

01;03

©1995 г.

**РЕШЕНИЕ КИНЕТИЧЕСКОГО УРАВНЕНИЯ
ДЛЯ БЫСТРЫХ ЧАСТИЦ В АМОРФНОЙ СРЕДЕ
1. ТРАНСФОРМАЦИЯ ФУНКЦИИ РАСПРЕДЕЛЕНИЯ
ПО СКОРОСТЯМ ПРИ МНОГОКРАТНЫХ
УПРУГИХ СОУДАРЕНИЯХ**

Е.Г.Шейкин

Научно-исследовательское предприятие гиперзвуковых систем,
196066, Санкт-Петербург, Россия
(Поступило в Редакцию 22 апреля 1994 г.
В окончательной редакции 1 ноября 1994 г.)

Найдено решение кинетического уравнения в виде разложения по числу столкновений испытанных быстрой частицей при движении в аморфной среде. Получено аналитическое выражение для функции распределения быстрых частиц при упругом характере взаимодействия с неподвижными атомами мишени в случае, когда масса быстрой частицы превышает массу атома мишени. Проведено сравнение аналитических результатов с результатами численных расчетов методом Монте-Карло.

При движении быстрых атомных частиц с энергиями, не превышающими 1 МэВ, в аморфном веществе или в газовой среде процесс упругого рассеяния играет важную, а с уменьшением энергии и определяющую роль в формировании их пространственного, углового и энергетического распределения [1]. В настоящее время, однако, не существует аналитических методов решения кинетического уравнения для произвольного соотношения масс сталкивающихся частиц. Разработаны методы приближенного решения задачи для случая, когда обмен энергии при соударении невелик, что соответствует прохождению частицы в среде с сильно отличающимися массами частицы и атомов мишени [2]. В данной работе предлагается приближенный метод решения кинетического уравнения для широкого диапазона изменения соотношения массы частицы и массы атомов мишени. Ограничимся рассмотрением движения быстрых частиц в аморфной среде из неподвижных атомов мишени в предположении упругого характера рассеяния. Решение данной задачи может быть использовано для описания процессов имплантации, распыления, трансформации энергетического спектра частиц при прохождении через слой вещества.

Кинетическое уравнение для быстрых частиц, движущихся в аморфном теле или газе, в приближении плоской геометрии выглядит следующим образом [3]:

$$\mu v \frac{\partial f}{\partial x} + n \sigma v f = \Phi_s + \int_{-1}^1 d\mu' \int_0^{\infty} dv' n \sigma(v') g(v', \mu'; v, \mu) v' f(x, v', \mu'), \quad (1)$$

где $f(x, v, \mu)$ — функция распределения быстрых частиц в точке с пространственной координатой x ; v — скорость частицы; μ — косинус угла между направлением движения частицы и осью x ; n — концентрация атомов мишени; $\sigma(v)$ — сечение рассеяния, Φ_s — описывает поступление частиц из источника; $g(v', \mu'; v, \mu)$ определяет вероятность перехода частицы из состояния v', μ' в результате соударения в состояние v, μ и удовлетворяет нормировочному соотношению

$$\int_{-1}^1 d\mu \int_0^{v'} dv g(v', \mu'; v, \mu) = 1.$$

Приближенно предполагая, что рассеяние в пространствах v и μ происходит независимо, представим функцию $g(v', \mu'; v, \mu)$ в следующем виде:

$$g(v', \mu'; v, \mu) = g(v'; v) \cdot g(\mu'; \mu), \quad (2)$$

где функция $g(v'; v)$ задает вероятность изменения скорости частицы от значения v' в результате соударения до значения v и удовлетворяет нормировочному соотношению

$$\int_0^{v'} g(v'; v) dv = 1.$$

Функция $g(\mu'; \mu)$ задает вероятность перехода частицы в результате соударения из состояния μ' в состояние μ и удовлетворяет нормировочному соотношению

$$\int_{-1}^1 g(\mu'; \mu) d\mu = 1.$$

Предположение (2) является достаточно сильным и требует определения диапазона применимости решения, полученного с использованием данного приближения. Очевидно, что это приближение может быть использовано при описании движения быстрых частиц в веществе, когда массы быстрых частиц и атомов мишени сильно различаются. В этом случае скорость быстрой частицы при столкновении меняется незначительно. Угловое распределение рассеянных быстрых легких частиц практически изотропно. Тяжелые быстрые частицы при рассеянии практически не меняют направление своего движения. Вопрос о применимости данного приближения при сравнимых массах быстрой частицы и атомов мишени требует более серьезного обоснования. В

данной работе проводится сопоставление полученных приближенных решения кинетического уравнения с результатами расчетов по методу Монте-Карло.

Рассмотрим кинетическое уравнение (1) с источником $\Phi_s = \delta(x) \times \delta(v - v_0)\delta(\mu - 1)$, описывающее в полупространстве $x > 0$ распространение частиц, приходящих на поверхность раздела сред $x = 0$ со скоростью $v = v_0$ и $\mu = 1$. В данной работе ограничимся приближением постоянного сечения рассеяния $\sigma = \text{const}$. В дальнейшем будет опубликовано обобщение предлагаемого метода с учетом зависимости сечения рассеяния от скорости.

Решение кинетического уравнения (1) представим в виде разложения по числу столкновений. Используемое в работе приближение для функции $g(v', \mu'; v, \mu)$ в форме (2) приводит это решение к следующему виду:

$$f(x, v, \mu) = \sum_k X_k(x, \mu) \cdot V_k(v), \quad (3)$$

где k — номер испытанного быстрой частицей столкновения.

Подставляя (3) в уравнение (1), получаем для функций X_k и V_k следующие рекуррентные соотношения:

$$\nu V_k(\nu) = \int_{\nu}^1 g(\nu'; \nu) \cdot \nu' V_{k-1}(\nu') d\nu', \quad (4a)$$

$$\mu \frac{\partial X_k(z, \mu)}{\partial z} + X_k(z, \mu) = \int_{-1}^1 g(\mu'; \mu) X_{k-1}(z, \mu') d\mu', \quad (4b)$$

при $V_0(\nu) = \delta(\nu - 1)$, $X_0(z, \mu) = e^{-z} \cdot \delta(\mu - 1)$, где $\nu = v/v_0$ — безразмерная скорость, $z = n\sigma x$ — безразмерная пространственная координата.

Из рекуррентного соотношения (4a) следует, что $\int_0^1 \nu V_k(\nu) d\nu$ — величина постоянная, не зависящая от k , так как $\int_0^1 g(\nu'; \nu) d\nu = 1$. С учетом того что $V_0(\nu) = \delta(\nu - 1)$, следует, что для любого $k > 0$ $\int_0^1 \nu V_k(\nu) d\nu = 1$. Отсюда вытекает физический смысл функции $V_k(\nu)$. Величина $\nu V_k(\nu)$ определяет вероятность того, что скорость частицы, испытавшей k столкновений, находится в интервале $\nu - \nu + d\nu$.

Решение уравнения (4b) для функции $X_k(z, \mu)$, описывающей пространственное и угловое распределение частиц, испытавших k столкновений в плоскопараллельном слое вещества, при $0 \leq z \leq d$ с граничными условиями $X_k(0\mu)|_{\mu>0} = 0$ и $X_k(d, \mu)|_{\mu<0} = 0$ приводит к следующему рекуррентному соотношению:

$$\begin{aligned} X_k(z, \mu)|_{\mu>0} &= \frac{1}{\mu} e^{-z/\mu} \int_0^z e^{z'/\mu} \cdot I_k(z', \mu) dz', \\ X_k(z, \mu)|_{\mu<0} &= -\frac{1}{\mu} e^{-z/\mu} \int_z^d e^{z'/\mu} \cdot I_k(z', \mu) dz', \end{aligned} \quad (5)$$

где $I_k(z, \mu) = \int_{-1}^1 g(\mu'; \mu) X_{k-1}(z, \mu') d\mu'$.

Для определения функций $g(\nu'; \nu)$ и $g(\mu'; \mu)$, описывающих процесс упругого соударения, необходимо использовать связь между параметрами частицы до и после столкновения. При столкновении быстрой частицы с неподвижным атомом мишени (см., например, [4]) справедливы следующие соотношения:

$$\frac{\nu}{\nu'} = \sqrt{1 + 2 \frac{m_2}{m_1} \cos \chi + \left(\frac{m_2}{m_1}\right)^2} / \left(1 + \frac{m_2}{m_1}\right), \quad (6)$$

$$\cos \theta = \left(1 + \frac{m_2}{m_1} \cos \chi\right) / \sqrt{1 + 2 \frac{m_2}{m_1} \cos \chi + \left(\frac{m_2}{m_1}\right)^2}, \quad (7)$$

$$\mu = \mu' \cos \theta + \sqrt{1 - \mu'^2} \sin \theta \cos \psi, \quad (8)$$

где m_1 — масса налетающей частицы, m_2 — масса атома мишени, χ — угол рассеяния в системе центра масс, θ — угол рассеяния быстрой частицы в лабораторной системе, ψ — азимутальный угол рассеяния.

Величины χ и ψ , входящие в формулу (6)–(8), являются случайными и закон их распределения определяет закон распределения параметров ν и μ , а следовательно, и функций $g(\nu'; \nu)$ и $g(\mu'; \mu)$. Закон распределения случайной величины ξ будем описывать плотностью вероятности $p(\xi)$. При этом $p(\xi)d\xi$ определяет вероятность того, что случайная величина находится в промежутке $\xi - \xi + d\xi$, а $\int_{-\infty}^{\infty} p(\xi)d\xi = 1$. Будем полагать, что азимутальный угол рассеяния принимает любое значение от 0 до 2π с равной вероятностью, при этом $p(\psi) = 1/2\pi$.

По определению функция $g(\nu'; \nu)$ совпадает с плотностью вероятности $p(\nu)$ того, что частица после столкновения имеет скорость ν при начальной скорости ν' . Эта функция определяется из соотношения (6), связывающего случайные величины ν и ν' , с помощью закона преобразования случайных величин [5]. Выражение для $g(\nu'; \nu)$ при $p(x) = \sin \chi/2$, $0 \leq \chi \leq \pi$ (изотропное в системе центра масс рассеяние) имеет вид

$$g(\nu'; \nu) = \begin{cases} a \frac{\nu}{\nu'^2} & \text{при } \alpha \nu' < \nu < \nu', \\ 0 & \text{при } \nu > \nu'; \nu < \alpha \nu', \end{cases} \quad (9)$$

где

$$\alpha = \left| \frac{m_1 - m_2}{m_1 + m_2} \right|, \quad a = \frac{(m_1 + m_2)^2}{2m_1 m_2}.$$

При подстановке функции $g(\nu'; \nu)$ (9) в формулу (4) получаем рекуррентное соотношение для $V_k(\nu)$ в виде

$$V_k(\nu) = a \int_{\nu}^{\nu/\alpha} \frac{V_{k-1}(\nu')}{\nu'} d\nu', \quad k \geq 1,$$

$$V_0(\nu) = \delta(\nu - 1). \quad (10)$$

Для нахождения $V_k(\nu)$ в общем случае ($\alpha \neq 0$) приведем соотношение (10) к виду, удобному для использования интегрального преобразования Меллина. Продифференцировав (10) по ν , получаем

$$\nu \frac{dV_k}{d\nu} = a \left(V_{k-1} \left(\frac{\nu}{\alpha} \right) - V_{k-1}(\nu) \right). \quad (11)$$

Применяя к (11) преобразование Меллина (и используя соотношения из работы [6]), получим

$$W_k(s) = W_{k-1}(s)a(1 - \alpha^s)/s, \quad (12)$$

где $W_k(s) = \int_0^{\infty} V_k(\nu) \cdot \nu^{s-1} d\nu$.

В рассматриваемой задаче $V_0(\nu) = \delta(\nu-1)$ соответственно $W_0(s) = 1$, а значит, из рекуррентного соотношения (12) получаем явное выражение для функции $W_k(s)$

$$W_k(s) = (a(1 - \alpha^s)/s)^k. \quad (13)$$

Для нахождения $V_k(\nu)$ необходимо осуществить обратное преобразование Меллина от функции $W_k(s)$. С этой целью представим (13) в виде ряда

$$W_k(s) = \left(\frac{a}{s} \right)^k \sum_{i=0}^k (-1)^i c_k^i \alpha^{is}, \quad (14)$$

где $c_k^i = \frac{k!}{i!(k-i)!}$ — биномиальные коэффициенты.

Применим к (14) обратное преобразование Меллина

$$V(\nu) = \frac{1}{2\pi i} \int_{c-i\infty}^{c+i\infty} W(s)\nu^{-s} ds.$$

Согласно [6], обратное преобразование Меллина от функции $W(s)/b^s$ соответствует функции $V(b\nu)$, что с использованием результатов [6] позволяет для $V_k(\nu)$ получить из (14) следующее выражение:

$$V_k(\nu) = \frac{a^k}{(k-1)!} \sum_{i=0}^k (-1)^i c_k^i \ln^{k-1}(\alpha^i/\nu) \theta(\nu/\alpha^i), \quad (15)$$

где

$$\theta(x) = \begin{cases} 1, & 0 < x < 1, \\ 0, & x < 0, x > 1. \end{cases}$$

В частном случае равных масс ($\alpha = 0$) решение имеет более простой вид

$$V_k(\nu) = \frac{2^k}{(k-1)!} \ln^{k-1} \left(\frac{1}{\nu} \right), \quad k \geq 1.$$

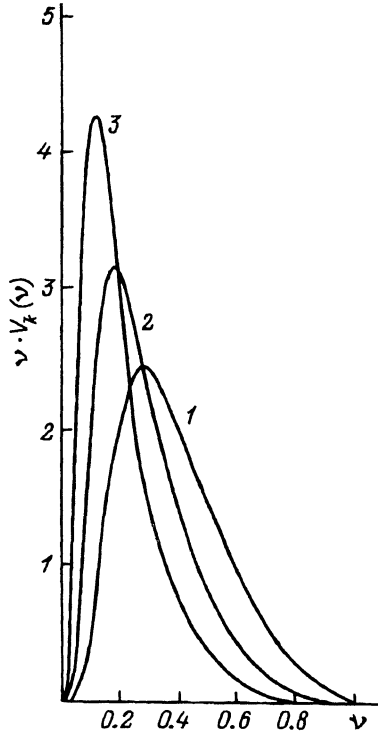


Рис. 1. Функция распределения по скоростям частицы, испытавшей k столкновений, при $m_1/m_2 = 2$, $k = 3$ (1), 4 (2), 5 (3).

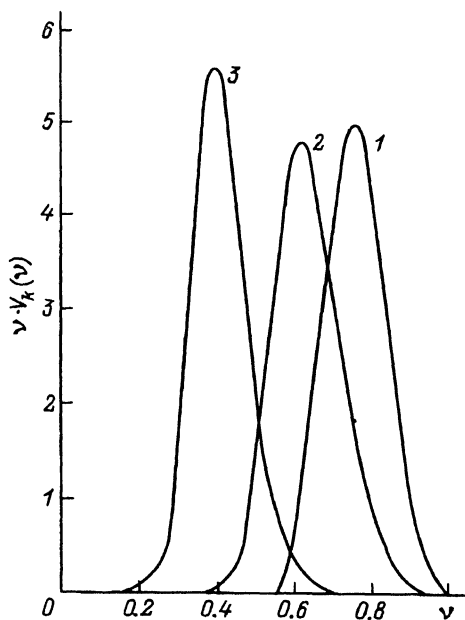


Рис. 2. То же, что и на рис. 1, $m_1/m_2 = 10$, $k = 3$ (1), 5 (2), 10 (3).

На рис. 1,2 представлены функции распределения частиц по скоростям $\nu V_k(\nu)$, рассчитанные по формуле (15) для разных соотношений масс быстрой частицы и атома мишени m_1/m_2 . При $m_1/m_2 = 2$ (рис. 1) с увеличением числа k испытанных быстрой частицей столкновений от 3 до 5 функция распределения быстрых частиц по скоростям сужается и смещается в область малых скоростей. При $m_1/m_2 = 10$ (рис. 2) прослеживается более сложная динамика изменения функции распределения быстрых частиц по скоростям с увеличением числа испытанных частицами столкновений. Изменение значения k от 3 до 5 приводит к расширению функции распределения (уменьшение максимума), исходного монокинетического спектра частиц $V_0(\nu) = \delta(\nu - 1)$ в результате упругих соударений. Изменение же значения k от 5 до 10 сопровождается сужением функции распределения, что связано с монотонным уменьшением скорости быстрых частиц при увеличении числа испытанных ими столкновений и в пределе при $k \rightarrow \infty$ "схлопыванием" функции распределения к функции $\delta(\nu)/\nu$ (напомним, что для любого значения k сохраняется $\int_0^1 \nu V_k(\nu) d\nu = 1$).

Полученное решение (15) определяет функцию распределения по скоростям быстрой частицы, испытавшей k столкновений, при произвольном соотношении масс сталкивающихся частиц. При большом

значении k расчет V_k по (15) затруднителен и представляется целесообразным получить приближенное выражение для функции $V_k(\nu)$. Согласно формуле (6), случайное значение скорости после столкновения определяется умножением скорости до столкновения на случайную величину. Таким образом, скорость частицы после k столкновений определяется произведением k независимых случайных величин. Согласно центральной предельной теореме [7], закон распределения суммы независимых случайных величин асимптотически стремится к нормальному с соответствующим образом определенными значениями математического ожидания и дисперсии. Для того чтобы воспользоваться центральной предельной теоремой, введем случайную величину t_i , связанную со скоростью частицы после i -го столкновения ν_i соотношением $t_i = \ln(\nu_i/\nu_{i-1})$. При этом случайное значение скорости после i -го столкновения определяется соотношением $\nu_i = \exp(\sum_{e=1}^i t_e)$. Согласно (6), выражение для случайной величины имеет следующий вид:

$$t = \ln \left[\sqrt{1 + 2 \frac{m_2}{m_1} \cos \chi + \left(\frac{m_2}{m_1} \right)^2} / \left(1 + \frac{m_2}{m_1} \right) \right]. \quad (16)$$

Среднее значение \bar{t} и дисперсия σ^2 случайной величины t определяется соотношениями

$$\bar{t} = \int_0^\pi t(\chi) p(\chi) d\chi,$$

$$\sigma^2 = \int_0^\pi (t(\chi) - \bar{t})^2 p(\chi) d\chi.$$

Для изотропного в системе центра масс рассеяния ($p(\chi) = \sin \chi/2$, $0 \leq \chi \leq \pi$) получаем

$$\bar{t} = -\frac{1}{2} \left[1 + \frac{(m_1 - m_2)^2}{2m_1 m_2} \ln \alpha \right],$$

$$\sigma^2 = \frac{1}{4} \left[1 - \frac{(m_1^2 - m_2^2)^2}{4m_1^2 m_2^2} \ln^2 \alpha \right]. \quad (17)$$

Согласно центральной предельной теореме [7], для плотности вероятности распределения $P_k(\nu)$ по скоростям быстрых частиц, испытавших k столкновений, получаем выражение, которое сходится к точному при $k \rightarrow \infty$,

$$P_k(\nu) = \frac{1}{\nu \sqrt{2\pi k \sigma^2}} \exp \left[-\frac{(\ln \nu - k\bar{t})^2}{2\sigma^2 k} \right]. \quad (18)$$

На рис. 3 проводится сравнение $P_k(\nu)$, рассчитанной по (18), с точным решением $\nu V_k(\nu)$, рассчитанным по (15) при $k = 5$ для $m_1/m_2 = 2$.

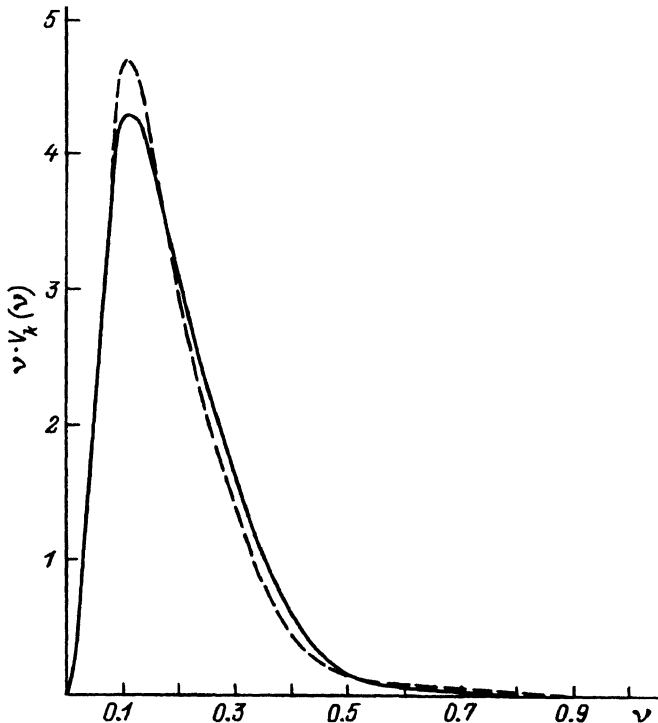


Рис. 3. То же, что и на рис. 1, $m_1/m_2, k = 5$.

Сплошная кривая — $\nu V_k(\nu)$, расчет по формуле (15); штриховая — $P_k(\nu)$, расчет по формуле (18).

Наблюдается удовлетворительное для оценочных расчетов согласие. Сравнение функций распределения, рассчитанных по (15) и (18) в широком диапазоне изменения параметров, показало, что при $k > 10$ приближенная функция распределения практически совпадает с точной для любого отношения m_1/m_2 .

Используем полученные результаты для описания трансформации функции распределения быстрых частиц по скоростям при прохождении плоскопараллельного слоя аморфного вещества. В данной работе ограничимся изучением движения частиц с явно выраженным “направленным вперед” характером рассеяния (случай $m_1 > m_2$). Мерой направленности рассеяния может служить усредненное значение косинуса угла рассеяния, который определяется соотношением

$$\mu_p = \int_0^{\pi} \cos \theta p(\chi) d\chi,$$

где $\cos \theta$ определяется формулой (7). Согласно [8], для μ_p справедливо следующее соотношение:

$$\mu_p = \begin{cases} 1 - \frac{1}{3} \left(\frac{m_2}{m_1} \right)^2, & m_1 > m_2, \\ \frac{2}{3} \left(\frac{m_1}{m_2} \right), & m_1 \leq m_2. \end{cases} \quad (19)$$

При $m_1 \gg m_2$ величина $\mu_p \rightarrow 1$ и для описания движения быстрых частиц в веществе можно использовать функцию рассеяния $g(\mu'; \mu) = \delta(\mu - \mu')$, предполагающую, что при столкновении направление движения быстрой частицы не изменяется. В этом случае решение $X_k(z, \mu)$ ищем в виде $X_k(z, \mu) = Z_k(z)\delta(\mu - 1)$. Из (5) для функции $Z_k(z)$ получаем рекуррентное соотношение

$$Z_k(z) = e^{-z} \int_0^z e^{z'} Z_{k-1}(z') dz',$$

$$Z_0(z) = e^{-z}. \quad (20)$$

Из рекуррентного соотношения (20) получаем выражение для функции $Z_k(z)$

$$Z_k(z) = \frac{z^k}{k!} e^{-z}, \quad k \geq 0. \quad (21)$$

Функция распределения тяжелых быстрых частиц в плоскопараллельном слое вещества ($0 \leq z \leq d$) имеет следующий вид:

$$f(z, \nu, \mu) = e^{-z} \delta(\nu - 1) \delta(\mu - 1) + \sum_{k=1}^{\infty} e^{-z} \frac{z^k}{k!} V_k(\nu) \delta(\mu - 1). \quad (22)$$

Здесь первое слагаемое описывает вклад в функцию распределения частиц, не испытавших столкновение. Второе слагаемое описывает частицы, испытавшие столкновения. Введем понятие функции быстрых частиц, испытавших столкновения, $F(z, \nu, \mu)$, определив ее следующим образом:

$$F(z, \nu, \mu) = f(z, \nu, \mu) - e^{-z} \delta(\nu - 1) \delta(\mu - 1). \quad (23a)$$

Функцию распределения по скоростям быстрых частиц, испытавших столкновения при прохождении слоя вещества $0 \leq z \leq d$, определим соотношением

$$F(\nu|d) = \frac{\int_{-1}^1 \nu \mu F(d, \nu, \mu) d\mu}{\int_0^1 d\nu \int_{-1}^1 \nu \mu F(d, \nu, \mu) d\mu}. \quad (23b)$$

Подставив в (23) функцию распределения (22), получим выражение для функции распределения по скоростям тяжелых быстрых частиц, испытавших столкновения при прохождении слоя вещества $0 \leq z \leq d$, следующего вида:

$$F(\nu|d) = \sum_{k=1}^{\infty} Z_k(d) \nu V_k(\nu) / (1 - e^{-d}). \quad (24)$$

Из рис. 4 видно, что функция распределения по скоростям имеет немонотонный характер и терпит разрыв при значении $\nu \approx 0.82$. Наличие данного разрыва является следствием δ -образности распределения по скоростям потока частиц, входящих в слой вещества при $z = 0$.

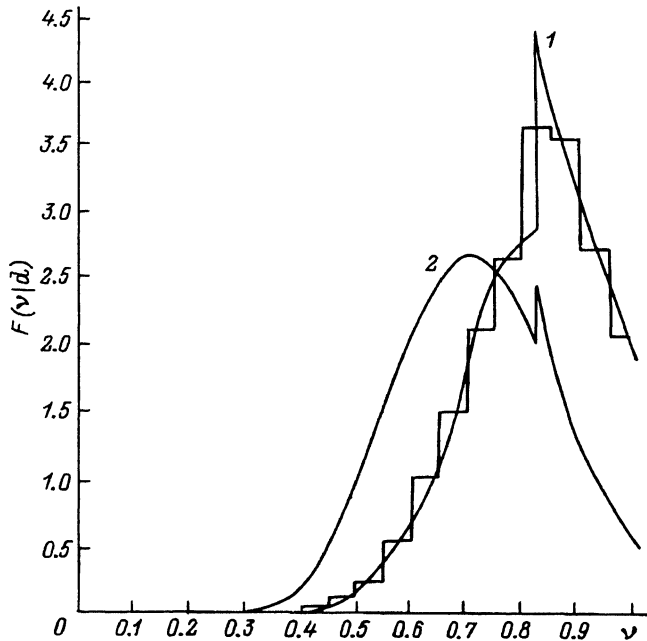


Рис. 4. Функция распределения по скоростям $F(v/d)$ при $m_1/m_2 = 10$, $d = 2$ (1), 4 (2).

Гистограмма — расчет методом Монте-Карло при $m_1/m_2 = 10$, $d = 2$, число испытаний 10^4 .

При этом (см. (15)) функция $V_1(v)$ описывается ступенчатой функцией локализованной в диапазоне скоростей $\alpha < v < 1$. Таким образом, разрыв функции распределения по скоростям при значении $v = \alpha$ (для $m_1/m_2 = 10$, $\alpha \approx 0.82$) обусловлен вкладом в $F(v/d)$ частиц, испытавших одно столкновение. С ростом толщины слоя удельный вклад частиц, испытавших одно столкновение, в формирование функции $F(v/d)$ падает и разрыв функции в точке $v = \alpha$ становится менее выраженным, что подтверждается сравнением кривых 1 и 2 на рис. 4. С ростом d происходит обогащение функции распределения в области низких скоростей и обеднение в области высоких.

Для проверки полученного аналитического решения были проведены расчеты методом Монте-Карло функции распределения по скоростям частиц, прошедших через слой вещества. Расчет проводился с использованием алгоритма из [4]. Изменение скорости и направления движения быстрой частицы при столкновении описывались формулами (6)–(8). Траектория частицы прослеживалась до момента выхода ее из слоя при выполнении одного из условий $\tilde{z} > d$ или $\tilde{z} < 0$. Здесь под \tilde{z} подразумевается значение координаты, при котором должно произойти очередное столкновение быстрой частицы.

Результаты расчета методом Монте-Карло функции распределения быстрых частиц по скоростям при значениях $m_1/m_2 = 10$, $d = 2$ представлены на рис. 4 гистограммой. Наблюдается хорошее согласие аналитического решения с расчетом по методу Монте-Карло.

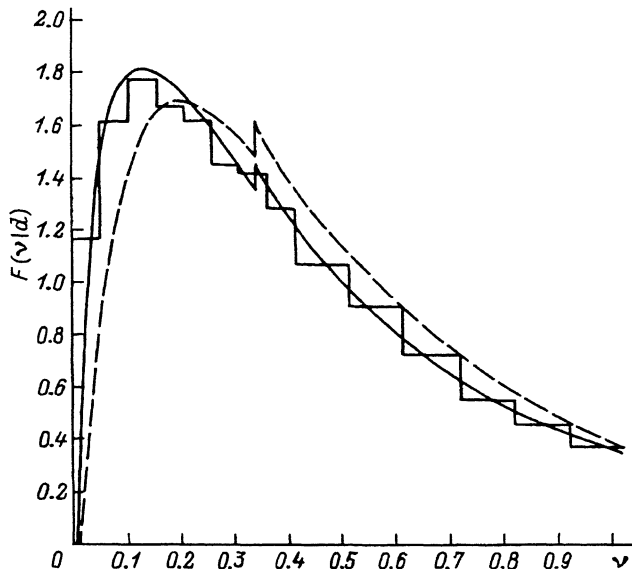


Рис. 5. Функция распределения по скоростям $F(v/d)$ при $m_1/m_2 = 2$, $d = 3$. Штриховая кривая — расчет по формуле (24), сплошная — по формуле (28), гистограмма — расчет методом Монте-Карло, число испытаний $2 \cdot 10^4$.

На рис. 5 проводится сравнение рассчитанной по (24) функции $F(v/d)$ (штриховая кривая) с результатами расчета методом Монте-Карло для $m_1/m_2 = 2$, $d = 3$. Видно, что данное аналитическое решение завышает значения функции распределения в области высоких и средних скоростей и занижает в области низких скоростей. Так как при $m_1/m_2 = 2$ значение $\mu_p \approx 0.92$, то траектория движения быстрой частицы заметно отклоняется от прямолинейной, что приводит к увеличению пути, который должна пройти частица для выхода из слоя. Для учета этого предлагается ввести функцию $g(\mu'; \mu)$, которая правильно описывает среднее значение смещения быстрой частицы между соударениями. Усредняя формулу (8) по случайным величинам χ и ψ , получаем связь между средним значением величины μ после столкновения — $\langle \mu \rangle$ и средним значением величины μ' до столкновения — $\langle \mu' \rangle$ в следующем виде

$$\langle \mu \rangle = \langle \mu' \rangle \mu_p. \quad (25)$$

Введем наиболее простую функцию рассеяния $g(\mu'; \mu) = \delta(\mu - \mu' \mu_p)$, которая удовлетворяет соотношению (25). Функция $X_k(z, \mu)$ при этом представляется в следующем виде

$$X_k(z, \mu) = Z_k(z) \delta(\mu - \mu_p^k). \quad (26)$$

Подставив (26) в (5), получаем рекуррентное соотношение для $Z_k(z)$

$$Z_k(z) = \frac{1}{\mu_p^k} e^{-z/\mu_p^k} \int_0^z e^{z'/\mu_p^k} Z_{k-1}(z') dz'$$

при $Z_0(z) = e^{-z}$. Для нахождения функции $Z_k(z)$ из данного рекуррентного соотношения применяется метод, использованный в работе [9]. Выражение для функции $Z_k(z)$ приведем без вывода

$$Z_k(z) = \sum_{i=0}^k (-1)^i \frac{\mu^{(i^2-i)/2}}{R_{k-i} R_i} \exp(-z/\mu_p^i), \quad (27)$$

где $R_0 = 1$, $R_k = \prod_{i=1}^k (1 - \mu_p^i)$ при $k \geq 1$.

Функция распределения по скоростям частиц, испытавших столкновения при прохождении слоя толщиной d , в этом случае имеет вид

$$F(\nu|d) = \sum_{k=1}^{\infty} \mu_p^k Z_k(d) \nu V_k(\nu) / (1 - e^{-d}). \quad (28)$$

Функция $F(\nu|d)$, рассчитанная по (28), представлена на рис. 5 сплошной кривой. Учет отклонения траектории движения быстрой частицы от прямолинейной приводит к хорошему согласию аналитического решения с результатами численного расчета.

В заключение перечислим основные результаты работы. Найдено решение кинетического уравнения в виде разложения по числу столкновений, испытанных быстрой частицей при движении в аморфном теле. Получено аналитическое выражение для функции распределения быстрых частиц при упругом характере взаимодействия с неподвижными атомами мишени в предположении изотропности рассеяния в системе центра масс. Проведено сравнение аналитических результатов с результатами численных расчетов методом Монте-Карло, показавшее справедливость принятых в работе допущений при $m_1/m_2 \geq 2$.

Список литературы

- [1] Куматов М.А., Комаров Ф.Ф. Энергетические потери и пробеги ионов в твердых телах. Минск, 1979. 320 с.
- [2] Калашников Н.П., Ремизович В.С., Рязанов М.И. Столкновения быстрых заряженных частиц в твердых телах. М.: Атомиздат, 1980. 272 с.
- [3] Марчук Г.И., Лебедев В.И. Численные методы в теории переноса нейтронов. М.: Атомиздат, 1971. 496 с.
- [4] Франк-Каменецкий А.Д. Моделирование траекторий нейтронов при расчете реакторов методом Монте-Карло. М.: Атомиздат, 1978. 96 с.
- [5] Худсон Д. Статистика для физиков М.: Мир, 1967. 244 с.
- [6] Бейтмен Г., Эрдейи А. Таблицы интегральных преобразований. Т. 1. М.: Наука, 1969. 344 с.
- [7] Агекян Т.А. Теория вероятностей для астрономов и физиков. М.: Наука, 1974. 264 с.
- [8] Westwood W.D. // J. Vac. Sci. Technol. 1978. Vol. 15. N 1. P. 1-9.
- [9] Кучинский В.В., Шейкин Е.Г. // Изв. вузов. Физика. 1987. N 8. С. 62-67.