde{U}(\mathbf{R} - \mathbf{r}_j) \right\rangle_{\Sigma}. \quad (90)$$

Далее, классифицируем состояния частицы (или пучка частиц — это определяется способом нормировки) следующим образом. Состояние $\varphi(S_{\perp})$ частицы S назовем подбарьерным, если выполняется неравенство

$$\langle E_{\perp} \rangle_{\varphi} = \int (dS_{\perp}) \varphi(S_{\perp}) E_{\perp} < E_c, \quad (91)$$

где

$$E_{\perp} = \frac{M\mathbf{V}_{\perp}^2}{2} + \overline{\left\langle \sum_j \tilde{U}(\mathbf{R} - \mathbf{r}_j) \right\rangle_{\Sigma}}.$$

Состояния, для которых справедливо обратное (91), назовем надбарьерными. Физический смысл этих утверждений ясен. При реализации состояния, обратного (91), в канале движения «концентрирована энергия» большая, чем энергия, отвечающая захвату частиц, и естественно считать, что в этом случае реализуется возможность выхода частицы из канала движения. Пусть $\varphi'(S_{\perp})$ — некоторое начальное распределение частиц в пучке на входе в кристалл, для которого справедливо (91), и пусть существует некоторая дисперсия по \mathbf{V}_{\perp} в распределении частиц:

$$\langle \mathbf{V}_{\perp}^2 \rangle_{\varphi'} = \int dS \mathbf{V}_{\perp}^2 \varphi'(S_{\perp}).$$

Будем считать, что пучок направлен параллельно кристаллической оси. Согласно (84) его дисперсия на достаточно больших глубинах проникновения будет равна

$$\langle V_{\Delta}^2 \rangle_f = 2\Theta/M. \quad (92)$$

Поэтому при выполнении неравенства

$$\langle V_{\perp}^2 \rangle_{\Phi} > 2\Theta/M \quad (93)$$

будет наблюдаться улучшение дисперсионных характеристик каналируемого пучка частиц. Если же имеет место обратное неравенство

$$\langle V_{\perp}^2 \rangle_{\Phi} < 2\Theta/M, \quad (94)$$

то наблюдается ухудшение. Улучшение дисперсионных характеристик пучка частиц будет происходить и для надбарьерных начальных состояний. Однако в этом случае естественно ожидать делокализацию пучка в плоскости \mathbf{R}_{\perp} , вызванную переходами частиц в соседние каналы движения (в соседние элементарные ячейки). (Здесь будем считать, что в силу неравенства $E_c \gg \Theta$ конечное стационарное состояние пучка частиц является подбарьерным.) Поясним это подробнее. Пусть начальное распределение $f(oS_{\perp})$ является надбарьерным. (Снова будем считать, что пучок направлен параллельно кристаллической оси. Величину $\sqrt{\langle V_0^2 \rangle}$ будем считать все же достаточно малой по сравнению с V_0 , так что имеет смысл говорить о каналировании $\epsilon \ll 1$.) Тогда наряду с остыванием пучка частиц в результате z -эволюции, т. е. уменьшением $\sqrt{\langle V_{\perp}^2 \rangle}$ с увеличением z , будет наблюдаться его делокализация, вызванная переходом частиц в соседние элементарные ячейки в плоскости \mathbf{R}_{\perp} . Наблюдаются два конкурирующих процесса: а) теплообмен между пучком частиц и кристаллом, приводящий к формирующему воздействию кристалла на пучок; б) делокализация пучка частиц. Если процессы теплообмена преобладают над процессами деканалирования, то, начиная с некоторого z' , делокализация должна прекратиться, и далее пучок должен подвергаться только формирующим воздействиям со стороны кристалла. Механизмы действия этих процессов требуют более детального рассмотрения.

Рассмотрим грубо некоторые отличительные моменты формирующего воздействия кристаллов на пучки легких и тяжелых ионов при их каналировании.

Протоны. Особенностью взаимодействия протонов с рядами и плоскостями ионов является короткодействующий характер сил [6], так что почти всюду в плоскости элементарной ячейки протон можно рассматривать как свободную частицу, и лишь при приближении к кристаллографическим рядам или плоскостям на очень близкое расстояние $|\mathbf{R}_{\perp}| \sim a/2$ отталкивающие силы редко воз-

растают. Это позволяет аппроксимировать его взаимодействие с ионами набором прямоугольных ям (рис. 8).

Для протона U_0 порядка 5 эВ $U_0/\Theta \gg 1$, поэтому вероятность обнаружения протона в области R_{\perp} , соответствующей такой потенциальной энергии, подавляюще мала и стационарное распределение можно приближенно представить в виде

$$f_0(S_{\perp}) = \frac{2\Theta}{\pi M} \exp\left[-\frac{M V_{\perp}^2}{2\Theta}\right] \frac{1}{(a-b)^2}, \quad a \gg b. \quad (95)$$

Так что протон можно считать распределенным почти равновероятным образом в плоскости R_{\perp} элементарной ячейки.

Ионы. Для ионов характерно дальнее действие с рядами или плоскостями ионов решетки. Например, для каналирования ионов меди сквозь кристалл меди между рядами (1, 1, 0) функция взаимодействия имеет вид, представленный на рис. 9. Положение

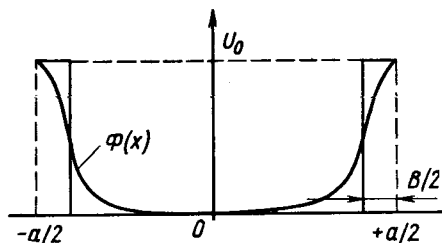


Рис. 8

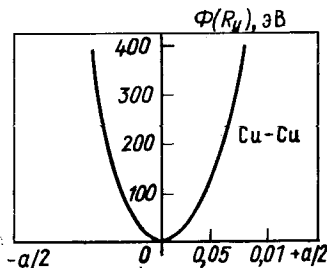


Рис. 9

$R_y = 0$ на рис. 9 отвечает положению иона в центре канала движения. Такой характер взаимодействия приводит к тому, что вероятность обнаружения иона в центре элементарной ячейки канала движения будет во много раз выше, чем на периферии, причем наблюдается резкое ее спадание при движении к периферии. Все это позволяет сделать вывод о «фокусирующем» воздействии кристалла на пучок тяжелых ионов к центру канала движения.

Конечно, проведенное описание показывает лишь качественное различие формирующего воздействия кристаллов на пучки высокоэнергетических частиц в зависимости от характера взаимодействия их с ионами кристалла. При выводе уравнений (66), (82), как уже отмечалось, мы пренебрегли электронной подсистемой кристалла, влияние которой на систему S нельзя учитывать функцией $U(R)$. В оправдание этого приближения можно привести соображение, что изученные формирующие воздействия кристалла на пучок частиц определяются процессами переноса тепла между S -системой и кристаллом. В этих же процессах электроны фермижидкости в кристалле при обычных температурах кристалла играют малую роль по сравнению с ионами кристалла, поскольку

В процессах теплообмена участвует лишь незначительная часть электронов, находящаяся в непосредственной близости от поверхности Ферми [29].

ДОПОЛНЕНИЕ 1

Структурное разложение для величин $P_0^*(S\Sigma)$

$$P_0^*(S\Sigma) = \exp \left[-\frac{1}{\Theta} \sum_j^N U(R-r_j) \right] / \left\langle \exp \left[-\frac{1}{\Theta} \sum_j^N U(R-r_j) \right] \right\rangle_{\Sigma}. \quad (1Д)$$

В $P_0^*(S\Sigma)$ опустим у S индекс \perp . При данном рассмотрении это несущественно. Следующее разложение величины $P_0^*(S\Sigma)$ назовем структурным разложением, а функции $D_n(k_1, \dots, k_n)$ структурными функциями:

$$P_0^*(S\Sigma) = 1 + \sum_{n=1}^{\infty} (-1)^n \frac{1}{\Theta^n \Omega^n n!} \prod_{j=1}^n v(k_j) \exp[ik_j R] D_n(k_1, \dots, k_n). \quad (2Д)$$

Получим уравнение для определения $D_n(k_1, \dots, k_n)$. В силу определения структурная функция является четной относительно любых перестановок аргументов k_i .

$$\exp \left[-\frac{1}{\Theta} \sum_j U(R-r_j) \right] = P_0^*(S\Sigma) \left\langle \exp \left[-\frac{1}{\Theta} \sum_j U(R-r_j) \right] \right\rangle_{\Sigma}. \quad (3Д)$$

Запишем экспоненты в формуле (3Д) через ряды и используем для потенциала взаимодействия фурье-представление. После этого приравняем друг другу функции в (3Д), стоящие при одинаковых степенях фурье-представления взаимодействия, в его обеих частях. В итоге получим

$$R_n(k_1, \dots, k_n) = \sum_{m=0}^n \frac{n!}{m! (n-m)!} D_m(k_1, \dots, k_m) M_{n-m}(k_{m+1}, \dots, k_n). \quad (4Д)$$

В (4Д) введены обозначения

$$R_n(k_1, \dots, k_n) = \prod_{j=1}^n \left[\sum_{e=1}^N \exp(-ik_j^{(e)} r_e) \right];$$

$$M_n(k_1, \dots, k_n) = \langle R_n(k_1, \dots, k_n) \rangle_{\Sigma}.$$

Функцию $M_n(k_1, \dots, k_n)$ будем называть в дальнейшем n -м структурным моментом. Равенство (4Д) можно рассматривать как рекуррентное соотношение для определения D_m через величину R_m и M_m

$$D_n(k_1, \dots, k_n) = R_n(k_1, \dots, k_n) - \sum_{m=0}^{n-1} \frac{n!}{m! (n-m)!} D_m(\dots) M_{n-m}(\dots); \quad (5Д)$$

$$D_0 = 0, \quad D_1(k) = R_1(k) - M_1(k), \quad M_0 = 1. \quad (6Д)$$

Рекуррентное соотношение (5Д) и условия (6Д) позволяют выразить D_n только комбинацией функций M_n, R_n . Сформулируем несколько используемых нами утверждений.

Утверждение 1.

$$\langle D_n(k_1, \dots, k_n) \rangle_{\Sigma} = 0. \quad (7Д)$$

Равенство (7Д) следует немедленно из свойства $\langle P_0^*(S\Sigma) \rangle_{\Sigma} = 1$. Пусть $\Psi(k_1, \dots, k_n)$ любая суммируемая с $D_n(k_1, \dots, k_n)$ функция, симметричная относительно любых перестановок своих аргументов k_i . Введем в $D_n(k_1, \dots, k_n)$ временную зависимость

$$D_n^t(k_1, \dots, k_n) = R(t) D_n(k_1, \dots, k_n). \quad (8Д)$$

Определим следующий оператор $\hat{\Gamma}_n$, действующий на $D_n^t(k_1, \dots, k_n)$

$$\hat{\Gamma}_n D_n^t(k_1, \dots, k_n) = \sum_{k_1, \dots, k_n} \Psi(k_1, \dots, k_n) D_n^t(k_1, \dots, k_n). \quad (9Д)$$

Утверждение 2.

Под знаком оператора $\hat{\Gamma}$ справедливо равенство

$$-\frac{\partial}{\partial \tau} D_n^{\tau} = n \sum_{j=1}^N \exp[-ikV_j(-\tau)] ikV_j(-\tau) D_{n-1}^{\tau}. \quad (10Д)$$

Доказательство.

Заметим, что под знаком оператора $\hat{\Gamma}_n$ справедливо равенство

$$\hat{\Gamma}_n \sum_{i=1}^m \Psi(k_i) D_n^t(k_1, \dots, k_n) = m \hat{\Gamma}_n \Psi(k) D_n^t(k_1, \dots, k_n); \quad (11Д)$$

индекс i у $\Psi(k)$ в правой части (11Д) мы опустили, так как под знаком $\hat{\Gamma}_n$ он несуществен. Используя (11Д), равенство (10Д) легко доказать методом математической индукции. Действительно

$$\begin{aligned} -\hat{\Gamma}_n \frac{\partial}{\partial \tau} D_n^{\tau}(k_1, \dots, k_n) &= \hat{\Gamma}_n \left\{ n \sum_{j=1}^N \exp[-ikr_j(-\tau)] kV_j(-\tau) R_{n-1}^{\tau} + \right. \\ &+ \left. \sum_{m=0}^{n-1} \frac{n!}{m!(n-m)!} \frac{\partial}{\partial \tau} D_m^{\tau}(k_1, \dots, k_m) M_{n-m} \right\} = \\ &= \hat{\Gamma}_n \left[\sum_{j=1}^N [ikV_j(-\tau)] \exp[-ikr_j(-\tau)] nR_{n-1}^{\tau} - \right. \\ - n \sum_{j=1}^N \exp[-ikr_j(-\tau)] [ikV_j(-\tau)] \sum_{m=1}^{n-1} \frac{(n-1)!}{(m-1)!(n-m)!} D_{m-1}^{\tau} M_{n-m} \left. \right] = \\ &= \hat{\Gamma}_n n \sum_{j=1}^N \exp[-ikr_j(-\tau)] [ikV_j(-\tau)] D_{n-1}^{\tau}, \end{aligned}$$

т. е. из предположения (10Д) при $n \leq n_0$ следует (10Д) для $n = n_0 + 1$:

$$R_n^t(k_1, \dots, k_n) = R(t) R_n(k_1, \dots, k_n);$$

$$M_n^t(k_1, \dots, k_n) = R(t) M_n(k_1, \dots, k_n) = M_n(k_1, \dots, k_n).$$

ДОПОЛНЕНИЕ 2

Принцип ослабления корреляций для структурных моментов

Докажем следующее свойство структурных моментов для гармонического кристалла. *

$$\begin{aligned}
 M_t^m(1, \dots, n) &= \\
 &= \left\langle \prod_{j=1}^m \left[\sum_{l_j=1}^N \exp(-ik_j \cdot r_{l_j}) \right] R(t) \prod_{j=m+1}^n \left[\sum_{l_j=1}^N \exp[-ik_j \cdot r_{l_j}] \right] \right\rangle_{\Sigma t \rightarrow \infty} = \\
 &= \left\langle \prod_{j=1}^m \left[\sum_{l_j=1}^N \exp(-ik_j \cdot r_{l_j}) \right] \right\rangle_{\Sigma} \left\langle \prod_{j=m+1}^n \left[\sum_{l_j=1}^N \exp[-ik_j \cdot r_{l_j}] \right] \right\rangle_{\Sigma} = \\
 &= M_m(1, \dots, m) M_{n-m}(1+m, \dots, n). \tag{12Д}
 \end{aligned}$$

Для величин $r_j(t)$ можно использовать разложение по нормальным колебаниям гармонического кристалла [28]. Введем обозначения:

$$\left. \begin{aligned}
 r_j(t) &= R_j^0 + \sum_{\lambda=1}^{3N} u_j^\lambda(t); \\
 u_j^\lambda(t) &= S_j^\lambda a \exp[-i\omega_\lambda t] + S_j^{\lambda*} a^+ \exp[i\omega_\lambda t]; \\
 S_j^\lambda &= i\hbar^{1/2} (2M_j N \omega_\lambda)^{-1/2} e_j^\lambda \exp[iq \cdot R_j^0]; \\
 [a^+, a]_{(-)} &= -1, \quad j = \{R_j^0, S'\}, \quad \lambda = \{q, S\}; \\
 \mu_j^\nu(t) &= k_l \cdot S_j^\nu \exp(-i\omega_\lambda t),
 \end{aligned} \right\} \tag{13Д}$$

где R_j^0 — равновесное положение j узла кристаллической ячейки; S' — число ионов, приходящихся на один узел ячейки; q — волновой вектор; S — индексирует ветви элементарных возбуждений гармонического кристалла. Используя неоднократно следующие равенства:

$$\begin{aligned}
 \exp \hat{A} \exp \hat{B} &= \exp \{(1/2) [\hat{A}, \hat{B}]\} \exp [\hat{A} + \hat{B}]; \\
 \mu_j^\nu(t) \mu_j^{\nu*}(t) &= \mu_j^\nu(0) \mu_j^{\nu*}(0),
 \end{aligned} \tag{14Д}$$

после довольно длительных преобразований в духе выкладок [28] получаем:

$$\begin{aligned}
 M_t^m(1, \dots, n) &= \prod_{j=1}^n \left[\sum_{R_j^0} \exp[ik_j R_j^0] \right] \times \\
 &\times \prod_{\nu}^{3N} \exp \left[-\frac{1}{2} \sum_{l=1}^{m-1} \mu_{j_l}^\nu \sum_{h=l+1}^m \mu_{j_h}^{\nu*} + \text{h. c.} \right] \times \\
 &\times \exp \left[-\frac{1}{2} \left| \sum_{l=1}^m \mu_{j_l}^\nu \right|^2 \right] \exp \left[-\frac{z^\nu}{1-z^\nu} \left| \sum_{l=1}^m \mu_{j_l}^\nu \right|^2 \right] \times \\
 &\times \prod_{\nu}^{3N} \exp \left[-\frac{1}{2} \sum_{l=m+1}^{n-1} \mu_{j_l}^\nu \sum_{h=l+1}^n \mu_{j_h}^{\nu*} + \text{h. c.} \right] \times
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} & \times \exp \left[-\frac{1}{2} \left| \sum_{l=m+1}^n \mu_{j_l}^v \right|^2 \right] \exp \left[-\frac{z^v}{1-z^v} \left| \sum_{l=m+1}^n \mu_{j_l}^v \right|^2 \right] \times \\ & \times \exp \left\{ -\frac{z^v}{1-z^v} \left(\sum_{l=1}^m \mu_{j_l}^v \sum_{l=m+1}^n \mu_{j_l}^{*v}(x) + \text{h. c.} \right) \right\}, \quad (15\text{Д}) \end{aligned}$$

где $z^v = \exp[-h\omega^v/\theta]$; *h. c.* — комплексно сопряженное выражение; R_j^0 под знаком суммы означает суммирование по равновесным положениям ионов. При $t \rightarrow \infty$

$$\prod_v^{3N} \exp \left\{ -\frac{z^v}{1-z^v} \left(\sum_{l=1}^m \mu_{j_l}^v \sum_{l=m+1}^n \mu_{j_l}^{*v} + \text{h. c.} \right) \right\}_{t \rightarrow \infty} \rightarrow 1. \quad (16\text{Д})$$

Откуда для (15Д) имеем предельное соотношение (12Д). (Формула (14Д) справедлива только для операторов, коммутатор которых есть *C* число.)

Пусть теперь $\varphi(S_{\perp}, \dots, \mathbf{v}_i, \mathbf{r}_i, \dots)$ некоторая функция, определенная на фазовом пространстве $S + \Sigma$ -системы и интегрируемая с квадратом по переменным $\mathbf{v}_i, \mathbf{r}_i$, так что от нее определено по ним преобразование Фурье. Векторы $\mathbf{v}_{\perp}, \mathbf{r}_i$ описывают отклонения *i*-го иона от своего положения равновесия. Именно этими векторами и определяется пространство состояний Σ , так как равновесные положения его ионов фиксированы. Рассмотрим величину

$$\langle J_{\text{вз}}^{\perp} G(t) \varphi(S_{\perp}, \dots, \mathbf{v}_i, \mathbf{r}_i, \dots) \rangle_{\Sigma}. \quad (17\text{Д})$$

Относительно (17Д) можно сформулировать утверждение.
Утверждение 3.

$$\langle J_{\text{вз}}^{\perp} G(t) \varphi(S_{\perp}, \dots, \mathbf{v}_i, \mathbf{r}_i, \dots) \rangle_{\Sigma_{t \rightarrow \infty}} = \overline{\langle J_{\text{вз}}^{\perp} \rangle_{\Sigma}} \langle \varphi(S_{\perp}, \dots, \mathbf{v}_i, \mathbf{r}_i, \dots) \rangle_{\Sigma}. \quad (18\text{Д})$$

В справедливости (18Д) можно убедиться следующим образом. Введем для (17Д) фурье-представление:

$$\begin{aligned} & \langle J_{\text{вз}}^{\perp} R(t) \varphi(S_{\perp}, \dots, \mathbf{v}_i, \mathbf{r}_i, \dots) \rangle_{\Sigma} = \\ & = \frac{1}{\Omega^{N+1}} \frac{1}{L^N} \sum_{\substack{k_1, \dots, k_{N+1} \\ l_1, \dots, l_N}} \exp[ik_1 \mathbf{R}] \nu(k_1) \varphi(S, k_2, \dots, k_{N+1}, l_1, \dots, l_N) \times \\ & \times \left\langle \sum_{j=1}^N \exp[-i\mathbf{k}_{\perp} \cdot \mathbf{r}_j] G(t) \exp[i\mathbf{k}_2 \cdot \mathbf{r}_1 + \dots + i\mathbf{k}_{N+1} \cdot \mathbf{r}_N] \times \right. \\ & \left. \times \exp[i\mathbf{l}_1 \cdot \mathbf{v}_1 + \dots + i\mathbf{l}_N \cdot \mathbf{v}_N] \right\rangle_{\Sigma}, \end{aligned}$$

где $\varphi(S, k_2, \dots, k_{N+1}, l_1, \dots, l_N)$ — фурье-образ функции φ ; L — некоторый достаточно большой объем в пространстве \mathbf{v}_i , так что при $L \rightarrow \infty$ суммы по l заменяются интегралами, $\mathbf{R}_j = \mathbf{r}_j^0 + \mathbf{n}_j$, \mathbf{n}_j — равновесное положение *j* иона; \mathbf{r}_j^0 — его тепловое отклонение от \mathbf{p}_j . Введение «ящика» в пространстве скоростей носит вспомогательный характер, этого можно было и не делать.

Далее, для \mathbf{r}^n используем представление (14Д) и учтем, что $\mathbf{v}^{(n)}(t) = \frac{d}{dt} \mathbf{r}_j^n(t)$. Так что выражение разложения по нормальным колебаниям можно легко получить и для векторов \mathbf{v}_j^n . После этого справедливость (18Д) следует из принципа ослабления корреляций для структурных моментов.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Lindhard L. K.— Dan. Vidensk. Selsk. Mat.-Fys. Medd., 1965, v. 34, No. 12; УФН, 1969, т. 99, вып. 2.
2. Thompson M. W.— Contemp. Phys., 1968, v. 9, p. 315, УФН, 1969, т. 99, вып. 2.
3. Тулинов А. Ф.— УФН, 1965, т. 87, вып. 4.
4. Gemmell D. S.— Rev. Mod. Phys., 1974, v. 46, No. 1.
5. В кн.: Материалы Всесоюзного совещания по физике взаимодействия заряженных частиц с монокристаллами. VI. Москва, 1974 г., 3—5 июня 1974 г. М., 1975; VII. Москва, 1975 г., 26—28 мая. М., 1975.
6. Appleton B. R., Erginsoy G., Gibson W. M.— Phys. Rev., 1967, v. 161, p. 330.
7. Fedyanin V. K., Gavrilenko G. M.— Preprint JINR E17-12025, Dubna, 1978; Докл. АН СССР, 1979, т. 245, № 5, с. 1091.
8. Боголюбов Н. Н. Избранные труды в трех томах. Т. 2, Наукова думка, Киев, 1970, с. 5.
9. Bogolubov N. N. Preprint JINR E17-10514, Dubna, 1978.
10. Eslensen H. e.a.— Nucl. Phys. B, 1977, v. 127, No. 2, p. 281.
11. Гавриленко Г. М., Федянин В. К. Препринт ОИЯИ Р17-12214, Дубна, 1979.
12. Гавриленко Г. М., Федянин В. К. Препринт ОИЯИ Р17-12215, Дубна, 1979.
13. Белотницкий В. В., Кумахов М. А.— ЖЭТФ, 1972, т. 62, 1144.
14. Ведель R., Кумахов М. А.— Докл. АН СССР, 1976, т. 230, № 1, с. 68.
15. Waho T.— Phys. Rev. B: Solid State, 1976, v. 14, p. 4830.
16. Omura T., Kitagawa M., Ohtsubi Y. H.— Phys. Status. Solidi (b), 1977, v. 79, No. 1, p. 321.
17. Ohtsuki Y. H., Omura T., Tanaka H., Kitagawa M.— Nucl. Instrum. Method, 1978, v. 149, No. 1—3, p. 361.
18. Kumachov M. A., Wedell R.— Phys. Status Solidi, 1976, v. 76, № 1, p. 119.
19. Tsyganov E.— Preprint Fermi lab. TM-682 2042009.
20. Shulga V. I.— Radiant Eff., 1975, v. 26, № 1—2, p. 61.
21. Ellison J. A., Gwinn T.— Phys. Rev. B; Solid state, 1976, v. 13, № 5, p. 1880.
22. Боголюбов Н. Н. Проблемы динамической теории в статистической физике. М.—Л., Гостехиздат, 1946.
23. Lebowitz J., Resibois R.— Phys. Rev. A, 1963, v. 139, p. 1101.
24. Tohugama M., Mori N.— Prog. Theor. Phys., 1976, v. 56, p. 1073.
25. Гавриленко Г. М., Федянин В. К.— Препринт ОИЯИ Р17-11998, Дубна, 1978.
26. Гавриленко Г. М., Федянин В. К.— Препринт ОИЯИ Р17-12009, Дубна, 1978.
27. Боголюбов Н. Н., Митропольский Ю. А. Асимптотические методы в теории нелинейных колебаний. М., Физматгиз, 1963.
28. Гуревич И. И., Тарасов Л. В. Физика нейтронов низких энергий. М., Наука, 1969.
29. Киттель Ч. Введение в физику твердого тела. М., Наука, 1978.
30. Владимиров В. С. Уравнения математической физики. М., Наука, 1971.