

При $b=1.8$ выражение (2) с высокой степенью точности аппроксимируется формулой

$$r(u_p, aE_c^{-0.2}) = aE_c^{-0.2} \exp \left\{ aE_c^{-0.2} \frac{1-u_p}{5u_p} \right\} \frac{u_p-1}{1.25u_p+0.83} \quad (3)$$

В интересующем нас диапазоне u_p и $aE_c^{-0.2}$ экспоненциальный множитель в выражении (3) может быть опущен без существенной потери точности. После подстановки в (3) зависимости $a=0.14Z^{0.5}$ и округления коэффициентов до целочисленных значений получаем окончательную формулу для фактора обратного рассеяния:

$$r = \frac{Z^{0.5}}{10E_c^{0.2}} \frac{u_p-1}{u_p+1} \quad (4)$$

Результаты расчетов по формуле (4) приведены на рисунке ($[E_c]=\text{кэВ}$). Наблюдается согласие со всем набором экспериментальных данных [5] (а не только для случаев $u_p=2$ и 5, приведенных на рисунке) с точностью до ошибки измерений.

Таким образом, в настоящей работе найдена простая и точная формула для расчета фактора обратного рассеяния в однокомпонентных объектах при нормальном падении первичного пучка (основное преимущество связано с тем, что в предлагаемой модели удалось получить существенно нерегулярный ход зависимости $r(Z)$, который обеспечен наличием в выражении (4) переменной E_c). Дальнейшее развитие модельных представлений с учетом экспериментальных данных, очевидно, позволит получать полуэмпирические выражения для более сложных физических ситуаций.

Список литературы

- [1] Брытов И. А., Иванов В. Ш., Кораблев В. В. Аппаратура и методы рентгеновского анализа. Л.: Машиностроение, 1988. С. 3—24.
- [2] Shimizu R. // Jap. J. Appl. Phys. 1983. Vol. 22. N 11. P. 1631—1642.
- [3] Jablonski A. // Surf. Sci. 1978. Vol. 74. N 3. P. 621—635.
- [4] Бронштейн И. М., Фрайман Б. С. Вторичная электронная эмиссия. М.: Наука, 1969. 407 с.
- [5] Smith D. M., Gallon T. E. // J. Phys. D. 1974. Vol. 7. P. 151—161.

Поступило в Редакцию
26 января 1990 г.

МНОГОКРАТНОЕ РАССЕЯНИЕ БЫСТРЫХ ЗАРЯЖЕННЫХ ЧАСТИЦ, ДВИЖУЩИХСЯ В КРИСТАЛЛЕ ВБЛИЗИ КРИСТАЛЛОГРАФИЧЕСКОЙ ОСИ

А. А. Гринченко, Н. Н. Насонов, В. Д. Цуканов

Кинетика потока быстрых заряженных частиц, движущихся в кристалле под малым углом $\psi \geq \psi_c$ к одной из главных кристаллографических осей (ψ_c — критический угол каналирования), резко отличается от кинетики в двух предельных случаях $\psi=0$ и $\psi \geq R/a \gg \psi_c$ (a — расстояние между атомами в цепочке, R — радиус электронной экранировки атома). Указанное обстоятельство связано с наличием когерентного азимутального рассеяния частиц в плоскости, ортогональной оси [1, 2] (это рассеяние обусловлено действием усредненного вдоль оси потенциала атомных цепочек кристалла). В случае $\psi=0$ азимутальное рассеяние не проявляется вследствие симметрии, а в случае сильной разориентации кристалла ($\psi \geq R/a$) когерентное рассеяние становится малым по сравнению с обычным некогерентным рассеянием на флуктуациях потенциала кристалла.

До настоящего времени когерентное азимутальное и некогерентное рассеяния исследовались раздельно. Между тем одновременный учет обоих видов рассеяния необходим

для корректного описания наблюдающихся в эксперименте кольцевых распределений рассеянных кристаллом частиц [3] и эффекте «увлечения» осью излучения релятивистских частиц в кристалле [4, 5]. Решению указанной задачи и посвящена настоящая работа.

Будем исходить из уравнения Лиувилля для ансамбля быстрых частиц, движущихся в потенциальном поле, создаваемом совокупностью атомов, составляющих кристаллическую решетку,

$$\frac{\partial}{\partial t} D(t, \mathbf{r}, \mathbf{p}, \mathbf{R}_\perp, \mathbf{u}) + \{D, H\} = 0,$$

$$H = \sqrt{p^2 + m^2} + e \sum_l \sum_q \varphi_A(\mathbf{r} - \mathbf{R}_{\perp l} - \mathbf{e}_z q a - \mathbf{u}_{lq}), \quad (1)$$

где φ_A — атомный потенциал, $\mathbf{R}_{\perp l}$ — координаты l -й атомной цепочки, \mathbf{u}_{lq} — тепловое смещение q -го атома в l -й цепочке.

В рассматриваемом случае $\Psi^2 \gg \Psi_0^2$, когда кинетическая энергия поперечного движения частиц существенно превышает усредненный потенциал атомной цепочки, уравнение для функции распределения

$$f(t, \mathbf{r}, \mathbf{p}) = \left\langle \int \prod_{l=1}^{N_\perp} \frac{d^2 R_{\perp l}}{v_\perp} D \right\rangle_{\mathbf{u}}$$

($N_\perp/v_\perp = n_\perp$ — плотность атомных цепочек, скобки $\langle \dots \rangle_{\mathbf{u}}$ означают усреднение по тепловым колебаниям атомов) можно получить из (1), используя изложенную в [6] методику разложения по взаимодействию. Имеем

$$\begin{aligned} \frac{\partial f}{\partial t} + v \frac{\partial f}{\partial r} = n_\perp \left\langle \int d^2 R_\perp \hat{L} \left\{ f + \int_{-\infty}^0 d\tau \hat{S}_\perp(\tau) \hat{L} [\hat{S}_\perp(-\tau) f] \right\} \right\rangle_{\mathbf{u}}, \\ \hat{L} = e \sum_q \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} \varphi_A(\mathbf{r} - \mathbf{R}_\perp - \mathbf{e}_z q a - \mathbf{u}_q) \frac{\partial}{\partial \mathbf{p}}, \quad \hat{S}_\perp(\tau) = e^{\tau v \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}}}. \end{aligned} \quad (2)$$

После необходимых вычислений уравнение (2) преобразуется (в стационарном случае) к виду

$$\begin{aligned} \frac{\mathbf{p}}{\varepsilon^2} \frac{\partial f}{\partial \mathbf{r}} = \chi^{\text{coh}} \sum_{i,j=1}^2 \frac{\partial}{\partial p_{\perp i}} \left[\frac{1}{p_\perp} \left(\delta_{ij} - \frac{p_{\perp i} p_{\perp j}}{p_\perp^2} \right) \frac{\partial f}{\partial p_{\perp i}} \right] + \\ + \chi^{\text{inc}} \sum_{i,j=1}^3 \frac{\partial}{\partial p_i} \left[\frac{1}{p} \left(\delta_{ij} - \frac{p_i p_j}{p^2} \right) \frac{\partial f}{\partial p_j} \right], \\ \chi^{\text{coh}} = 2e^2 n_\perp \frac{(2\pi)^5}{a^2} \int_0^\infty dk_\perp k_\perp^2 |\varphi_{\perp 1k_\perp}|^2 e^{-k_\perp^2 u_T^2}, \\ \chi^{\text{inc}} = e^2 n_\perp \frac{(2\pi)^5}{2a} \int_0^{k_0} dk k^3 |\varphi_{\perp 1k}|^2 \left(1 - e^{-k^2 u_T^2} \right), \end{aligned} \quad (3)$$

где u_T — среднеквадратичная амплитуда тепловых колебаний атомов, $\varphi_{\perp 1k}$ — фурье-образ атомного потенциала, $k_0 \sim R_{\text{яд}}^{-1}$, $R_{\text{яд}}$ — радиус ядра атома.

При $\chi^{\text{inc}} = 0$ уравнение (3) переходит в соответствующее уравнение теории когерентного азимутального рассеяния [2], а при $\chi^{\text{coh}} = 0$ — в обычное уравнение многократного рассеяния в аморфной среде с модифицированным вследствие периодичности кристалла коэффициентом диффузии (множитель $1 - e^{-k^2 u_T^2}$ в χ^{inc}). В этом легко убедиться с помощью замены переменных $p_x + ip_y = p \sin \psi e^{i\alpha}$. При этом в одномерном случае уравнение (3) принимает вид

$$\cos \psi \cdot \frac{\partial f}{\partial z} = \frac{\varepsilon^2}{p^4} \left\{ \chi^{\text{coh}} \frac{\partial^2 f}{\partial \lambda^2} + \chi^{\text{inc}} \left(\frac{\partial^2 f}{\partial \psi^2} + \cot \psi \frac{\partial f}{\partial \psi} + \frac{1}{\sin^2 \psi} \cdot \frac{\partial^2 f}{\partial \lambda^2} \right) \right\}. \quad (4)$$

Требуется найти решение уравнения (4) (следует учесть, что на практике всегда $\psi \ll 1$), удовлетворяющее граничному условию $f(0, \chi, \psi) = \delta(\chi) \delta(\psi - \psi_i) (1/\psi_i)$. Полагая $f = \sum_m f_m(z, \psi) e^{im\chi}$, получаем из (4) уравнения для коэффициентов f_m

$$4 \frac{\partial f_m}{\partial \tau} = \frac{\partial^2 f_m}{\partial v^2} + \frac{1}{v} \frac{\partial f_m}{\partial v} - m^2 \left(\frac{N}{v^3} + \frac{1}{v^2} \right) f_m, \quad (5)$$

где

$$\psi = \psi_i v, \quad z = \frac{p^4 \psi_i^2 \tau}{4 \epsilon^2 \chi \sin \epsilon}, \quad N = \frac{\chi \cos \epsilon}{\psi_i \chi \sin \epsilon},$$

используя простейшую аппроксимацию атомного потенциала $\varphi_A = (Ze/r) e^{-r/R}$, нетрудно убедиться, что коэффициент N имеет величину порядка $R/(a\psi_i)$, показывающую количество атомов цепочки, вносящих когерентный вклад в рассеяние [2].

Решение уравнения (5) при $m=0$ имеет вид

$$f_0(\tau, v) = \frac{1}{\pi \psi_i^2 \tau} \cdot e^{-\frac{1+v^2}{\tau}} I_0\left(\frac{2v}{\tau}\right), \quad (6)$$

а при $m \neq 0$ не выражается через известные функции.

Найдем приближенное решение (5) в представляющем наибольший интерес случае преобладания когерентного рассеяния $N \gg 1$, когда убывание функций f_m при $m \neq 0$ происходит значительно быстрее, чем расщепление по v . Полагая приближенно

$$\frac{m^2 N}{v^3} + \frac{m^2 - \frac{1}{4}}{v^2} \approx \frac{p_m^2 - \frac{1}{4}}{\left(v - \frac{1}{3}\right)^2}, \quad p_m = \frac{2}{3} m \sqrt{N} \gg 1$$

(приведенная аппроксимация обладает достаточной точностью в окрестности $v \approx 1$), получаем из (5)

$$f_m(\tau, v) = \frac{\sqrt{\frac{2}{3} \left(1 - \frac{1}{3v}\right)}}{\pi \psi_i^2 \tau} e^{-\frac{\frac{4}{9} + \left(v - \frac{1}{3}\right)^2}{\tau}} I_{p_m} \left(\frac{\frac{4}{3} v - \frac{1}{3}}{\tau} \right). \quad (7)$$

Решение (7) формально справедливо при $(\Delta v)^2 \sim \tau \ll 1$. Используя равномерные по аргументу асимптотические разложения модифицированных функций Бесселя с большим индексом, нетрудно показать, что в области $\tau < p_m^{-1}$ формулы (6) и (7) дают $f_0 = f_m = (2\pi^{3/2} \psi_i^2 \sqrt{\tau v})^{-1} e^{-((v-1)^2/\tau)}$, а в области $\tau \gg p_m^{-1}$ имеем оценку $f_m/f_0 \sim (p_m \tau)^{-p_m} \ll 1$.

Формулы (6) и (7) полностью решают поставленную задачу, что позволяет корректно описать различные процессы взаимодействия быстрых заряженных частиц с ориентированными кристаллами.

Список литературы

- [1] Белошицкий В. В., Кумахов М. А. // ФТТ. 1973. Т. 15. С. 1588—1592.
- [2] Шульга Н. Ф., Трутень В. И., Фомин С. П. Препринт ХФТИ. № 11. Харьков, 1982. 28 с.
- [3] Гришаев И. А., Морозовский В. Л., Шраменко Б. И. // Тр. V Всесоюз. совещания по физике взаимодействия заряженных частиц с кристаллами. М., 1974. С. 282—285.
- [4] Алейник А. Н., Воробьев С. А., Калинин Б. Н. и др. // ЖТФ. 1986. Т. 56. Вып. 7. С. 1416—1418.
- [5] Антипенко А. П., Блажевич С. В., Бочек Г. Л. и др. // Тез. докл. XIX Всесоюз. совещания по физике взаимодействия заряженных частиц с кристаллами. М., 1989. С. 108.
- [6] Ахиезер А. П., Пелетминский С. В. Методы статистической физики. М.: Наука, 1977. 365 с.

Харьковский физико-технический институт
АН УССР

Поступило в Редакцию
17 ноября 1989 г.