



УДК 539.101

Д. Е. СВЕТОГОРОВ

К КВАНТОВОЙ ТЕОРИИ ЭФФЕКТА «ТЕНЕЙ» ПРИ РАССЕЯНИИ β -ЧАСТИЦ И НЕЙТРОНОВ

Рассмотрено в борновском приближении рассеяние сферически расходящихся пучков быстрых частиц на внешнем потенциале, создаваемым кристаллической решеткой. Получено выражение для плотности выхода частиц, которое используется для интерпретации эффекта «теней» при рассеянии β -частиц. Выясняется возможность наблюдения аналогичного эффекта при рассеянии нейтронов на ядрах решетки.

Эффектом «теней» или «блокировки» называют явление анизотропного выхода расходящегося пучка частиц из тонкого слоя монокристалла (см. обзоры [1—3]). Большинство экспериментов проводились с использованием протонов или легких ионов, однако имеется ряд работ по рассеянию β -частиц [4—5].

Первое качественное и количественное обсуждение этого явления было сделано самими экспериментаторами [1—3, 6]. Некоторые вопросы затронуты в работах по теории «каналирования» [1—3]. Рассеяние пучков расходящихся частиц на основе кинетического уравнения рассмотрено в курсе лекций профессора А. А. Власова, прочитанном в 1967—1968 гг. на физическом факультете МГУ, и в работе Филиппова [7]. В указанных работах в основном использовались уравнения движения классической механики.

Ниже будут проанализированы волновые явления, которые могут проявляться в эффекте «теней». При этом существенным является то, что состояние пучка рассеивающихся частиц должно описываться не плоской волной, а сферически расходящимися волнами с центрами в узлах кристаллической решетки.

Ограничимся в этой работе анализом борновского приближения, которое при энергиях, характерных для экспериментов по эффекту «теней», может быть использовано для описания рассеяния β -частиц и нейтронов. При рассеянии протонов или легких ионов условия применимости борновского приближения не выполняются.

§ 1. Основные предположения

При рассеянии сферически расходящихся волн на атомах, расположенных на конечном расстоянии от источника, особую роль играет интерференция между падающей и рассеянной волнами. В результате

образуется «квантовая тень», угловая ширина которой в отличие от случая рассеяния плоских волн может иметь величину, наблюдаемую экспериментально.

В образовании «квантовой тени» участвует когерентно рассеянная часть волны. Основной вклад в когерентную часть дают упруго рассеянные частицы. Рассеяние по неупругим каналам эквивалентно формальному поглощению и может быть учтено феноменологически добавлением к потенциалу соответствующей мнимой части [8].

Потенциал взаимодействия между отдельным узлом и летящей частицей будем считать достаточно короткодействующим, так чтобы эффективный радиус действия был значительно меньше характерного рассеяния между узлами d_0 . Для конкретных оценок в случае рассеяния β -частиц воспользуемся потенциалом

$$v(\vec{r}-\vec{T}) = \pm Ze^2 \frac{e^{-|\vec{r}-\vec{T}|/a}}{|\vec{r}-\vec{T}|}, \quad (1)$$

где T — целочисленный вектор некоторого узла, $a \sim \frac{0,88 a_0}{\sqrt{Z}}$, $a_0 = \frac{me^2}{\hbar^2}$, m — масса частицы. Для нейтронного рассеяния на ядрах при энергиях до 5 Мэв можно воспользоваться псевдопотенциалом Ферми [8]

$$v(\vec{r}-\vec{T}) = \frac{2\pi \hbar^2}{m} b\delta(\vec{r}-\vec{T}). \quad (2)$$

Рассеяние будем исследовать на основе стационарного уравнения Шредингера, где внешний потенциал U , создаваемый решеткой в целом, запишем, используя метод Власова [9]

$$U = \sum_{\vec{T}} \left(\frac{1}{\pi \langle u^2 \rangle} \right)^{1/2} \int_{(\infty)} v(\vec{r}-\vec{T}-\vec{s}) e^{-\frac{s^2}{\langle u^2 \rangle}} d\vec{s}. \quad (3)$$

Здесь $\sqrt{\langle u^2 \rangle}$ — эффективная величина теплового разброса, а суммирование ведется по всем узлам решетки, кроме узла, в котором находится источник.

Хотя в реальных экспериментах источником частиц является совокупность узлов, рассмотрим один источник. Влияние остальных узлов после получения результатов. При этом если начало координат поместить в узел, являющийся источником, то падающую волну можно представить в виде

$$\psi_0 = f_0(\vec{r}_0) \frac{e^{ik|\vec{r}-\vec{\xi}|}}{|\vec{r}-\vec{\xi}|}, \quad (4)$$

где вектор $\vec{\xi}$ введен для учета теплового разброса источника, $\vec{r}_0 = \frac{\vec{r}}{|\vec{r}|}$.

Мы ограничимся случаем $\text{Im}f_0=0$. Границу кристалла будем считать резкой и используем борновское приближение.

§ 2. Угловая плотность выхода частиц

Частицы, вышедшие из кристалла, характеризуются суммой падающей и рассеянной волн, которые для расстояний, значительно пре-

восходящих эффективный размер кристалла, могут быть представлены в виде

$$\psi_0 = f_0(\vec{r}_0) e^{-ik\vec{r}_0 \cdot \vec{\xi}} \frac{e^{ikr}}{r}, \quad \delta\psi = f(\vec{r}_0, \vec{\xi}) \frac{e^{ikr}}{r}. \quad (5)$$

Если считать, что фон определяется неискаженной частью волны и имеет плотность $\rho_0 = |f_0|^2/r^2$, то угловую плотность выхода удобно характеризовать величиной

$$\rho/\rho_0 = 1 + e^{ik\vec{r}_0 \cdot \vec{\xi}} \frac{f(\vec{r}_0, \vec{\xi})}{f_0(\vec{r}_0)} + e^{-ik\vec{r}_0 \cdot \vec{\xi}} \frac{f^*(\vec{r}_0, \vec{\xi})}{f_0(\vec{r}_0)} + \frac{|f(\vec{r}_0, \vec{\xi})|^2}{|f_0(\vec{r}_0)|^2}. \quad (6)$$

Второе и третье слагаемые выражения (6) отражают результат интерференции рассеянной волны с падающей. Они чувствительны к знаку потенциала и в условии применимости борновского приближения на порядок превосходят последнее слагаемое, которое поэтому не существенно.

Для определителя $f(\vec{r}_0, \vec{\xi})$ имеем выражение

$$f(\vec{r}_0, \vec{\xi}) = -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \sum_{\vec{T}} \left(\frac{1}{\pi \langle u^2 \rangle} \right)^{3/2} \int_{(\infty)} e^{-\frac{s^2}{\langle u^2 \rangle}} d\vec{s} \times \\ \times \int_{(\infty)} v(\vec{r}' - \vec{T} - \vec{s}) f_0(\vec{r}_0) \frac{e^{ik|\vec{r}' - \vec{\xi}|}}{|\vec{r}' - \vec{\xi}|} d\vec{r}'. \quad (7)$$

Введем новую переменную интегрирования $\vec{R} = \vec{r}' - \vec{T} - \vec{\xi}$. Так как область a^3 , в которой потенциал заметно отличен от нуля, и область $\langle u^2 \rangle^{3/2}$ теплового разброса гораздо меньше объема элементарной ячейки, то (7) можно с большой точностью аппроксимировать выражением вида

$$f(\vec{r}_0, \vec{\xi}) = -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \sum_{\vec{T}} \exp \left\{ -ik\vec{T}_0 \cdot \vec{\xi} - \frac{1}{4} k^2 \langle u^2 \rangle (\vec{T}_0 - \vec{r}_0)^2 \right\} \times \\ \times \frac{f_0(\vec{T}_0)}{f_0(\vec{r}_0)} \frac{1}{T} \exp \{ ik(T - \vec{r}_0 \cdot \vec{T}) \} \int_{(\infty)} v(\vec{R}) e^{ik(\vec{T}_0 - \vec{r}_0) \cdot \vec{R}} d\vec{R}, \quad (8)$$

где $T_0 = \frac{\vec{T}}{|\vec{T}|}$ — единичный вектор в направлении узла \vec{T} .

Удобно ввести углы $\theta(\vec{T}_0, \vec{r}_0)$ между направлением наблюдения \vec{r}_0 и направлением на узел \vec{T} , а также обозначить

$$A[\theta(\vec{T}_0, \vec{r}_0)] = -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \int_{(\infty)} v(\vec{R}) e^{ik(\vec{T}_0 - \vec{r}_0) \cdot \vec{R}} d\vec{R}. \quad (9)$$

После усреднения по тепловому разбросу источника имеем

$$\rho/\rho_0 = 1 + 2 \sum_{\vec{T}} \frac{f_0(\vec{T}_0)}{f_0(\vec{r}_0)} \text{Re} A[\theta(\vec{T}_0, \vec{r}_0)] \exp \left\{ -2k^2 \langle u^2 \rangle \sin^2 \frac{\theta(\vec{T}_0, \vec{r}_0)}{2} \right\} \times$$

$$\begin{aligned}
 & \times \cos \left(2kT \sin^2 \frac{\theta(\vec{T}_0, \vec{r}_0)}{2} \right) + \\
 & + 2 \sum_{\vec{r}} \frac{f_0(\vec{T}_0)}{f_0(\vec{r}_0)} \operatorname{Im} A[\theta(\vec{T}_0, \vec{r}_0)] \exp \left\{ -2k^2 \langle u^2 \rangle \sin^2 \frac{\theta(\vec{T}_0, \vec{r}_0)}{2} \right\} \times \\
 & \times \sin \left(2kT \sin^2 \frac{\theta(\vec{T}_0, \vec{r}_0)}{2} \right). \quad (10)
 \end{aligned}$$

Так как в исходном уравнении использовался потенциал, создаваемый всей атомной решеткой в целом, то плотность выхода частиц чувствует влияние всех атомов решетки. При использованных предположениях о малости длин волн, короткодействии потенциала и применимости борновского приближения вклад от различных узлов аддитивен. В случае менее локализованного потенциала или при учете многократности столкновений зависимость должна быть более сложной. Однако и в рассматриваемом случае плотность выхода в направлении цепочки и одного рассеивателя будет различна как по порядку величины, так и по характеру угловой зависимости.

§ 3. Одиночный рассеиватель

Начнем с анализа одиночного рассеивателя, расположенного в точке $\vec{r} = \vec{d}$ ($|d| \geq d_0$). Ограничимся в этом параграфе случаем $|\operatorname{Re} A| \gg |\operatorname{Im} A|$:

$$\begin{aligned}
 \rho/\rho_0 = 1 + 2 \frac{f_0(\vec{d}_0)}{f_0(\vec{r}_0)} \frac{A(\theta)}{d} \cos \left(2kd \sin^2 \frac{\theta}{2} \right) \exp \left\{ -2p^2 \langle u^2 \rangle \sin^2 \frac{\theta}{2} \right\} \\
 \left(\vec{d}_0 = \frac{\vec{d}}{|d|} \right). \quad (11)
 \end{aligned}$$

Наиболее характерным является сомножитель $\cos \left(2kd \sin^2 \frac{\theta}{2} \right)$, который модулирует невозмущенный уровень плотности выхода частиц.

Глубина модуляции определяется выражением $2 \frac{f_0(\vec{d}_0)}{f_0(\vec{r}_0)} \frac{A}{d} \exp \left\{ -2k^2 \langle u^2 \rangle \sin^2 \frac{\theta}{2} \right\}$, которое быстро убывает при увеличении угла θ .

С другой стороны, и сами осцилляции, если учесть, что $kd \gg 1$, могут быть замечены лишь в направлении, близком к направлению на рассеиватель.

При этом можно считать, что $\frac{f_0(\vec{d}_0)}{f_0(\vec{r}_0)} \sim 1$ и $\theta \ll 1$:

$$\rho/\rho_0 = 1 + 2 \frac{A(\theta)}{d} \exp \left\{ -\frac{1}{2} k^2 \langle u^2 \rangle \theta^2 \right\} \cos \frac{kd\theta^2}{2}. \quad (12)$$

При $\theta=0$ будет наблюдаться абсолютный экстремум: для электронов — пик, для позитронов — лунка. Максимальный раствор центрального пика или лунки определится лишь длиной волны и расстоянием до рассеивателя

$$\Delta\theta_{\max} = \sqrt{\frac{\lambda}{d}}. \quad (13)$$

Эффективная угловая ширина $\Delta\theta_{\text{эф}}$ должна чувствовать характер взаимодействия и тепловой разброс. Если источник частиц в кристалле лежит на глубине 10^2 — 10^4 атомных слоев, то анизотропию выхода от одиночного рассеивателя наблюдать трудно, так как для поверхностных атомов глубина модуляции будет на несколько порядков меньше, чем для ближайших. Ближайшие же рассеиватели фактически не могут рассматриваться как отдельные, так как входят в состав цепочек атомов с плотной упаковкой.

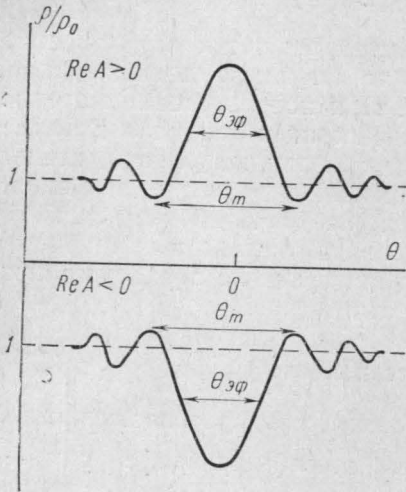


Рис. 1. $|ReA| \gg |ImA|$

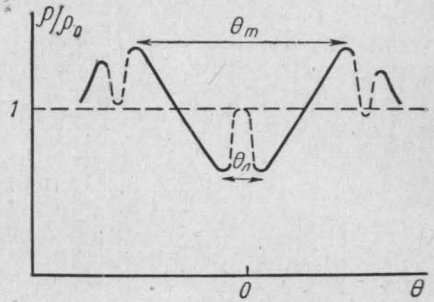


Рис. 2. $|ImA| \gg |ReA|$

§ 4. Плотность выхода частиц в направлении цепочки

В направлении наблюдения, близком к направлению некоторой цепочки с периодом d , состоящей из N атомов, угловая плотность выхода частиц определится выражением

$$\rho/\rho_0 = 1 + 2 \frac{A(\theta)}{d} \exp\left\{-\frac{1}{2} k^2 \langle u^2 \rangle \theta^2\right\} \sum_1^N \frac{1}{n} \cos\left(\frac{kd\theta^2}{2} n\right). \quad (14)$$

Характер угловой зависимости ρ/ρ_0 изображен на рис. 1. Максимальная глубина центрального экстремума может на порядок превосходить выброс от одиночного рассеивателя, удаленного на расстояние d от источника

$$\left. \frac{\rho - \rho_0}{\rho_0} \right|_{\theta=0} = 2 \frac{A(0)}{d} \sum_1^N \frac{1}{n} \sim 2 \frac{A(0)}{d} \ln N. \quad (15)$$

Максимальная угловая ширина $\Delta\theta_{\max}$ и в этом случае определится выражением (13), но форма несколько меняется. Удобно воспользоваться асимптотическим представлением суммы (14) при $N \rightarrow \infty$ и $\theta \neq 0$:

$$\rho/\rho_0 \sim 1 + 2 \frac{A(\theta)}{d} \exp\left\{-\frac{1}{2} k^2 \langle u^2 \rangle \theta^2\right\} \ln 2 \left| \sin \frac{kd\theta^2}{2} \right|. \quad (16)$$

Величина экстремумов, ближайших к центральному (ореол) не чувствительна к N .

В случае $|ImA| \gg |ReA|$ имеем для плотности выхода выражение

$$\rho/\rho_0 = 1 + 2 \frac{ImA(\theta)^1}{d} \exp \left\{ -\frac{1}{2} k^2 \langle u^2 \rangle \theta^2 \right\} \sum_1^N \frac{1}{n} \sin \left(\frac{kd\theta^2}{2} n \right), \quad (17)$$

которому соответствует форма тени на рис. 2. Ширина ложбины между двумя пиками зависит от количества узлов в цепочке $\Delta\theta_n \sim \sqrt{\frac{\lambda}{Nd}}$ и при больших N практически не наблюдается. Максимальная ширина центрального выброса $\Delta\theta_{\max} \sim \sqrt{\frac{\lambda}{d}}$, однако глубина модуляции в этом случае не зависит от N .

§ 5. Форма электронных пиков и позитронных лунок

Для потенциала (1) при рассеянии β -частиц имеем

$$\rho/\rho_0 = 1 \pm \sqrt[3]{Z} \frac{3,2}{1 + k^2 a^2 \theta^2} \frac{a_0}{d} \exp \times \\ \times \left\{ -\frac{1}{2} k^2 \langle u^2 \rangle \theta^2 \right\} \sum_1^N \frac{1}{n} \cos \left(\frac{kd\theta^2}{2} n \right). \quad (18)$$

Если учесть последний член выражения (6) $|f|^2/|f_0|^2 > 0$, то высота электронного пика будет всегда несколько больше глубины позитронной лунки. Глубина модуляции, а следовательно, и эффективная ширина пиков или лунок зависит от температуры и длины цепочки, от порядкового номера атомов кристалла, от плотности упаковки соответствующей цепочки, от эффективного радиуса действия сил. Глубина модуляции быстро убывает с ростом угла θ , причем скорость убывания определяется отношениями a/λ и $\frac{\sqrt{\langle u^2 \rangle}}{\lambda}$. Если температуры малы, то форма тени мало чувствительна к ее изменениям, последние весьма заметно сказываются лишь при условии $\frac{2\pi^2 \langle u^2 \rangle}{\lambda d} \gg 1$. Максимальная глубина экстремумов с учетом конечной угловой разрешающей способности детекторов должна несколько уменьшаться с увеличением температуры.

При квантовом рассмотрении в отличие от классического получается не только пик или лунка с ореолами, но и добавочный ряд экстремумов. Последние обычно малы, но в некоторых случаях должны наблюдаться экспериментально.

Следует также отметить, что «тени» могут быть ассиметричны при учете фактора $f_0(\vec{T}_0)/f_0(\vec{r}_0)$.

Если за критерий применимости борновского приближения выбрать требование малости отношения $\frac{\rho - \rho_0}{\rho_0}$ в районе всех узлов решетки, то условие применимости может быть нарушено в первую очередь за счет «затенения» одних атомов другими. Так в случае кристалла меди для цепочек с наиболее плотной упаковкой при характерных энергиях «затенение» будет приводить к нарушению условий применимости борновского приближения при $N \gg 10^2$. Для цепочек с менее плотной упаковкой условия применимости выполняются и для большего числа узлов.

§ 6. Возможность образования линейных «теней» в результате слияния осевых

В условиях применимости борновского приближения трехмерная решетка дает на экране лишь систему пятен. В экспериментах наблюдаются не только осевые пятна, но и линии, направление которых совпадает с направлением наиболее плотно упакованных плоскостей. Если считать, что в рамках использованных предположений можно дать объяснение образованию линейных «теней», то следует оценить возможность слияния осевых пятен в линейные.

Кристаллическую плоскость можно рассматривать как некоторое образование, состоящее из точечных цепочек. Чем больше периоды цепочек, тем гуще они расположены. Экспериментально могут еще наблюдаться следы от цепочек с периодом $d \sim 10 d_0$, так как их интенсивность лишь на порядок меньше интенсивности пятен от плотно упакованных цепочек, а угловые размеры уменьшены всего в два-три раза. В плоскостях с наиболее плотной упаковкой такие цепочки будут расположены достаточно густо, поэтому в некоторых направлениях возможно слияние пятен в линии. Однако условия слияния не будут одинаково хорошо выполняться для всех направлений, и линии не будут однородными по всей длине. Нарушение слияния должно наблюдаться в направлениях, близких к направлениям цепочек с наиболее плотной упаковкой. Условия слияния будут лучше выполняться для частиц с относительно низкими энергиями. Так как всегда имеется некоторый разброс рассеивающихся частиц по энергиям, то можно считать, что линейные «тени» в основном образованы низкоэнергетическим компонентом. Это должно отразиться в более слабой чувствительности линейных «теней» к изменению температуры кристалла.

§ 7. Выход частиц, испущенных многими источниками

Полученные выражения применимы для любого источника, совпадающего с одним из узлов идеальной кристаллической решетки. Если таких источников будет много, но эффективный размер области, в которой они сосредоточены, будет значительно меньше линейных размеров следов на экране, то такие следы от различных источников будут аддитивно накладываться друг на друга.

Положение коренным образом меняется для источников, расположенных в междоузлиях. Это связано с тем, что расположение источников относительно друг друга фактически будет случайным, и «тени» от различных источников могут гасить друг друга. Для цепочек с плотной упаковкой не будут наблюдаться явно выраженные «тени». Хотя для цепочек $d \geq 10 d_0$ в случае не очень коротких длин волн возможно образование «теней». Обычно пятна от таких цепочек сливаются в линии, поэтому можно предположить, что в некоторых случаях источники, расположенные в междоузлиях, дают вклад в образование линейных «теней».

С другой стороны, если считать, что с увеличением температуры возрастает число источников в междоузлиях, то это может также послужить причиной уменьшения интенсивности «теней» с увеличением температуры.

§ 8. Анизотропия выхода нейтронов средних энергий

Как показано выше, ширина «теней» не зависит от характера взаимодействия, поэтому возможность экспериментального наблюдения

эффекта «теней» при рассеянии нейтронов на ядрах решетки зависит от интенсивности следов. Для простоты оценок не будем учитывать спинового взаимодействия.

Для потенциального рассеяния $|ReA| \gg |ImA|$, причем $A \sim 10^{-13}$ см. Поэтому максимальная глубина модуляции при $\theta=0$

$$\frac{\rho - \rho_0}{\rho_0} \Big|_{\theta=0} = \frac{2A}{d} \sum_1^N \frac{1}{n} \sim \frac{2A}{d} \ln N, \quad (19)$$

что явно недостаточно для экспериментального наблюдения, несмотря на то, что ширина такой «тени» вполне макроскопическая.

При резонансном рассеянии $ReA = \frac{1}{2k} \frac{(E - E_0)\Gamma_{уп}}{(E - E_0)^2 + \frac{\Gamma^2}{4}}$, где использованы общепринятые обозначения [10]. Приведенное выражение для ReA достигает максимума при $|E - E_0| = \frac{\Gamma}{2}$. В области нескольких *кэв* при упругом рассеянии на ядрах легкого и среднего веса $\Gamma_{уп} \rightarrow \Gamma$ и

$$\frac{\rho - \rho_0}{\rho_0} \Big|_{\theta=0} \sim \frac{\lambda}{2\pi d} \ln N.$$

Это уже может быть достаточным для экспериментального наблюдения.

Если $|E - E_0| \sim 0$, то $|ImA| = \frac{1}{k} \frac{\Gamma_{уп}}{\Gamma} \gg ReA$, и мы имеем тень, соответствующую рис. 2.

Автор благодарен проф. А. А. Власову за полезные обсуждения.

ЛИТЕРАТУРА

1. Томпсон М. «Успехи физических наук», **99**, вып. 2, 1969.
2. Datz S., Erginsoy C., Leibfried G., Lutz H. O. *Ann. Rev. Nucl. Sci.*, **17**, 129, 1967.
3. Тулинов А. Ф. «Успехи физических наук», **87**, вып. 4, 1965.
4. Domeij B. K. *Bjergvist. Phys. Lett.*, **2**, 124, 1962.
5. Uggerhoj E., Anderson T. U. *Canadian Journal of Physics*, **46**, 543, 1968.
6. Тулинов А. Ф. *ДАН СССР*, **162**, 3, 1965.
7. Филиппов Г. М. «Вестн. Моск. ун-та», физ., астрон., № 6, 1965.
8. Мотт Н., Месси Г. Теория атомных столкновений. М., «Мир», 1969.
9. Власов А. А. Теория многих частиц. М., Гостехиздат, 1950.
10. Давыдов А. С. Теория атомного ядра. Физматгиз, 1968.

Поступила в редакцию
25.6 1970 г.

Кафедра
теоретической физики