Вестник
МОСКОВСКОГО УНИВЕРСИТЕТА
№ 6 — 1967

УДК 539.2.01 : 548 : 539.125.4

Г. М. ФИЛИППОВ

К РАССЕЯНИЮ ЧАСТИЦ В КРИСТАЛЛЕ

Делается попытка развить теорию эффекта Тулинова на основе кинетического уравнения для рассеиваемых кристаллом частиц. В приближении слабого взаимодействия пучка частиц с кристаллом получено принципиальное согласие теории и эксперимента. Теория позволила учесть влияние температуры кристалла и оценить ширину линий и пятен. Полученная ширина много меньше экспериментальной, что, по-видимому, связано с неприменимостью в полной мере приближения слабого взаимодействия для тех экспериментов, которые были поставлены. Полученная оценка ширины линий справедлива в области гораздо больших энергий частиц и температур.

В работах [1, 2, 3] А. Ф. Тулиновым и его сотрудниками были описаны эксперименты по рассеянию протонов с энергиями ~ 1 *Мэв* на кристалле. Там не были приведены теоретические оценки эффекта с точки зрения теории многократного рассеяния. В настоящей статье делается попытка описать это явление с точки зрения кинетического уравнения для частиц, рассеиваемых в периодическом поле кристалла, и учесть влияние температуры. Преимущество этого метода заключается в том, что учитывается влияние всех ядер решетки на поведение рассеиваемых частиц.

Предположим, что частицы вылетают из ядра, расположенного в начале координат, и испытывают затем слабое взаимодействие с решеткой (критерии слабости будут даны ниже). Представим кристалл в виде бесконечной пластинки, ограниченной плоскостями $z=a$ и $z=b$. Скорости вылетающих частиц будем характеризовать функцией распределения $V(v)$, конкретный вид которой пока не существен. Потенциал решетки запишем в виде

$$U(\vec{r}, t) = \sum_{\vec{n}} U_{\vec{n}} [\vec{r} - \vec{a}_{\vec{n}} - \sum_{\vec{f}} \vec{u}_{\vec{f}} \sin(\vec{f}\vec{a}_{\vec{n}} - \omega_{\vec{f}} t + \delta_{\vec{f}})],$$

где суммирование в первой сумме производится по всем узлам решетки суммирование во второй сумме производится по всем колебаниям решетки, $\vec{a}_{\vec{n}}$ — радиус-вектор $\vec{n}$-го узла решетки:

$$\bar{a}_{\bar{n}} = n_x \bar{a}_x + n_y \bar{a}_y + n_z \bar{a}_z;$$

$$n_x, n_y | = 0, \pm 1, \pm 2, \ldots;$$

$$n_z = n_+, n_+ - 1, \ldots, 0, -1, \ldots, -n_-;$$

$\vec{f}$ — волновой вектор колебания, $\omega_{\bar f}$ — его частота, $\bar u_{\bar f}$ — его амплитуда, $U_{\bar n}(\bar r)$ — потенциал, создаваемый ядром, находящимся в $\vec{n}$ — μ узле решетки. В дальнейшем все ядра решетки предполагаются одинаковыми. Удобнее представить потенциал в виде

$$U=\sum_{\bar n}\int d\bar k\, U_{0\bar k}\, e^{i\bar k(\bar r-\bar a_{\bar n})}\prod_{\bar f}\sum_{j=-\infty}^{\infty} I_j(\bar k\,\bar u_{\bar f})\, e^{-ij(\bar f\bar a_{\bar n}-\omega_{\bar f}t+\delta_{\bar f})}, \tag{1}$$

где

$$U_{0\bar k}=\frac{1}{(2\pi)^3}\int U_{\bar 0}(\bar r)\, e^{-i\bar k\bar r}\, d\bar r.$$

Кинетическое уравнение для частиц имеет вид (см. [4])

$$\frac{\partial f}{\partial t}+\bar v\nabla f-\frac{1}{m}\nabla_{\bar r}U\nabla_{\bar v}f=V(\bar v)\,\delta\left[\bar r-\sum_{\bar f}\bar u_{\bar f}\sin(\delta_{\bar f}-\omega_{\bar f}t)\right]. \tag{2}$$

Решение задачи без учета колебаний решетки. Полагая в (2) $\bar u_{\bar f}=0$, ищем решение в виде

$$f=f_0+\varphi,\quad \varphi\ll f_0,$$

причем f_0 удовлетворяет уравнению (2) без потенциала.

Имеем

$$f_0=V(\bar v)\int_0^t\delta\left[\bar r-\bar v(t-t')\right]dt'.$$

Уравнение для φ имеет вид

$$\frac{\partial\varphi}{\partial t}+\bar v\nabla_{\bar r}\varphi=\frac{1}{m}\nabla_{\bar r}U\nabla_{\bar v}f_0. \tag{3}$$

Из (3) нетрудно получить

$$\bar I=\frac{1}{m}\int_0^t\frac{dt''}{(t-t'')^3}\int_{t''}^{t''+\frac{a}{z}(t-t'')}dt'\left\{\bar r\,\frac{t-t'}{t-t''}\,\nabla_{\bar r}\left[\nabla U\left(\bar r\,\frac{t'-t''}{t-t''}\right)V\left(\frac{\bar r}{t-t''}\right)\right]-\right.$$

$$\left.-V\left(\frac{\bar r}{t-t''}\right)\nabla_{\bar r}U\left(\bar r\,\frac{t'-t''}{t-t''}\right)\right\}, \tag{4}$$

где значок ∇ означает дифференцирование по аргументу $\bar r\,\dfrac{t'-t''}{t-t''}$.

Формула (4) определяет добавку к потоку частиц в данной точке, происходящую из-за наличия потенциала. Основная часть потока создается за счет f_0 и равняется

$$\bar I_0=\bar r\int_0^t V\left(\frac{\bar r}{t-t'}\right)\frac{dt'}{(t-t')^4}.$$

Произведем в (4) интегрирование по t, k_x, k_y. Например:

$$\int\limits_{t''}^{t''+\frac{a}{z}(t-t'')} (t-t')\nabla U\left(\bar{r}\frac{t'-t''}{t-t''}\right)dt' = i\frac{(2\pi)^2}{a_x a_y}(t-t'')^2 \sum_{n_x n_y}\int dk_z \bar{k} U_{0\bar{k}} \times$$

$$\times\left[\left(\frac{1-\frac{a}{z}}{ik\bar{r}} - \frac{1}{(\bar{k}\bar{r})^2}\right)e^{i\bar{k}\bar{r}\frac{a}{z}} - \frac{1}{i\bar{k}\bar{r}} + \frac{1}{(\bar{k}\bar{r})^2}\right]\sum_{n_z=-n_-}^{n_+} e^{-in_z k_z a_z}, \qquad (5)$$

где $k_x = n_x b_x$, $k_y = n_y b_y$. В выражении (5) точки полюсов $k_z = -\frac{1}{z}(n_x b_x x + n_y b_y y)$ следует считать имеющими сколь угодно малую положительную мнимую часть, что соответствует введению малого затухания. Это условие аналогично условию причинности или условию излучения в случае волнового уравнения.

Не будем учитывать полюса функции $U_{0\bar{k}}$, если таковые имеются. Учет их, например, для потенциала $U_0 = Ze^2 e^{-r/r_0}/r$, где z — заряд ядра, $r_0 \sim 10^{-10}$ *см* — радиус экранировки, привел бы к малым добавочным членам. Кроме того, будем считать $n_f \gg 1$, $a \ll z$. Пренебрегая малыми членами, получим

$$\bar{I} \cong -\frac{(2\pi)^3 a_z}{m a_x a_y}\frac{\bar{r}}{z^2}\int\limits_0^t V\left(\frac{\bar{r}}{t-t'}\right)\frac{dt'}{(t-t')^2}\sum_{n_x n_y} k_n^2 U_{0\bar{k}_n}\sum_{n_z=1}^{n_+} n_z e^{-in_z k_z a_z} +$$

$$+\frac{(2\pi)^3}{m a_x a_y}\frac{\bar{r}}{z}\int\limits_0^t \nabla_{\bar{r}} V\left(\frac{\bar{r}}{t-t'}\right)\frac{dt'}{(t-t')^2}\sum_{n_x n_y}\bar{k}_n U_{0\bar{k}_n}\sum_{n_z=1}^{n_+} i e^{-in_z k_z a_z}, \qquad (6)$$

где $\bar{k}_n = \left\{n_x b_x;\ n_y b_y;\ -\frac{1}{z}(n_x b_x x + n_y b_y y)\right\}$; b_x, b_y, b_z — периоды обратной решетки. Суммы по n_z, входящие в (6), имеют резонансный характер. Они принимают максимальное значение при выполнении условий

$$\bar{b}_{p\bar{m}}\bar{r} = 0; \quad p = \pm 1, \pm 2, \ldots \qquad (7)$$

где считается, что числа m_x, m_y, m_z не имеют общего делителя, отличного от ± 1. Условие (7) представляет собой уравнение плоскости, проходящей через начало координат и перпендикулярной вектору $\bar{b}_{\bar{m}}$. В направлениях, удовлетворяющих (7), кристаллическая решетка максимально сильно воздействует на поток частиц. Совокупность всех этих направлений совпадает с совокупностью всех кристаллических плоскостей, проходящих через начало координат. В этом теория полностью согласуется с экспериментом. Резонансное значение добавочного потока, отвечающего $\bar{m}$-й плоскости (7), равно

$$\bar{I}_{\bar{m}} \cong -\frac{(2\pi)^3 a_z}{m a_x a_y}\frac{\bar{r}}{z^2}\int\limits_0^t V\left(\frac{\bar{r}}{t-t'}\right)\frac{dt'}{(t-t')^2} b_{\bar{m}}^2 \frac{n_+^2}{2}\sum_p p^2 U_{0(p\bar{b}_{\bar{m}})}, \qquad (8)$$

По линии пересечения двух плоскостей $\overline{m}$ и $\overline{m'}$ образуется пятно. Его глубина больше, чем арифметическая сумма глубин двух плоскостей, и равняется

$$-\frac{(2\pi)^3 a_z}{m a_x a_y}\frac{\overline{r}}{z^2}\int_0^t V\left(\frac{\overline{r}}{t-t'}\right)\frac{dt'}{(t-t')^2}\frac{n_+^2}{2}\sum_{p,q}(p\overline{b}_{\overline{m}}+q\overline{b}_{\overline{m}'})^2 U_{0(p\overline{b}_{\overline{m}}+q\overline{b}_{\overline{m}'})}. \quad (9)$$

Угловая ширина пятен и линий определяется поведением сумм по n_z в формуле (6) и свойствами потенциала. Заметим, что для потенциалов кулоновского и экранированного кулоновского эта ширина оказывается ничтожно малой.

Установим критерий применимости сделанного приближения. Разберем частный случай:

$$V(\overline{v}) = A\delta(|\overline{v}|-u); \quad A = \text{const}. \quad (10)$$

Приближение справедливо, если $|\overline{I}| \ll |\overline{I}_0|$. Это дает

$$\frac{mu^2}{2} \gg \frac{(2\pi)^3 a_z}{4 a_x a_y} n_+^2 b_m^2 \sum p^2 U_{0(p\overline{b}_{\overline{m}})}. \quad (11)$$

Условие (11) накладывает ограничение снизу на энергию частиц. Оно теряет смысл для потенциалов кулоновского и экранированного кулоновского, поскольку в этих случаях сумма по p, стоящая справа, расходится. Расходимость обусловлена особенностью в нуле, присущей двум этим видам потенциала.

Р е ш е н и е з а д а ч и с у ч е т о м т е п л о в ы х к о л е б а н и й. Глубина линий и пятен будет определяться стационарной частью потока $\overline{I}$. Поэтому везде ниже нас будет интересовать именно стационарная часть, для которой мы сохраняем то же обозначение $\overline{I}$. Весь расчет будет производиться для случая (10).

Пронумеруем все колебания решетки: $\overline{f}_1, \overline{f}_2, \ldots, \overline{f}_N$. Уравнение (2) после усреднения по времени и по фазам колебаний дает

$$\overline{J} \cong \frac{\vec{r}}{rz} A \frac{(2\pi)^3}{m a_x a_y}\sum_{n_x n_y}\sum_{j_{\overline{f}_1}\ldots j_{\overline{f}_N}}\prod_{\alpha=1}^{N} J^2_{j_{\overline{f}_\alpha}}(\overline{k}_\varepsilon \overline{u}_{f_\alpha}) U_{0k_\varepsilon} \times$$

$$\times\left\{\frac{a_z}{z}k_\varepsilon^2\sum_{n_z=1}^{n_+} n_z e^{i n_z a_z\left(k_{z\varepsilon}+\sum_{\alpha=1}^{N} j_{\overline{f}_\alpha} f_{z\alpha}\right)} - \right.$$

$$\left. - \frac{\overline{r}\,\overline{k}_\varepsilon}{r^2}\sum_{n_z=1}^{n_+} i e^{-i n_z a_z\left(k_{z\varepsilon}+\sum_{\alpha=1}^{N} j_{\overline{f}_\alpha} f_{z\alpha}\right)}\right\}. \quad (12)$$

где

$$\overline{k}_\varepsilon = \left\{n_x b_x - \sum_{\alpha=1}^{N} j_{\overline{f}_\alpha} f_{x\alpha},\quad n_y b_y - \sum_{\alpha=1}^{N} j_{\overline{f}_\alpha} f_{y\alpha},\right.$$

$$\left. -\frac{1}{z}\left[n_x b_x + n_y b_y y + n_y b_y y - \sum_{\alpha=1}^{N} j_{\overline{f}_\alpha}\left(f_{x\alpha}x + f_{y\alpha}y - \frac{r}{u}\omega_{\overline{f}_a}\right)\right]\right\}.$$

Пренебрегая малыми членами, получим из (12)

$$\bar{J} \cong -A \frac{\bar{r}}{rz^2} \frac{(2\pi)^3 a_z}{m a_x a_y} \sum_{n_x n_y} k_n^2 U_{0\bar{k}_n} \sum_{n_z=1}^{n_+} n_z \times$$

$$\times \exp \left\{ i n_z \frac{a_z}{z} (u_x b_x x + n_y b_y y) - w_0 + w(n_z) \right\}, \qquad (13)$$

где

$$w_0 = \frac{1}{2} \sum_{\bar{f}} (\bar{k}_n \bar{u}_{\bar{f}})^2,$$

$$w_0(n_z) = \frac{1}{2} \sum_{\bar{f}} (\bar{k}_n \bar{u}_{\bar{f}})^2 \cos\left(\frac{a_z}{z} n_z \bar{f} \bar{r}\right).$$

Показатель фактора Дебая-Уоллера w_0 характеризует зависимость величины эффекта от температуры (см., например, [5]). Член $w(n_z)$ представляет малую добавку к w_0.

Производя суммирование в рамках дебаевской модели, для $w(n_z)$ имеем

$$w(n_z) = \frac{3}{4} \frac{z}{r} \frac{\hbar c k_n^2}{n_z a_s \omega_0 \mu} \int_0^{\omega_0} \left(\frac{1}{2} + \frac{1}{e^{\hbar\omega/kT} - 1}\right) \sin\left(n_z a_z \frac{\omega r}{cr}\right) d\omega,$$

где ω_0 — дебаевская частота, μ — масса ядра, c — скорость звука. Оценим интенсивность линий, исходя из (13) и пренебрегая $w(n_z)$. В случае экранированного кулоновского потенциала для линии, центр которой удовлетворяет условию $b_{\bar{m}} \bar{r} = 0$, имеем

$$\bar{J} \cong -A \frac{\bar{r}}{rz^2} \frac{2\pi a_z}{m a_x a_y} b_{\bar{m}}^2 Z e^2 r_0^2 \sqrt{\frac{\pi}{w_0^3}} \times$$

$$\times \left\{ n_+^2 e^{-\frac{n_+^2 a_z^2 b_{\bar{m}}^2}{4w_0} \vartheta^2} - \frac{2w_0}{a_z^2 b_{\bar{m}}^2 \vartheta^2} \left(1 - e^{-\frac{n_+^2 a_z^2 b_{\bar{m}}^2}{4w_0} \vartheta^2}\right) \right\}, \qquad (14)$$

где ϑ — угол отклонения от центра линии. Ширина линии, как видно из (14), имеет порядок $\vartheta \sim \frac{2\sqrt{w_0}}{n_+ a_z b_m}$. При некотором $\vartheta \sim \frac{\sqrt{w_0}}{n_+ a_z b_{\bar{m}}}$ J обращается в нуль, а затем становится положительным. Это означает, что темная линия с обеих сторон окаймляется светлыми, но более слабыми линиями, наблюдается экспериментально.

Итак, теория согласуется с экспериментом.

1. Наличие линий и пятен — следов кристаллографических плоскостей решетки.

2. При повышении температуры глубины пятен и линий уменьшается (вследствие роста w_0).

3. По краям темных участков пятен и линий имеются светлые участки.

Но данная теория противоречит эксперименту.

1. Теоретическая оценка ширины линий и пятен много меньше экспериментальной.

2. Теоретически ширина линий и пятен должна возрастать с ростом температуры, в то время как в эксперименте она уменьшается.

Эти недостатки теории связаны, по-видимому, с неприменимостью нашего приближения для тех экспериментов, которые были поставлены, что выражается также и в том, что экспериментальные значения глубин линий и пятен гораздо больше, чем это допустимо с точки зрения производимого здесь приближения.

Те расходимости, которые имелись в отсутствие колебаний в формуле (11), пропадают при учете колебаний, равно как и прочие принципиальные трудности, связанные с сингулярностями потенциалов.

В заключение выражаю искреннюю благодарность проф. А. А. Власову за предложенную тему и ценные советы.

ЛИТЕРАТУРА

1. Тулинов А. Ф., Иферов Г. А., Куликаускас В. С., Ахметова Б. Г. Письма ЖЭТФ, 3, 1965.
2. Tulinov A. F., Kulikauskas V. S., Malov M. M. Phys., Lett., 18(3), 304, 1965.
3. Тулинов А. Ф. «Успехи физич. наук», 87, вып. 4, 585, 1965.
4. Власов А. А. Статистические функции распределения. М., «Наука», 1966.
5. Займан Дж. Принципы теории твердого тела. М., «Мир», 1966.

Поступила в редакцию
14. 11 1966 г.

НИИЯФ