

КАНАЛИРОВАНИЕ БЫСТРЫХ ЧАСТИЦ В ФУЛЛЕРИТАХ

*Н. К. Жеваго**, *В. И. Глебов*

*Российский научный центр «Курчатовский институт»
123182, Москва, Россия*

Поступила в редакцию 12 ноября 2001 г.

Развита теория каналирования релятивистских электронов и позитронов, а также положительно и отрицательно заряженных ионов в молекулярных кристаллах фуллеренов (фуллеритах). Проведен расчет кристаллических потенциалов и исследовано пространственное и угловое распределения пучков частиц, распространяющихся вдоль главных кристаллографических направлений. Развита метод, позволяющий учесть влияние некогерентного рассеяния на процесс каналирования.

PACS: 41.75.Ht, 61.82.Rx, 42.15.Dp

1. ВВЕДЕНИЕ

Каналирование заряженных частиц в обычных кристаллах достаточно хорошо исследовано как теоретически, так и экспериментально (см., например, [1, 2]). С другой стороны, недавно открытые фуллерены [3] при определенных условиях могут быть получены в виде стабильных молекулярных кристаллов с кубической гранецентрированной симметрией [4, 5], причем постоянная решетки таких кристаллов (называемых фуллеритами) составляет величину $d \approx 1.42$ нм, на порядок превышающую соответствующую величину в обычных кристаллах. Каналирование в фуллеритах, так же как и рассмотренное ранее в [6, 7] каналирование в нанотрубках, может представлять интерес для физики высоких энергий с точки зрения возможности отклонения пучков заряженных частиц изогнутыми кристаллами, а также генерации электромагнитного излучения электронами и позитронами. Что касается каналирования ионов, то вследствие аномально больших пробегов ионов этот эффект может быть использован для имплантации различных атомов в фуллериты с целью изменения их электронных и других физических свойств. В нашей предыдущей работе [8] была развита квантовая теория каналирования в фуллеритах, основанная на многоволновой дифракции релятивистских электронов и позитронов не слишком высокой энергии ($\lesssim 10$ МэВ), а также

теория дифракции мягкого рентгеновского излучения.

Целью настоящей работы является разработка классической теории каналирования электронов, позитронов и других заряженных элементарных частиц и ионов достаточно высокой энергии, когда можно считать, что движение частиц происходит по траекториям. Как известно, стандартная теория каналирования основана на возможности использования потенциалов кристалла, усредненных вдоль кристаллографических направлений и по тепловым колебаниям атомов решетки. В случае фуллеритов, в которых отсутствуют эффекты полимеризации и молекулы связаны между собой относительно слабыми силами Ван-дер-Ваальса, проводится также усреднение по вращениям молекул [8]. Флуктуации потенциала, связанные с отличием реального потенциала от усредненного, являются причиной деканалирования, т. е. постепенного выбывания частиц из режима каналирования по мере распространения пучка в кристалле. Деканалирование в конечном итоге определяет эффективность использования каналирования для поворота пучка частиц или для генерации электромагнитного излучения электронами и позитронами. В работе разработан подход, с помощью которого учитывается влияние некогерентного рассеяния на флуктуациях потенциала и проведены соответствующие расчеты длин деканалирования в случаях прямых и изогнутых фуллеритов.

*E-mail: ab2211@technologist.com

2. УСРЕДНЕННЫЕ ПОТЕНЦИАЛЫ ФУЛЛЕРИТОВ

Согласно теории каналирования [1], когда быстрая заряженная частица попадает в кристалл под достаточно малым углом θ_0 (сравнимым по порядку величины с углом Линдхарда) по отношению к главным кристаллографическим направлениям, истинный потенциал кристалла в первом приближении можно заменить потенциалом, усредненным вдоль соответствующего направления. Поскольку в рассматриваемом случае в узлах решетки находятся фуллерены, необходимо сначала вычислить потенциал отдельного фуллерена. В частности, в фуллерене C_{60} атомы углерода находятся в вершинах усеченного икосаэдра. Фурье-компонента атомного потенциала, согласно Дойлу и Тернеру [9], может быть с достаточной точностью представлена в виде суммы N гауссианов:

$$f(\mathbf{k}) = 4\pi Ze \sum_{i=1}^N a_i \exp\left(-\frac{k^2}{4b_i^2}\right), \quad (1)$$

где Ze представляет заряд ядра. Как известно, величина (1) в борновском приближении представляет собой амплитуду рассеяния электрона атомом, при этом \mathbf{k} совпадает с импульсом, передаваемым атомом при рассеянии электрона. Подгоночные параметры a_i, b_i для данной модели атома, как и их полное число N , выбираются обычно из условия наилучшего приближения (1) в достаточно широкой области передаваемых импульсов k к соответствующим значениям, измеряемым в экспериментах по угловому распределению рассеянных электронов, или к более точным расчетам (например, методом Хартри-Фока). Обычно оказывается достаточным $N = 4$ или $N = 5$, при этом значения параметров a_i, b_i для различных атомов, включая углерод, приведены в работе [10]. Обратное преобразование Фурье (1) дает следующее выражение для атомного потенциала:

$$\varphi(\rho_a) = \frac{4Ze}{\sqrt{\pi}} \sum_{j=1}^N a_j b_j^3 \exp(-b_j^2 \rho_a^2), \quad (2)$$

где ρ_a — расстояние до ядра. Область применимости модельного формфактора (1) и соответствующего потенциала атома (2) ограничена со стороны больших импульсов или малых расстояний до ядра. В частности, для того набора подгоночных параметров, которые мы используем в дальнейшем при расчетах усредненных потенциалов, область величин k , где имеется достаточно хорошее ($\approx 0.6\%$) согласие (1) с табличными данными [10], ограничена сверху

значением $k_{max} \approx 126 \text{ нм}^{-1}$, что соответствует расстояниям, меньшим амплитуды тепловых колебаний атомов в фуллерите. Отметим, что, используя в качестве отправной точки экранировку ядра в виде (4), можно найти и другое, более точное аналитическое выражение для потенциала атома углерода, имеющее правильный (кулоновский) вид на достаточно малых расстояниях и совпадающее с табличными данными в пределах 1% вплоть до расстояний 0.002 нм, однако с его помощью невозможно получить достаточное количество простых аналитических выражений для усредненных потенциалов молекулярной цепочки (8). С другой стороны, как показывают дальнейшие расчеты, для усредненного потенциала разница в глубинах потенциальной ямы поперечного движения для используемой нами модели потенциала (1) и более точной модели не превышает 5%.

Потенциальная энергия точечных частиц (элементарных или ядер) в поле атома есть простое произведение потенциала (2) и заряда частицы. В случае ионов необходимо учесть эффект экранировки ядра ионов оставшимися электронами. Это можно сделать следующим способом. Согласно [9] фурье-компонента электронного распределения в атоме или ионе с зарядом ядра $Z_1 e$ может быть с достаточной точностью представлена в виде

$$f^{(x)}(\mathbf{k}) = Z_1 \sum_{m=1}^{N_1} a_m^{(x)} \exp\left(-\frac{k^2}{4b_m^{(x)2}}\right), \quad (3)$$

который аналогичен (1), однако параметры a_m, b_m, N_1 определяются теперь в результате подгонки (3) к более точным значениям амплитуды рассеяния рентгеновских фотонов [10]. Таким образом, фурье-компонента распределения заряда в атоме (ионе), включающая помимо (3) заряд ядра $Z_1 e$, имеет вид

$$q(\mathbf{k}) = e(Z_1 - f^{(x)}(\mathbf{k})). \quad (4)$$

Предположим, как это обычно делается в теории каналирования ионов [1], что скорость иона мала по сравнению со скоростями электронов на его внешних орбитах, кроме того, электронные термы иона и фуллеренов не пересекаются ни при каких параметрах столкновения. В этом случае можно пренебречь неупругими процессами типа перезарядки между каналированным ионом и атомами фуллеренов и получить достаточно простой вид потенциала взаимодействия атома углерода с ионом. Действительно, в координатном представлении потенциальная энергия

взаимодействия иона с атомом есть свертка атомного потенциала (2) и пространственного распределения заряда в ионе. Поэтому в импульсном представлении эффективный атомный формфактор для ионного рассеяния $f_{ion}(\mathbf{k})$ представляет собой произведение правых частей (1) и (4):

$$f_{ion}(\mathbf{k}) = 4\pi Z Z_1 e \sum_{j=1}^{N(1+N_1)} A_j \exp\left(-\frac{k^2}{4B_j^2}\right). \quad (5)$$

Параметры A_j, B_j связаны с известными параметрами для формфакторов рассеяния электронов и рентгеновских фотонов следующими соотношениями: $A_j = a_j, B_j = b_j$ при $j \leq N, A_j = -a_i a_m^{(x)}, B_j^2 = b_i^2 b_m^{(x)2} / (b_i^2 + b_m^{(x)2})$ при $N < j \leq N(1 + N_1)$, причем i и m пробегает ряд значений от единицы до соответственно N и N_1 . Отметим, что при таком подходе формфактор для ионного рассеяния (5) сохраняет функциональный вид суммы некоторого числа гауссианов, как и в случае точечной частицы. Это позволяет в дальнейшем получить достаточно простые выражения для эффективного потенциала взаимодействия каналированных частиц с фуллеритами.

Случай полностью ионизованного атома соответствует $a_j^{(x)} = 0$ для всех индексов j . С другой стороны, если ион достаточно тяжелый, а кратность ионизации достаточно мала, можно пренебречь разницей между электронными распределениями в ионе и в соответствующем нейтральном атоме и использовать для ионов значения параметров $a_m^{(x)}, b_m^{(x)}$ для нейтрального атома. В более общем случае для определения этих параметров необходимо предварительно вычислить методом Хартри-Фока распределение электронов в конкретном ионе.

Перейдем теперь к расчету молекулярного потенциала. В случае точечного заряда мы далее не делаем различия между терминами потенциал и потенциальная энергия. В первом приближении можно пренебречь влиянием валентных связей между отдельными атомами углерода в молекуле фуллерена C_{60} на распределение электронов в молекуле, т.е. считать, что молекулярный потенциал есть просто сумма атомных потенциалов (2), центрированных в вершинах усеченного икосаэдра. Учтем также, что в обычных условиях фуллериты оказываются неполимеризованными, т.е. отдельные фуллерены в фуллеритах связаны между собой лишь слабыми ван-дерваальсовыми силами и могут свободно вращаться. Фуллерены вследствие вращений имеют случайную угловую ориентацию, поэтому молекулярный потенциал можно предварительно усреднить по уг-

ловым координатам атомов и получить следующее выражение для усредненного таким образом молекулярного потенциала:

$$U_1(r) = 60 \frac{Ze^2}{\sqrt{\pi r R}} \sum_{i=1}^N a_i b_i \times [\exp(-b_i^2(r-R)^2) - \exp(-b_i^2(r+R)^2)]. \quad (6)$$

Здесь r означает расстояние до центра фуллерена, $R = 0.353$ нм — радиус фуллерена C_{60} . Заряд каналированной точечной частицы e в (6) считается положительным (позитрон).

Пусть заряженная частица влетает под достаточно малым углом к одной из главных кристаллографических осей. Обозначим через d_R расстояние между соседними молекулами в молекулярной цепочке фуллерита. Проведем теперь усреднение потенциала цепочки вдоль ее направления. В результате получаем следующее выражение для усредненного потенциала цепочки:

$$U^{(R)}(\rho) = 60 \frac{2Ze^2}{Rd_R} \sum_{i=1}^N a_i \times \int_0^\infty \exp(-k_\perp^2 b_i^{-2}/4) J_0(k_\perp \rho) \sin k_\perp R dk_\perp, \quad (7)$$

где J_0 — функция Бесселя, k_\perp — проекция импульса \mathbf{k} на поперечную плоскость. Эффективный потенциал U , действующий в фуллерите на точечную положительно заряженную каналированную частицу, представляет собой сумму потенциалов вида (7) всех n цепочек, параллельных данному кристаллографическому направлению:

$$U(\mathbf{r}) = \sum_n U^{(R)}(|\mathbf{r} - \boldsymbol{\rho}_n|). \quad (8)$$

Здесь \mathbf{r} — векторная координата в плоскости, нормальной к молекулярным цепочкам (поперечной плоскости), $\boldsymbol{\rho}_n$ — векторная координата n -ой цепочки.

Потенциал (7) соответствует статической цепочке фуллеренов и статическому расположению атомов углерода в вершинах усеченного икосаэдра в фуллеренах, т.е. не учитывает как тепловых колебаний молекул относительно узлов кристаллической решетки фуллерита, так и тепловых колебаний углеродных атомов в молекулах. Тепловые колебания атомов, тангенциальные поверхности молекулы, очевидно не влияют на усредненный потенциал (7), поскольку при его выводе проводилось усреднение по

вращениям молекул. Тепловые колебания атомов, нормальные к поверхности молекулы, могут быть учтены путем введения в (1) и (7) фактора Дебая–Валлера e^{-W} , где $W = k_{\perp}^2 u_{\perp}^2 / 2$, u_{\perp}^2 — среднеквадратичная амплитуда тепловых колебаний, температурная зависимость которой определяется хорошо известной формулой Дебая. Колебания молекул вдоль цепочки, очевидно, также не влияют на полученный результат вследствие усреднения потенциала по этому направлению. Поперечные тепловые колебания можно учесть посредством фактора Дебая–Валлера e^{-W_f} , который необходимо ввести в подинтегральное выражение в (7). Считая поперечные тепловые колебания молекул изотропными, получаем $W_f = k_{\perp}^2 u_f^2 / 2$, где u_f^2 обозначает среднеквадратичную амплитуду тепловых колебаний молекул в решетке фуллерита. По измерениям скорости звука было получено [11] значение для дебаевской температуры фуллерита $T_D = 55.4$ К, что при комнатной температуре приводит к значению $u_f = 1.39 \cdot 10^{-2}$ нм. Нам не известны данные о величине амплитуды радиальных колебания атомов в фуллеренах, однако можно предположить, что она близка к аналогичной амплитуде колебаний (перпендикулярно плоскостям) в графите $u_{\perp} = 8.5 \cdot 10^{-3}$ нм. Амплитуды тепловых колебаний, и в особенности атомных, оказываются меньше расстояния, на котором существенно меняются электронная плотность и потенциал в атоме углерода, поэтому их учет приводит к заметному изменению усредненного потенциала (7) лишь в относительно узкой области $|\rho - R| \lesssim u_{\perp} + u_f$.

Полученные выше результаты путем очевидных замен $a_i \rightarrow A_j$, $b_i \rightarrow B_j$, $N \rightarrow N(1 + N_1)$, $e \rightarrow Z_1 e$ могут быть использованы при расчетах потенциалов фуллерита в случае каналирования ионов. Отметим, что в теории каналирования ионов в обычных кристаллах ранее [1] использовались и другие представления для ион-атомного потенциала, основанные, например, на аппроксимации Мольера к модели Томаса–Ферми, однако, как было показано нами ранее [7], такой подход в случае фуллеренов дает значительно завышенные значения для усредненных потенциалов практически во всей области канала, что связано с очевидной неприменимостью модели Томаса–Ферми к легким атомам.

Результаты численных расчетов усредненных потенциалов фуллерита (8) с учетом тепловых колебаний молекул при комнатной температуре приведены на рис. 1 и 2 для различных частиц и кристаллографических направлений. Рисунок 1 соответствует электронам и направлению вдоль осей [110], рис. 2 —

позитронам и направлению [100]. По характеру эти потенциалы существенно отличаются от усредненных потенциалов в обычных кристаллах (см., например, [1]). Это отличие обусловлено тем, что в узлах решетки фуллерита находятся не атомы, а гигантские молекулы C_{60} . В результате, например, для положительно заряженных частиц (рис. 2) появляется достаточно глубокая потенциальная яма не только между цепочками, но и на оси цепочек. Существование достаточно глубокой аксиально-симметричной ямы становится возможным и для отрицательно заряженных частиц. Относительные размеры всех ям существенно превышают соответствующие размеры в обычных кристаллах, что способствует более эффективному каналированию заряженных частиц в фуллеритах. Похожий вид потенциалы имеют и в случае каналирования ионов.

3. КАНАЛИРОВАНИЕ УЛЬТРАРЕЛЯТИВИСТСКИХ ЧАСТИЦ В НОРМАЛЬНЫХ И ИЗОГНУТЫХ ФУЛЛЕРИТАХ

Как показано в нашей предыдущей работе [8], посвященной квантовой теории каналирования в фуллеритах, классическое описание движения легких частиц (электронов и позитронов) становится правомерным при значительно более низких энергиях ($E \sim 10$ МэВ), чем в обычных кристаллах. Этот результат можно было ожидать, исходя из следующих соображений. При каналировании, так же как и при брэгговской дифракции в кристаллах, характерным квантовым параметром является дебройлевская длина волны частицы $\lambda \approx \hbar/E$, деленная на угол входа θ_0 , в качестве оценки которого можно использовать угол Линдхарда $\theta_L = (2U_0/E)^{1/2}$, где U_0 — глубина потенциальной ямы поперечного движения. Поскольку поперечная дебройлевская длина волны $\lambda_{\perp} = \lambda/\theta_L$ значительно превышает λ , квантовые эффекты при каналировании имеют место даже при относительно высоких энергиях электронов и позитронов в десятки МэВ (см., например, [2]). Для адекватности классического описания движения каналированных частиц необходимо, чтобы λ_{\perp} была значительно меньше размеров каналов. Поскольку каналы в фуллеритах оказываются хотя и несколько менее глубокими, но существенно более широкими, чем в обычных кристаллах, классический подход для них возможен при существенно более низких энергиях частиц. Что касается тяжелых частиц (π -мезонов, протонов), то для них классическая теория каналирования, как в обычных кристал-

Рис. 1. Контурный график усредненного потенциала осей [110] для отрицательных точечных частиц (электронов). Цифры у эквипотенциальных кривых соответствуют значениям потенциала в электронвольтах, а штрихи показывают направления его убывания

лах, так и в фуллеритах, справедлива практически при всех, даже нерелятивистских, скоростях [1].

Рассмотрим сначала случай классического каналирования электронов и позитронов достаточно высокой энергии в нормальных (не изогнутых фуллеритах). Интегралами движения частицы в потенциале (8) являются полная энергия частицы E и продольная (по отношению к кристаллографической оси) компонента импульса p_{\parallel} :

$$\begin{aligned} E &= U(\mathbf{r}) + (1 - v_{\parallel}^2 - v_{\perp}^2)^{-1/2}, \\ p_{\parallel} &= v_{\parallel}(1 - v_{\parallel}^2 - v_{\perp}^2)^{-1/2}. \end{aligned} \tag{9}$$

Здесь v_{\parallel} — продольная компонента скорости, $\mathbf{v}_{\perp} = d\mathbf{r}/dt$ — поперечная компонента скорости, используется релятивистская система единиц $m = c = 1$. Поперечная энергия ε определяется как разность $\varepsilon = E - (1 + p_{\parallel}^2)^{1/2}$ и, следовательно, также является интегралом движения в усредненном потенциале

$U(\mathbf{r})$. При каналировании всегда выполняется условие $\varepsilon \ll E$, при учете которого из (9) следует уравнение для поперечной компоненты движения

$$\mathbf{v}_{\perp}^2 = \frac{2}{E} [\varepsilon - U(\mathbf{r})]. \tag{10}$$

Уравнение (10) по своему виду соответствует нерелятивистскому поперечному движению частицы с массой E в потенциале $U(\mathbf{r})$ и выражает закон сохранения поперечной энергии для такой частицы. В малоугловом приближении, когда выполняется неравенство $\varepsilon \ll E$, и ультрарелятивистском пределе $E \gg 1$ для продольной компоненты скорости частицы получаем выражение

$$v_{\parallel} = 1 - \frac{1}{2}(E^{-2} + v_{\perp}^2). \tag{11}$$

Флуктуации продольной компоненты скорости, связанные с наличием в (11) квадрата поперечной

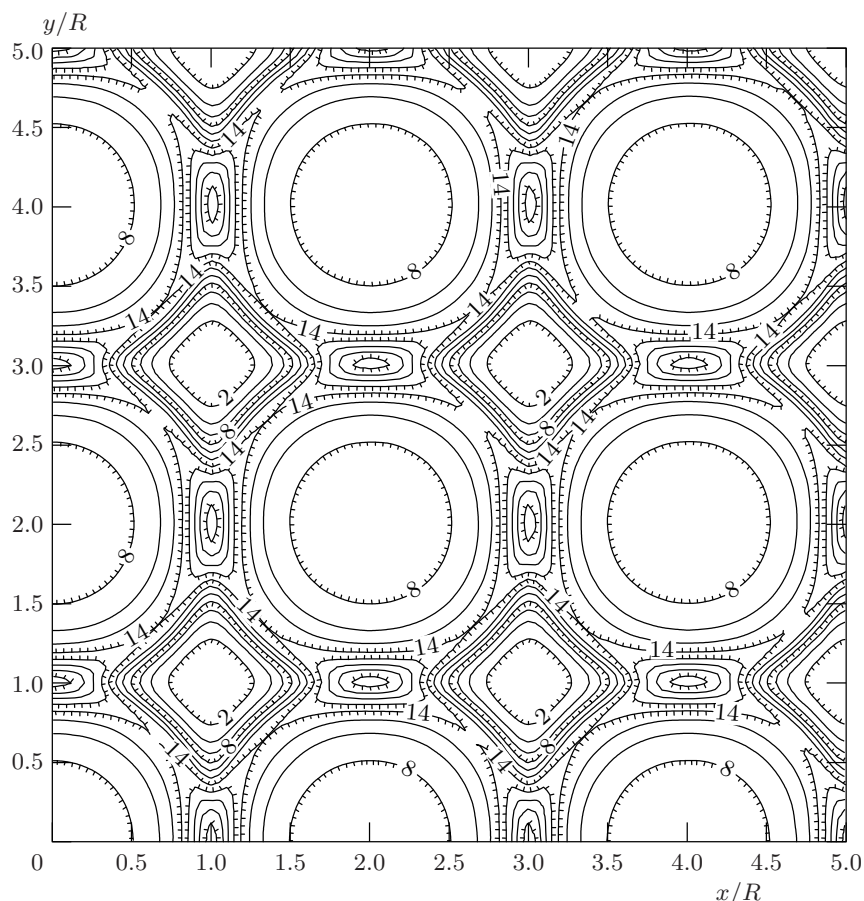


Рис. 2. Контурный график усредненного потенциала осей [100] для положительных точечных частиц (позитронов)

компоненты скорости v_{\perp}^2 , могут оказаться существенными (см., например, [2]) лишь при расчетах спектров электромагнитного излучения ультрарелятивистских частиц с достаточно высокой энергией, поскольку доплеровский сдвиг частоты излучения определяется относительно малой разностью, $1 - v_{\parallel}$, скорости света и продольной компоненты скорости ультрарелятивистской частицы. Однако при анализе рассеяния частиц, который будет проведен ниже, такого рода флуктуациями можно пренебречь.

Предположим теперь, что кристаллографическая ось фуллерита изогнута в некоторой плоскости с постоянным радиусом кривизны R_b . Выберем цилиндрическую систему координат ρ, φ, Z с осью Z , перпендикулярной плоскости изгиба и проходящей через центр кривизны O . Очевидно, что потенциал изогнутого фуллерита не зависит от азимутального угла φ , поскольку радиус кривизны предполагается постоянным. Таким образом, помимо полной энергии E , интегралом движения в этом случае является также проекция M релятивистского момента

импульса частицы на ось Z :

$$\begin{aligned} E &= U(\mathbf{r}) + (1 - \mathbf{v}_{\perp}^2 - v_{\tau}^2)^{-1/2}, \\ M &= \rho v_{\tau} (1 - \mathbf{v}_{\perp}^2 - v_{\tau}^2)^{-1/2}. \end{aligned} \tag{12}$$

Здесь $v_{\tau} = \rho(d\varphi/dt)$ — модуль тангенциальной компоненты скорости, \mathbf{v}_{\perp} — поперечная по отношению к \mathbf{v}_{τ} компонента скорости. Из системы уравнений (12) получаем уравнение для поперечной компоненты движения частицы в изогнутом кристалле:

$$\mathbf{v}_{\perp}^2 = 1 - \frac{1 + M^2/\rho^2}{[E - U(\mathbf{r})]^2}. \tag{13}$$

Определим теперь поперечную энергию релятивистской частицы как разность

$$\varepsilon \equiv E - (1 + M^2/R_b^2)^{1/2}, \tag{14}$$

которая также является интегралом движения в изогнутом кристалле. Декартова координата частицы x относительно кристаллографической оси (одна из

компонент вектора \mathbf{r}) связана с введенной выше цилиндрической координатой ρ соотношением $x = \rho - R_b$. Поскольку в практически интересных случаях радиус кривизны достаточно велик по сравнению с размерами канала, $x \ll R_b$, из (13) с учетом определения (14) и условия $\varepsilon \ll E$, которое всегда имеет место для каналированных частиц, получаем уравнение для поперечной компоненты скорости в приближенном виде:

$$\mathbf{v}_{\perp}^2 = \frac{2}{E} [\varepsilon - U(\mathbf{r})] + \frac{2x}{R_b}. \quad (15)$$

Таким образом, учет изгиба кристаллографической оси с постоянным радиусом кривизны R_b состоит в том, что при анализе поперечного движения частицы необходимо заменить электростатический потенциал $U(\mathbf{r})$ в (10) на эффективный потенциал

$$U_{eff}(\mathbf{r}) = U(\mathbf{r}) - \frac{Ex}{R_b}. \quad (16)$$

Предположим, что все кристаллографические оси в фуллерите изогнуты с одинаковым радиусом кривизны, тогда уравнение движения (15) справедливо в области каждой из элементарных ячеек кристалла. Проведенный анализ находится в полном соответствии с интуитивными соображениями, приведенными в пионерских работах Цыганова [12], посвященных эффекту поворота пучка частиц высокой энергии изогнутыми кристаллическими плоскостями.

Изгиб каналов в фуллеритах, как и в обычных кристаллах, можно осуществить механически, либо пропуская интенсивную ультразвуковую волну через кристалл. Прочность фуллеритов на изгиб и воздействие ультразвука, по-видимому, сопоставимы с обычными кристаллами типа графита или даже алмаза (для полимеризованных фуллеритов). При обоих способах изгиба радиус кривизны не является постоянным. Как показывает дальнейший анализ, в случае, когда радиус кривизны меняется (как по величине, так и по направлению) вдоль кристаллографической оси достаточно медленно, т. е. существенные изменения R_b происходят на длинах, значительно превышающих характерный период радиальных колебаний каналированных частиц в потенциальной яме, эффективный учет искривления сводится к появлению в уравнениях поперечного движения центробежной силы вида: $\mathbf{F} = E\mathbf{n}/R_b$. Здесь \mathbf{n} — единичный вектор вдоль радиуса кривизны. Случай, когда указанное выше условие нарушается, более сложен для анализа и будет рассмотрен в отдельной работе, отметим лишь, что наряду с центробежными

теперь могут возникать силы, определяемые производными от величины R_b по продольной координате (времени).

В отличие от плоскостных потенциалов в обычных кристаллах, осевые потенциалы в фуллеритах имеют достаточно сложную зависимость от поперечных координат, поэтому решения уравнений движения (10) и (15) возможны лишь численными методами. Начальные координаты частицы являются случайными величинами, причем, поскольку поперечные размеры реальных пучков частиц значительно превышают размер элементарной ячейки в поперечной плоскости, их можно считать равномерно распределенными по площади элементарной ячейки.

Рассмотрим пример, когда пучок релятивистских частиц с пренебрежимо малой угловой расходимостью $\theta_0 \ll \theta_L$ входит в фуллерит параллельно одной из главных кристаллографических осей. Эффект каналирования достаточно быстро приводит к существенной перестройке первоначального распределения пучка в фазовом пространстве поперечных координат и импульсов. Введем длину $L_0 = R/\theta_L$, которая по порядку величины совпадает с $\lambda/4$, где λ — характерная длина волны радиальных колебаний частиц в осевом канале. Как показывают численные расчеты, почти полная перестройка происходит лишь на относительно больших, порядка $10L_0$, глубинах проникновения в фуллерит. На рис. 3 и 4 показано равновесное пространственное распределение пучка отрицательно и положительно заряженных частиц, в пределах элементарной ячейки при различных направлениях [110] и [100]. Окружность на рисунках имеет радиус фуллерена. Каналированные отрицательные частицы концентрируются на периферии и в центре канала, где их потенциальная энергия имеет локальный максимум (рис. 1) и таким образом имеет место эффект зависания. В случае положительных частиц существуют две различные потенциальные ямы (рис. 2), одна из которых соответствует каналированию в пространствах между цепочками, другая, менее глубокая, но обладающая большей аксиальной симметрией, — каналированию внутри цепочек. Поскольку потенциальные ямы имеют вогнутую форму, пучок положительных частиц концентрируется вблизи центров этих двух различных каналов. Пространственное перераспределение пучка каналированных частиц имеет важные последствия, в частности, оно должно приводить к существенному изменению сечений всех вторичных процессов, для которых важны близкие столкновения частиц с атомами (ядрами) среды, например, для резерфордовского рассеяния. Вернем

Рис. 3. Равновесное пространственное распределение пучка отрицательно заряженных частиц в пределах элементарной ячейки в случае осевого каналирования вдоль направления [110]

ся к обсуждению эффектов пространственного перераспределения пучков частиц в фуллеритах ниже при анализе деканалирования.

Отметим, что в соответствии с теоремой Лиувилля о сохранении объема фазового пространства в отсутствие диссипативных процессов, пространственная фокусировка пучков частиц должна сопровождаться соответствующим уширением их первоначального углового распределения, что подтверждается соответствующими расчетами, которые мы в данной статье не приводим.

4. НЕКОГЕРЕНТНОЕ РАССЕЙЯНИЕ И ДЕКАНАЛИРОВАНИЕ

Усредненный потенциал (8) отвечает полностью когерентному рассеянию частиц молекулярными цепочками, при этом предполагается, что эффекты некогерентного рассеяния на отдельных атомах и

электронах среды относительно слабы и в первом приближении ими можно пренебречь. Теперь мы исследуем влияние флуктуаций потенциала вследствие вращений и тепловых колебаний фуллеренов в узлах кристаллической решетки и проведем расчеты длины деканалирования, т. е. длины пробега частиц в фуллерите, на которой значительная доля первоначально каналированных частиц покинет канал в результате некогерентного рассеяния.

Рассмотрим более детально процесс рассеяния быстрой частицы на цепочке колеблющихся фуллеренов. Обозначим посредством ρ_0 и z соответственно поперечный радиус-вектор и продольную координату частицы. Пусть далее $\rho_i^{(m)}$ обозначает векторное отклонение i -ой молекулы от оси цепочки вследствие тепловых колебаний, $w(\rho_i)$ — плотность вероятности такого отклонения, $N = \Delta z/d_R$ — число молекул на пути частицы Δz . На частицу действует потенциал i -ой молекулы $U_1(r_i, \phi_i, \vartheta_i)$, где

Рис. 4. Равновесное пространственное распределение пучка положительно заряженных частиц в пределах элементарной ячейки в случае осевого каналирования вдоль направления [100]

$r_i = \sqrt{|\boldsymbol{\rho}_i^{(m)} - \boldsymbol{\rho}_0|^2 + (z - id_R)^2}$ — расстояние от частицы до центра фуллерена, ϕ_i, ϑ_i — углы, определяющие случайную ориентацию фуллерена. Приращение поперечного импульса \mathbf{q} частицы в предположении, что акты рассеяния на различных фуллеренах происходят независимо, может быть представлено в виде следующей суммы соответствующих приращений \mathbf{q}_i при рассеянии на каждой из молекул:

$$\mathbf{q} = \sum_{i=1}^N \mathbf{q}_i.$$

Предположим также, что изменения поперечной координаты частицы $|\Delta \boldsymbol{\rho}_0|$ на пути Δz малы по сравнению с расстоянием, на котором существенно меняется потенциал рассеивателя. Согласно [13] при высоких энергиях частиц это условие может выполняться даже при начальных углах входа по отношению к оси цепочки, существенно превышающих угол Линдхарда. В результате получаем следующее выражение для импульса, передаваемого при рассеянии на отдельной молекуле:

$$\mathbf{q}_i = \nabla \int_{-\infty}^{\infty} U_1 \left(\sqrt{|\boldsymbol{\rho}_i - \boldsymbol{\rho}_0|^2 + z^2}, \phi_i, \vartheta_i \right) dz,$$

где ∇ — градиент в поперечной плоскости.

Пренебрегая далее корреляциями тепловых колебаний и вращений соседних молекул, приходим к выводу, что среднее (по тепловым колебаниям и угловым ориентациям молекул) приращение поперечного импульса $\langle \mathbf{q}(\boldsymbol{\rho}_0) \rangle$ в этом случае также является суммой соответствующих средних при рассеянии на каждой из молекул, т. е.

$$\langle \mathbf{q} \rangle = \sum_{i=1}^N \langle \mathbf{q}_i \rangle,$$

где

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{q}_i(\boldsymbol{\rho}_0) \rangle &= \\ &= (4\pi)^{-1} \nabla \int_0^{2\pi} \int_0^{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} U_1 \left(\sqrt{|\boldsymbol{\rho}_i - \boldsymbol{\rho}_0|^2 + z^2}, \phi_i, \vartheta_i \right) \times \\ &\quad \times w(\boldsymbol{\rho}_i) \sin \vartheta_i dz d\vartheta_i d\phi_i d^2 \rho_i. \end{aligned}$$

Таким образом, среднее приращение поперечного импульса определяется потенциалом фуллерена, усредненным по продольной координате, тепловым колебаниям и ориентациям фуллеренов, что соответствует основной концепции теории каналирования в фуллеритах, развитой выше.

В следующем приближении необходимо учитывать вероятность возможных отклонений \mathbf{q} от своего среднего значения $\langle \mathbf{q} \rangle$. Пусть число молекул N на указанном пути остается достаточно большим, тогда, согласно центральной предельной теореме теории вероятностей, распределение вероятностей отклонений имеет гауссовский вид. Среднеквадратичные флуктуации приращения поперечного импульса могут быть представлены в виде

$$\langle (\mathbf{q} - \langle \mathbf{q} \rangle)^2 \rangle = \sum_{i=1}^N (\langle \mathbf{q}_i^2 \rangle - \langle \mathbf{q}_i \rangle^2),$$

где $\langle \mathbf{q}_i^2 \rangle$ — среднеквадратичный импульс, передаваемый частице при рассеянии на отдельном фуллере. Предположим далее, что рассеяние на всех атомах фуллерена происходит независимо и учтем также, что частица может рассеиваться также и на электронах среды. В этом случае среднеквадратичный передаваемый импульс может быть найден аналогично тому, как это делается при анализе многократного рассеяния в аморфной среде, однако, поскольку среднеквадратичный импульс $\langle \mathbf{q}^2 \rangle$ зависит от ρ_0 , необходимо учитывать неоднородное распределение плотности рассеивателей в поперечной плоскости кристалла. Таким образом, движение быстрой частицы в фуллерите представляется как относительно плавное движение в усредненном потенциале молекулярных цепочек, на которое накладываются стохастические возмущения, связанные с некогерентным рассеянием на отдельных атомах и электронах среды. Самосогласованность такого подхода обсуждается ниже.

Как известно, в аморфной среде среднеквадратичный угол многократного рассеяния на атомах (экранированных ядрах) на единице пути может быть представлен в виде

$$\langle \theta_a^2 \rangle = 4\pi n_a (Ze^2)^2 E^{-2} L_a,$$

где n_a — средняя по объему плотность числа ядер, $L_a = \ln(191Z^{-1/3})$ — кулоновский логарифм. При рассеянии на электронах среды, которые можно считать свободными, аналогичное выражение имеет вид $\langle \theta_e^2 \rangle = 4\pi n_e e^4 E^{-2} L_e$, где n_e — средняя по объему плотность числа электронов, $L_e = \ln(1194Z^{-2/3})$ (см., например, [13]). Используемые логарифмические множители L_a, L_e учитывают экранировку кулоновского поля как на относительно больших, так и на малых расстояниях, существенных для рассеяния.

В аморфной среде многократное рассеяние на электронах оказывается примерно в Z раз слабее

рассеяния на ядрах, однако при каналировании ситуация может измениться. Как отмечалось выше, в случае каналирования необходимо, во-первых, учитывать неоднородное распределение плотности числа ядер $n_a(\mathbf{r})$ и электронов $n_e(\mathbf{r})$ по координатам \mathbf{r} в поперечной плоскости канала, а во-вторых, — перераспределение плотности потока каналированных частиц, обсуждавшееся выше. Аналитическое выражение для радиального распределения плотности числа электронов в отдельной цепочке фуллеренов получается с помощью (3) аналогично тому, как были получены формулы (7) и (8) для потенциалов, и имеет вид

$$n_e^{(R)}(\rho) = 60 \sum_{j=1}^4 \frac{Z a_j^{(e)}}{4\pi R d_R} \times \int_0^\infty \exp\left(-\frac{k_\perp^2}{4b_j^{(e)2}}\right) J_0(k_\perp \rho) \sin k R dk_\perp. \quad (17)$$

Для распределения плотности числа атомов в отдельной цепочке фуллеренов с учетом их смещений из равновесных положений вследствие тепловых колебаний фуллеренов получаем

$$n_a^{(R)}(\rho) = \frac{60}{(2\pi)^{3/2} u_1 R d_R} \times \int_0^\infty \left\{ \exp\left[-\frac{(\sqrt{\rho^2 + z^2} - R)^2}{2u_1^2}\right] - \exp\left[-\frac{(\sqrt{\rho^2 + z^2} + R)^2}{2u_1^2}\right] \right\} \frac{dz}{\sqrt{\rho^2 + z^2}}. \quad (18)$$

Чтобы получить соответствующие распределения в поперечной плоскости, необходимо провести дополнительное суммирование (17) и (18) по всем цепочкам фуллеренов, параллельным кристаллографическому направлению, вдоль которого происходит каналирование. На рис. 5 показано, как меняется ядерная $n_a(\mathbf{r})$ (кривая 1) и электронная $n_e(\mathbf{r})$ (кривая 2) плотности вдоль прямой, соединяющей две соседние наиболее удаленные цепочки фуллеренов в канале [100]. Амплитуда тепловых колебаний фуллеренов u_1 рассчитывалась в рамках модели Дебая с температурой $T_D = 55.4$ К, измеренной в экспериментах [11], а температура самого фуллерита считалась комнатной. Тепловые колебания слабо влияют на распределение электронов, поскольку их амплитуда оказывается малой по сравнению с размерами электронных оболочек в атоме. Распределение ядер в области $\rho \geq R$ определяется исключительно тепловыми колебаниями, однако в области $\rho < R$

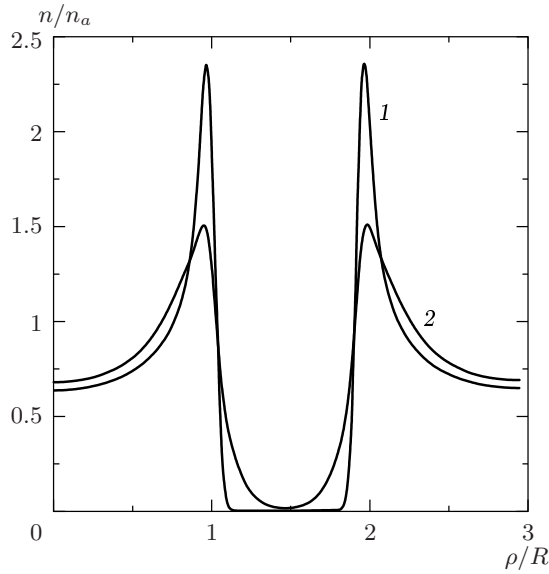


Рис. 5. Плотность распределения числа ядер (кривая 1) и электронов (кривая 2) в зависимости от расстояния до оси [100] вдоль прямой, соединяющей две соседние наиболее удаленные оси [100]. Плотность распределений нормирована на соответствующие средние по объему величины, а расстояние измеряется в единицах радиуса фуллерена

эффект тепловых колебаний не существен из-за более сильного влияния вращений молекул. Из приведенных расчетов следует, что частицы, каналированные внутри цепочек, должны испытывать значительно более сильное некогерентное рассеяние на атомах, чем частицы, каналированные между цепочками, так как внутри цепочек, помимо флуктуаций потенциала за счет тепловых колебаний молекул, существуют гораздо большие флуктуации, связанные с их вращением, и поэтому плотность ядер здесь порядка средней по объему плотности.

Алгоритм проведенных нами расчетов траекторий частиц, входящих в фуллерит под достаточно малым углом θ_0 по отношению к цепочкам фуллеренов, состоял в следующем. Сначала методом Монте-Карло разыгрывалась случайная начальная поперечная координата частицы \mathbf{r}_0 , распределенная равномерно по площади элементарной ячейки в поперечной плоскости фуллерита. Далее, уравнение поперечного движения в усредненном потенциале (8)

$$\frac{d}{dt} \mathbf{p}_\perp = -\nabla U(\mathbf{r}) \quad (19)$$

(где $\mathbf{p}_\perp = E d\mathbf{r}/dt$ — поперечная компонента импульса частицы) интегрировалось численно на отрезке Δt , в результате чего находились значения попереч-

ной координаты \mathbf{r}_1 и поперечного импульса $\mathbf{p}_{\perp 1}$ в момент времени $t_1 = \Delta t_1$. Интервал времени Δt_1 выбирался таким образом, чтобы относительные изменения плотностей числа ядер $n_a(\mathbf{r})$ и электронов $n_e(\mathbf{r})$ на пути интегрирования были пренебрежимо малы, при этом число атомов на этом пути оставалось существенно большим единицы. Далее разыгрывалось случайное приращение $\Delta\theta$ поперечного импульса, вызванное некогерентным многократным рассеянием частицы на атомах и электронах среды, причем считалось, что плотность вероятности малоуглового многократного некогерентного рассеяния ультрарелятивистских частиц на угол $\Delta\theta = \{\Delta\theta_x, \Delta\theta_y\}$ на пути $\Delta z \approx \Delta t$ имеет гауссовский вид:

$$P(\Delta\theta) = 2 \frac{\Delta\theta \exp\left(-(\Delta\theta)^2 / \langle\theta_s^2\rangle\right)}{\langle\theta_s^2\rangle}, \quad (20)$$

где средний квадрат угла многократного рассеяния каналированной частицы на пути Δz определяется соотношением

$$\langle\theta_s^2(\mathbf{r})\rangle = 16\pi e^4 (\Delta z/E^2) [n_a(\mathbf{r}) Z^2 L_n + n_e(\mathbf{r}) L_e].$$

Это приращение добавлялось к $\mathbf{p}_{\perp 1}$, а их сумма считается фактическим значением поперечного импульса в момент времени t_1 . После этого указанная процедура (за исключением розыгрыша координат в начале интервала) повторялась на следующем интервале интегрирования от t_1 до $t_2 = t_1 + \Delta t_2$.

Поскольку из-за сложного вида усредненного потенциала уравнения движения могут быть решены лишь численными методами, а начальные поперечные координаты частиц и их импульсы (из-за реального углового разброса частиц в пучке) также являются случайными, развитый нами метод учета некогерентного рассеяния при каналировании в фуллеритах оказывается значительно более простым и естественным по сравнению с методом кинетических уравнений (см., например, [2]), по крайней мере в случае осевого каналирования, когда фазовое пространство поперечного движения является четырехмерным. Что касается расчетов траекторий методом бинарных столкновений частицы с атомами кристалла [15], то такой подход в случае высоких энергий оказывается непродуктивным, поскольку длины де-каналирования в этом случае относительно велики и приходится учитывать слишком большое число столкновений. С другой стороны, как показывают дальнейшие расчеты, для частиц с энергией в сотни ГэВ интервалы интегрирования Δt содержат более 10^2 атомов (в связи с этим используемый нами метод

иногда называют методом укрупненных столкновений [16]), что в соответствующее число раз сокращает время расчетов длин деканалирования.

Прежде чем обсуждать результаты конкретных численных расчетов, проведем оценку различных аспектов влияния некогерентного рассеяния на динамику распространения пучка частиц в фуллеритах. В частности, равновесное пространственное распределение потока каналированных частиц, показанное на рис. 3 и 4, может оказаться недостижимым, так как на относительно большом пути его формирования (как отмечалось выше, этот путь составляет не менее $10L_0$) некогерентное рассеяние может привести к существенному перераспределению частиц в фазовом пространстве, если длина пути окажется сравнимой с длиной деканалирования. Качественную оценку длины деканалирования l_{dc} можно получить, приравняв среднеквадратичный угол многократного рассеяния на этой длине квадрату угла Линдхарда. В результате приходим к соотношению

$$l_{dc} \approx \frac{2U_0 E}{E_s^2} t_0. \quad (21)$$

Здесь $E_s = \sqrt{4\pi\hbar/e^2} \approx 21.2$ МэВ, t_0 — радиационная единица длины, определяемая равенством

$$\frac{1}{t_0} = \frac{4e^6}{\hbar} (Z^2 n_a L_n + n_e L_e), \quad (22)$$

причем при оценках используются средние по объему значения ядерной и электронной плотностей в фуллерите n_a, n_e . Если выполняется неравенство $l_{dc} \gg 10L_0$, то влиянием некогерентного рассеяния на равновесное распределение можно заведомо пренебречь и предыдущие результаты расчетов пространственных распределений пучков частиц в каналах остаются в силе. Как показывают численные оценки, в случае электронов и позитронов выполнение этого неравенства оказывается возможным лишь при достаточно высоких энергиях последних, $E \gg 5$ ГэВ.

Для самосогласованности используемого подхода необходимо, чтобы длина деканалирования значительно превышала характерную длину L_0 , на которой происходят радиальные колебания частиц в осевом канале, в противном случае некогерентное рассеяние нельзя считать относительно малым возмущением и концепция усредненного потенциала неприменима, по крайней мере в случае классического движения. Это условие ограничивает область энергий электронов и позитронов значениями $E \gtrsim 1$ ГэВ.

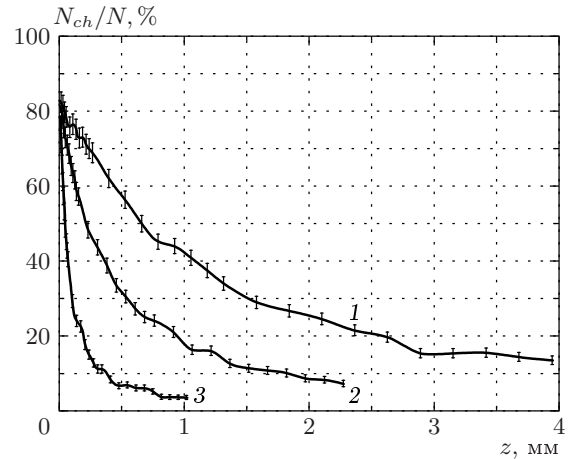


Рис. 6. Относительное число N_{ch}/N каналированных вдоль оси [100] ультрарелятивистских положительно заряженных частиц на глубине проникновения пучка в мишень z . Кривая 1 соответствует энергии частиц $E = 150$ ГэВ, кривая 2 — 50 ГэВ, кривая 3 — 10 ГэВ

Результаты более точных численных расчетов длин деканалирования для частиц с различными энергиями E приведены ниже. Методом укрупненных столкновений вычислялись случайные траектории $N = 10^3$ частиц для каждого из значений полной энергии E . Для простоты считалось, что пучок частиц входит в фуллерит параллельно кристаллографическим осям и имеет пренебрежимо малую начальную угловую расходимость. Расчет для каждого из приведенных ниже значений энергии занимал не более 25 ч на компьютере с производительностью 2 GFLOPS. На рис. 6 показана зависимость относительного числа N_{ch}/N ультрарелятивистских положительно заряженных частиц (протонов, π^+ -мезонов или позитронов), остающихся в осевом канале [100], от глубины проникновения пучка в мишень z . Из этих расчетов следует, что длина деканалирования примерно линейно растет с энергией частиц, что согласуется с простыми оценками (21). Замедление деканалирования на относительно больших глубинах, по-видимому, связано с тем, что на таких глубинах в канале остаются преимущественно частицы, которые каналируют в пространстве между цепочками, где, как отмечалось выше, влияние некогерентного рассеяния слабее.

Эффективность поворота положительно заряженных ультрарелятивистских частиц с энергией 150 ГэВ с помощью фуллеритов, осевые каналы [100] которых изогнуты в плоскости (001), иллюстрируется серией кривых на рис. 7. Здесь, следуя Цыга-

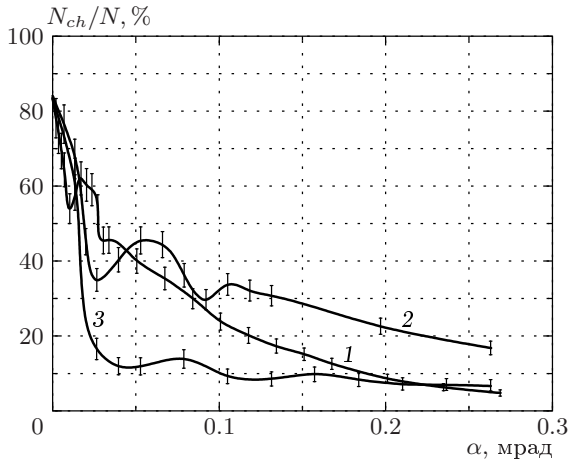


Рис. 7. Относительное число N_{ch}/N положительно заряженных частиц с энергией $E = 150$ ГэВ, каналированных вдоль изогнутых осей [100] фуллерита в зависимости от угла поворота пучка α . Кривая 1 соответствует радиусу кривизны $R_b = 2R_c$, кривая 2 — $R_b = R_c$, кривая 3 — $R_b = 0.5R_c$

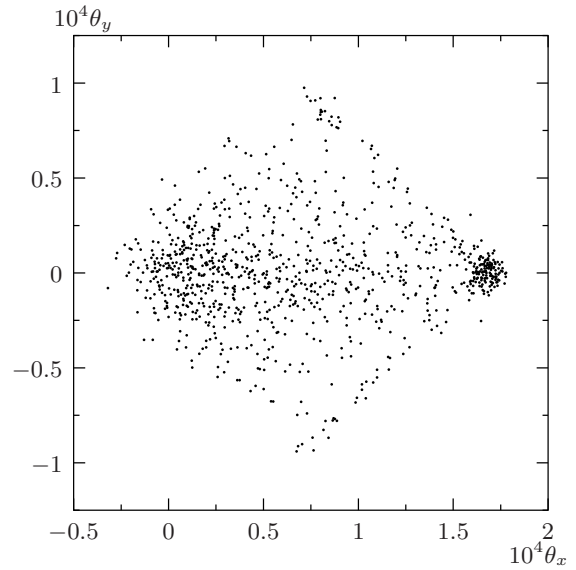


Рис. 8. Угловое распределение 10^3 положительно заряженных частиц с энергией $E = 150$ ГэВ на выходе из фуллерита толщиной $T = 1.31$ мм, изогнутого с радиусом кривизны $R_b = 2R_c$

нову [12], мы ввели критический радиус кривизны $R_c = RE/U_0 \approx 3.91$ м, где R — радиус фуллерена, $U_0 \approx 13.5$ эВ — глубина (наиболее глубокой) потенциальной ямы. В области относительно небольших углов поворота и, следовательно, небольших глубин проникновения в кристалл фуллерита число каналированных частиц немонотонно меняется с глубиной. Это обусловлено тем, что на таких глубинах достаточно велика вероятность реканалирования, т. е. обратного захвата надбарьерной частицы в потенциальную яму. Согласно приведенным результатам, наиболее эффективно поворот пучка частиц происходит при радиусе кривизны, близком к R_c , при этом случае около 20% пучка частиц может быть повернуто на относительно большие углы 0.2 мрад (соответствующие нескольким десяткам углов Линдхарда). Существование оптимального радиуса кривизны обусловлено влиянием двух конкурирующих факторов: меньшие радиусы способствуют повороту на данный угол при меньшей длине кристалла, уменьшая таким образом влияние деканалирования, в то же время увеличивается центробежное поле, которое понижает глубину эффективной потенциальной ямы, столь важную для каналирования.

Угловое распределение частиц на выходе из фуллерита толщиной $T = 1.31$ мм, изогнутого с радиусом кривизны $R_b = 2R_c$, что соответствует повороту оси [100] на угол $\alpha = 1.68 \cdot 10^{-4}$, показано на рис. 8. Начальное угловое распределение представ-

ляет собой точку с координатами импульсного пространства $\theta_{0x} = \theta_{0y} = 0$. Видно, что значительная часть пучка частиц следует изгибу каналов и поворачивается на углы порядка α . Эти частицы имеют угловой разброс близкий к углу Линдхарда. Остальные частицы поворачиваются на углы, меньшие α , и имеют существенно больший угловой разброс. Это частицы, которые только некоторое время следовали изгибу канала и деканалировались на различных глубинах $z < T$ вследствие некогерентного рассеяния. Для сравнения на рис. 9 приведено аналогичное угловое распределение для прямого кристалла ($R_b = \infty$).

Согласно результатам недавних экспериментов, проведенных в ЦЕРНе [17], радиационные потери энергии легких частиц (электронов и позитронов) с энергией в сотни ГэВ при каналировании в кристаллах алмаза почти на два порядка превышают соответствующие потери в аморфной среде. Таким образом, электроны и позитроны высокой энергии могут терять значительную долю своей энергии E на глубинах, существенно меньших, чем радиационная длина t_0 в аморфной мишени (неориентированном кристалле), которая в случае фуллерита составляет 25.5 см. Это происходит вследствие усиления интенсивности электромагнитного излучения каналированных частиц во всей области энергий ω излучаемых фотонов, включая область $\omega \sim E$. Если

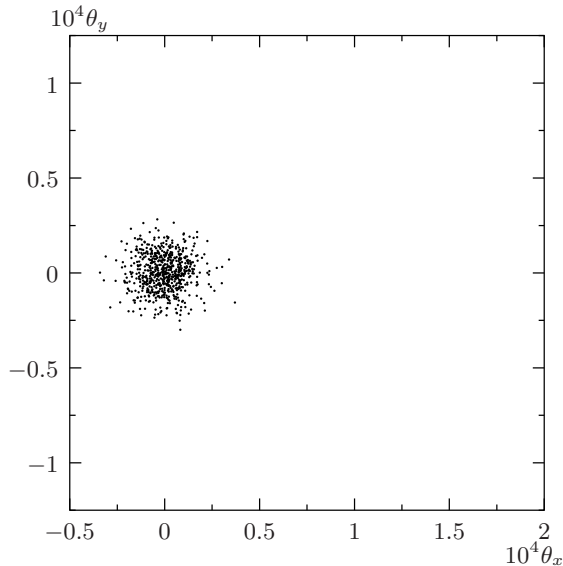


Рис. 9. Угловое распределение 10^3 положительно заряженных частиц с энергией $E = 150$ ГэВ на выходе из прямого фуллерита толщиной $T = 1.31$ мм

радиационная длина становится сравнимой с глубиной проникновения частиц в кристалл, то становится необходимым учитывать радиационные эффекты в процессах каналирования и деканалирования. В случае фуллеритов параметр $\chi = \hbar E |\nabla U(\mathbf{r})|$, определяющий влияние квантовой отдачи при излучении позитроном (см., например, [3]), оказывается малым (≤ 0.05), если энергия позитрона не превышает величину ~ 1 ТэВ. Это позволяет для оценки влияния радиационных эффектов в фуллеритах использовать классическую формулу для радиационных потерь в единицу времени:

$$\frac{dE}{dt} = \frac{2e^4 E^2}{3} |\nabla U(\mathbf{r})|^2, \quad (23)$$

где $\mathbf{r} = \mathbf{r}(t)$ — поперечная координата позитрона. При энергиях $\gtrsim 1$ ТэВ спектр излучения продвигается в область $\omega \sim E$, при этом, согласно квантовой теории излучения, квадратичная зависимость радиационных потерь энергии частицы в (23) сменяется более слабой зависимостью, пропорциональной $E^{2/3}$. Выражение (23) усреднялось далее по поперечным координатам с функциями распределения, показанными на рис. 3 и 4. В результате оказалось, что позитроны с энергией 150 ГэВ на всем пути $T = 1.31$ мм могут терять на излучение не более 0.9% своей энергии. Потери электронов несколько больше и составляют около 4%. Таким образом, в отличие от алмаза, влиянием радиационных потерь

при осевом каналировании позитронов в фуллеритах можно, по-видимому, пренебречь вплоть до энергий позитронов порядка 1 ТэВ. Это связано с тем, что в фуллерите осевые каналы относительно менее глубокие и более широкие, поэтому каналированные позитроны в среднем движутся в области меньшего градиента потенциала, чем в алмазе. Что касается каналированных электронов, то они движутся как раз вблизи периферии фуллеренов, где градиент потенциала максимален, поэтому влияние радиационных потерь для них может оказаться существенным при более низких энергиях.

5. ЗАКЛЮЧИТЕЛЬНЫЕ ЗАМЕЧАНИЯ

Каналирование быстрых частиц в кристаллах из фуллеренов имеет целый ряд особенностей по сравнению с каналированием в обычных кристаллах, что связано со специфической молекулярной структурой узлов кристаллической решетки фуллеритов. В частности, в фуллеритах существуют достаточно глубокие, широкие и почти аксиально-симметричные потенциальные ямы как для положительных, так и для отрицательно заряженных частиц, что способствует более эффективному захвату частиц в режим осевого каналирования.

Осевое каналирование в изогнутых фуллеритах позволяет поворачивать пучки ультрарелятивистских частиц на относительно большие углы в отличие от обычных кристаллов, где осевое каналирование малоэффективно для этих целей. При этом происходит поворот полного импульса частиц, а не только поворот одной из его компонент, как при плоскостном каналировании в изогнутых кристаллах [12].

Механизмы деканалирования в фуллеритах также имеют особенности, связанные с вращением молекул. Существенно, однако, что длина деканалирования частиц высоких энергий оказывается достаточно большой даже при учете флуктуаций усредненного потенциала, вызванного этим вращением.

Помимо подробно рассмотренного выше случая фуллеритов, состоящих из фуллеренов C_{60} , существуют также аналогичные молекулярные кристаллы из несферических молекул C_{70} [18], а также кристаллические соединения фуллеренов с различными атомами (фуллериды) [19]. Очевидно, отмеченные особенности каналирования должны существовать и в таких структурах.

Под действием высокого давления и температуры может происходить полимеризация фулле-

ритов [20], препятствующая вращению молекул в узлах решетки. В этом случае и в случае фуллеридов, где соседние фуллерены сильно связаны посредством атомов других элементов, усреднение потенциала по вращению молекул не имеет смысла и проблема каналирования в таких структурах требует дополнительного рассмотрения.

Работа выполнена при финансовой поддержке INTAS (проект 97-30392).

Авторы благодарят Хавьера Артру (Xavier Artur) за полезное обсуждение результатов работы.

ЛИТЕРАТУРА

1. D. S. Gemmell, *Rev. Mod. Phys.* **129**, 46 (1974).
2. В. А. Базылев, Н. К. Жеваго, *УФН* **160**, 47 (1990).
3. H. W. Kroto, J. R. Heath, S. C. O'Brien, R. F. Curl, and R. E. Smalley, *Nature* **318**, 162 (1985).
4. P. A. Heiney, J. E. Fischer, A. R. McGhie, W. J. Romanow et al., *Phys. Rev. Lett.* **66**, 2911 (1991).
5. S. Amelinckx, C. Van Heurck, D. Van Dyck, and G. Van Tendeloo, *Phys. Stat. Sol. (a)* **131**, 589 (1992).
6. Л. Г. Геворгян, К. А. Испирян, Р. К. Испирян, *Письма ЖЭТФ* **66**, 322 (1997).
7. N. K. Zhevago and V. I. Glebov, *Phys. Lett. A* **250**, 360 (1998); *ЖЭТФ* **91**, 504 (2000).
8. N. K. Zhevago and V. I. Glebov, *Phys. Lett. A* **282**, 97 (2001).
9. P. A. Doyle and P. S. Turner, *Acta Cryst. A* **24**, 390 (1968).
10. E. N. Malsen, A. G. Fox, and M. A. O'Keefe, *International Tables for Crystallography*, Vol. C, ed. by A. J. C. Wilson, Kluwer Academic, Dordrecht (1992).
11. Н. А. Аксенова, А. П. Исакина, А. И. Прохвятилов, М. А. Стржемечный, *ФНТ* **25**, 964 (1999).
12. Е. Н. Tsyganov, *Preprints FNAL-TM-682, FNAL-TM-684* (1976); *Письма в ЖЭТФ* **26**, 403 (1979).
13. А. И. Ахиезер, Н. Ф. Шульга, *УФН* **137**, 561 (1982).
14. Y. S. Tsai, *Rev. Mod. Phys.* **46**, 815 (1974).
15. M. T. Robinson and O. S. Oen, *Phys. Rev.* **132**, 2385 (1963).
16. R. Berger, *Methods of Computational Physics*, Acad. Press, N. Y. (1963), p. 1, 135.
17. K. Kirschenbom, U. Mikkelsen, E. Uggerhøj et al., *Nucl. Instr. Meth. B* **174**, 274 (2001).
18. A. Talyzin and U. Jansson, *J. Phys. Chem.* **104**, 5064 (2000).
19. O. Zhou, J. E. Fischer, N. Cousel et al., *Nature* **351**, 462 (1991).
20. V. D. Blank, S. G. Buga, N. R. Serebryanaya et al., *Phys. Lett. A* **220**, 149 (1996).