

А. А. ВЛАСОВ, В. Н. КУРАЕВ

ТЕМПЕРАТУРНЫЕ РАСПРЕДЕЛЕНИЯ В ПУЧКЕ ПРИ НАЛИЧИИ ВОЗБУЖДЕННЫХ СТРУКТУР

(к теории каналирования и эффекта теней в статистической модели кристалла)¹

Содержится теория каналирования и эффекта теней на основе нелокально-статистического описания частиц кристалла и пучка с учетом коллективного взаимодействия частиц пучка со всем кристаллом в целом.

Отказываясь от использования локальных образов в поведении частиц в явлениях каналирования и теней в пользу непрерывных вероятностей местоположений и кинематических свойств частиц как первичных понятий теории, удается единообразно описать явления каналирования, блокировки и протонограмм, полностью устраняя трудности [1].

Нелокально-статистическое описание частиц в пучке, атомов в кристалле и взаимодействий между ними опирается на систему уравнений для функций распределения

$$\frac{\partial f(\vec{r}, \vec{v}, t)}{\partial t} + \vec{v} \vec{\nabla}_{\vec{r}} f - \frac{1}{m} \vec{\nabla}_{\vec{r}} [U_f(\vec{r}) + Z_1 e \varphi(\vec{r})] \vec{\nabla}_{\vec{v}} f = 0,$$

$$U_f(\vec{r}) = \int K_f(|\vec{r} - \vec{r}'|) \rho(\vec{r}') d\vec{r}', \quad \Delta \varphi = -4\pi Z_1 e \int f d\vec{v}, \quad (1)$$

$$\rho[\vec{r} \in (abc)^h] = \left(\int_{(abc)^h} \rho d\vec{r} \right) [a^{\delta_1 h} b^{\delta_2 h} c^{\delta_3 h}]^{-1} \prod_{\alpha=1}^h (2\pi \langle x_{\alpha}^2 \rangle)^{-\frac{1}{2}} \exp \left[-\frac{x_{\alpha}^2}{2 \langle x_{\alpha}^2 \rangle} \right].$$

Здесь $h=3, 2, 1$ — число измерений для кристалла и его возбужденных состояний (трехмерные, двумерные и одномерные периодические структуры) [2]

$$K_f(|\vec{r} - \vec{r}'|) = \frac{Z_1 Z_2 e^2}{|\vec{r} - \vec{r}'|} e^{-\kappa |\vec{r} - \vec{r}'|}, \quad a_0 \equiv \frac{1}{\kappa} = a_B \cdot 0,8853 [Z_1^{2/3} + Z_2^{2/3}]^{-\frac{1}{2}}.$$

¹ А. А. Власов, В. Н. Кураев. «Вестн. Моск. ун-та», физ., астроном., 12, № 4, 471, 1972.

Рассмотрим вначале явление каналирования ионов в монокристаллических фольгах (на прострел), ставя задачу отыскания адекватных решений у системы (1).

Наложим естественные условия на решение.

1. Условие гладкости — для произвольного объема ΔV в пучке вероятное число частиц

$$\int_{(\Delta V)} \int_{(\infty)} f d\vec{r} d\vec{v}$$

не обязано принадлежать множеству целых чисел.

Отказ от целочисленности позволяет нам выйти из класса локальных решений типа:

$$f(\vec{r}, \vec{v}, t) = \sum_{s=1}^N \delta[\vec{r} - \vec{r}_s(t)] \delta[\vec{v} - \vec{v}_s(t)].$$

2. Условие стационарности $\partial f / \partial t = 0$.

3. Условие температурности (должен выполняться принцип статистической независимости) $f(\vec{r}, \vec{v}) = \rho(\vec{r}) w(v^2)$.

4. Наличие трансляции частиц в пучке, совместимое с предыдущими условиями

$$f(\vec{r}, \vec{v}) = \rho(\vec{r}) w([\vec{v} - \vec{u}]^2), \vec{u} = \text{const.} \quad (2)$$

Теорема 1. Решений указанного вида не существует в трехмерном кристалле. Это вытекает из невозможности удовлетворить системе уравнений (1) функцией (2) при $\vec{u} \neq 0$. В самом деле, подставляя (2) в (1), получим условие разрешимости в виде:

$$v \frac{\vec{\nabla}_{\vec{r}} \rho_f}{\rho_f} - \frac{2}{m} \frac{\vec{\nabla}_{\vec{r}} V \rho_f w'}{\rho_f} = - (\vec{u} \vec{\nabla}_{\vec{r}} V),$$

$$\frac{2}{m} w' \rho_f$$

где

$$w' = \frac{\partial w}{\partial [(\vec{v} - \vec{u})^2]}, \quad V(\vec{r}) \equiv U_f(\vec{r}) + Z_1 e \varphi(\vec{r}).$$

Этому условию невозможно удовлетворить, так как \vec{v} является независимой переменной.

Теорема теряет силу в случае независимости действующего потенциала U_f от одной или двух координат.

Теорема 2. В случае наличия в фольге нитевидных или пластинчатых структур возникает точное решение, удовлетворяющее предыдущим условиям:

$$f(\vec{r}, \vec{v}) = C w_{\parallel} ([v_z - v_0]^2) \exp \left\{ - \frac{U_f(\vec{r}_{\perp}) + Z_1 e \varphi(\vec{r}_{\perp})}{\theta_{\perp}} - \frac{m v_{\perp}^2}{2 \theta_{\perp}} \right\}, \quad (3)$$

$$U_f(\vec{r}_{\perp}) = \int K_f(|\vec{r} - \vec{r}'|) \rho(\vec{r}'_{\perp}) d\vec{r}'_{\perp} dz', \quad \Delta \varphi(\vec{r}_{\perp}) = - 4 \pi Z_1 e \int_{(\infty)} f_{\perp} d\vec{a}.$$

Средняя скорость потока направлена вдоль структур. Параметр разделения переменных θ_{\perp} является поперечной температурой в пучке. Функция ψ_{11} теорией не определяется.

Одномерные и двумерные структуры должны возбуждаться в кристалле ионами пучка. Один ион с энергией в 1 Mev в состоянии создать блок из подобных структур в 300 кубических ангстрем.

Теорема 3. Стационарные решения имеются и у нестационарных уравнений, связывающих функцию распределения частиц пучка f_1 с функцией распределения атомов указанных структур f_2 , вследствие чего не реализуется процесс выравнивания температур между пучком и структурами даже в случае $\theta_1 \gg \theta_2$.

Система уравнений

$$\frac{\partial f_1}{\partial t} + \vec{v} \vec{\nabla}_r f_1 - \frac{1}{m_1} \vec{\nabla}_r (U_{12} + Z_1 e \varphi) \vec{\nabla}_v f_1 = 0, \quad \Delta \varphi = -4\pi Z_1 e \int_{(\infty)} f_1 d\vec{v},$$

$$\frac{\partial f_2}{\partial t} + \vec{v} \vec{\nabla}_r f_2 - \frac{1}{m_2} \vec{\nabla}_r (U_{21} + U_{22}) \vec{\nabla}_v f_2 = 0,$$

$$U_{\alpha\beta} = \int K_{\alpha\beta}(|\vec{r} - \vec{r}'|) f_{\beta} d\vec{r}' d\vec{v}', \quad \frac{\partial K_{\alpha\beta}}{\partial t} = 0, \quad (\alpha, \beta) = 1, 2$$

имеет точное стационарное решение для f_1 и f_2 с $\theta_1 \neq \theta_2$. Эти параметры оказываются независимыми.

Сохраняемость «ядер» $K_{\alpha\beta}(|\vec{r} - \vec{r}'|)$ при наличии трансляции ионов обусловлена тем, что система

$$\left[i\hbar \frac{\partial}{\partial t} + \frac{\hbar^2}{2m} \Delta - \frac{Z_2 e^2}{|\vec{s}|} + (-e)(\varphi_e + \varphi_1 + \varphi_2) \right] \psi_{\vec{r}}(\vec{s}) = 0,$$

$$\Delta \varphi_e = -4\pi Z_2 (-e) \psi_{\vec{r}}^*(\vec{s}) \psi_{\vec{r}}(\vec{s}), \quad \Delta \varphi_1 = -4\pi Z_1 e \int_{(\infty)} f_1 d\vec{v},$$

$$\Delta \varphi_2 + \kappa^2 \varphi_2 = -4\pi Z_2 e \int_{(\infty)} f_2 d\vec{v}$$

имеет стационарные решения и для электронных состояний атомов в структурах.

Следствия теорем.

1. Верхняя граница для θ_{\perp} .

Условие стационарности распределения требует $\theta_{\perp} \ll \max U_f(r_{\perp})$. Действующий на частицы пучка потенциал U_f определяется через плотность $\rho(r)$. Для случая нитевидных структур имеем [2]

$$\bar{\rho}(r_{\perp}) = \left(\int_{(abc)} \bar{\rho} d\vec{r} \right) \frac{1}{d} \prod_{\alpha=1}^2 (2\pi \langle x_{\alpha}^2 \rangle)^{-1/2} \exp \left[-\frac{x_{\alpha}^2}{2 \langle x_{\alpha}^2 \rangle} \right].$$

Рассмотрим два предельных случая: низких и не слишком низких температур в структурах

$$1) \frac{a_0}{\langle x_{\alpha}^2 \rangle^{1/2}} \gg 1 \quad \text{и} \quad 2) \frac{a_0}{\langle x_{\alpha}^2 \rangle^{1/2}} \ll 1.$$

Возникает два вида разложений. Для первого случая имеем

$$\bar{U}_f^{(1)}(\vec{r}_\perp) = \left(\int_{(abc)} \bar{\rho} d\vec{r} \right) \left[1 + \frac{1}{2} \sum_{\alpha=1}^2 \langle x_{\alpha\perp}^2 \rangle \partial_{x_\alpha}^2 + \dots \right] \bar{K}_f(|\vec{r}_\perp|),$$

$$\langle x_{\alpha\perp}^2 \rangle = \frac{\int x_{\alpha\perp}^2 \bar{\rho}(\vec{r}_\perp) d\vec{r}}{\int \bar{\rho}(\vec{r}_\perp) d\vec{r}},$$

$$\bar{K}_f(|\vec{r}_\perp - \vec{r}'_\perp|) = \frac{1}{d} \int_{(\infty)} K_f(|\vec{r} - \vec{r}'|) dz' = \frac{2Z_1 Z_2 e^2}{d} K_0(x|\vec{r}_\perp - \vec{r}'_\perp|),$$

где $K_0(t)$ — цилиндрическая функция Макдональда, d — период исходного кристалла в направлении нитей.

Для второго случая получается аналогичное разложение.

Максимальная величина потенциального барьера для нитевидных структур имеет вид

$$\bar{\theta}_\perp^{(1)} \ll \left(\int_{(abc)} \bar{\rho} d\vec{r} \right) \frac{2Z_1 Z_2 e^2}{d} \ln \frac{2a_0}{\gamma \langle x_\alpha^2 \rangle^{1/2}},$$

$$\bar{\theta}_\perp^{(2)} \ll \left(\int_{(abc)} \bar{\rho} d\vec{r} \right) \frac{2Z_1 Z_2 e^2}{d} \left(\frac{a_0}{\langle x_\alpha^2 \rangle^{1/2}} \right) \exp \left[-\frac{a_0^2}{2\langle x_\alpha^2 \rangle} \right]. \quad (4)$$

В случае пластинчатых структур получаем

$$\bar{\theta}_\perp^{(1)} \ll \left(\int_{(abc)} \bar{\rho} d\vec{r} \right) \frac{2\pi Z_1 Z_2 e^2}{d} \left(\frac{a_0}{d} \right) \exp \left[-\frac{\langle x_\alpha^2 \rangle^{1/2}}{a_0} \right],$$

$$\bar{\theta}_\perp^{(2)} \ll \left(\int_{(abc)} \bar{\rho} d\vec{r} \right) \frac{2\pi Z_1 Z_2 e^2}{d} \left(\frac{a_0}{d} \right) \left(\frac{a_0^2}{2\pi \langle x_\alpha^2 \rangle} \right)^{1/2} \exp \left[-\frac{a_0^2}{2\langle x_\alpha^2 \rangle} \right]. \quad (5)$$

Для случая вольфрама и протонов, полагая

$$\int_{(abc)} \bar{\rho} d\vec{r} \approx 1, \quad d = 3 \cdot 10^{-8} \text{ см}, \quad \left(\frac{2a_0}{\langle x_\alpha^2 \rangle^{1/2}} \right)^{(1)} = 3, \quad \left(\frac{2a_0}{\langle x_\alpha^2 \rangle^{1/2}} \right)^{(2)} = \frac{1}{3},$$

имеем для поперечных температур пучка в нитевидных структурах

$$\bar{\theta}_\perp^{(1)} \ll 780 \text{ эв}, \quad \bar{\theta}_\perp^{(2)} \ll 253 \text{ эв}.$$

Для пластинчатых структур значения для поперечных температур пучка приблизительно на порядок меньше соответствующих значений для нитевидных структур.

Сплошность и значительная высота потенциальных барьеров обеспечивают эффективность процесса каналирования ионного пучка между возбужденными структурами.

2. Угловой спектр.

После выхода частиц из фольги потенциальные барьеры перестают действовать на них. Поперечный температурный разброс скоростей приводит к спектру углов, наблюдаемых экспериментально.

Ограничиваясь малыми концентрациями пучка и используя (3), с учетом $v_{\perp}/v_0 = \text{tg}\psi$, получаем

$$f(\vec{r}, \vec{v}, t) = c\omega_{\parallel} \left(\left[v_z - \left(\frac{2E_0}{m} \right)^{1/2} \right]^2 \right) \exp \left[- \frac{E_0}{\theta_{\perp}} \text{tg}^2 \psi \right]. \quad (6)$$

Здесь E_0 — кинетическая энергия частиц в направлении центра пятна.

Имеем для случая нитевидных структур

$$\langle \text{tg}^2 \psi \rangle^{(1)} = \frac{\bar{\theta}_{\perp}^{(1)}}{2E_0} \ll \left(\int_{(abc)} \bar{\rho} d\vec{r} \right) \frac{Z_1 Z_2 e^2}{E_0 d} \ln \frac{2a_0}{\sqrt{\langle x_{\alpha}^2 \rangle^{1/2}}}, \quad (7)$$

$$\langle \text{tg}^2 \psi \rangle^{(2)} = \frac{\bar{\theta}_{\perp}^{(2)}}{2E_0} \ll \left(\int_{(abc)} \bar{\rho} d\vec{r} \right) \frac{Z_1 Z_2 e^2}{E_0 d} \left(\frac{a_0}{\langle x_{\alpha}^2 \rangle^{1/2}} \right) \exp \left[- \frac{a_0^2}{2 \langle x_{\alpha}^2 \rangle} \right].$$

В случае пластинчатых структур получаем аналогичный результат для углового распределения частиц пучка, но поперечная температура определяется формулами (5).

3. Энергетический спектр.

Для каждой частицы пучка $v^2 = v_{\perp}^2 + v_z^2 = v_0^2 (1 + \text{tg}^2 \psi)$, поэтому спектр по энергиям органически связан с угловым спектром:

$$f(\vec{r}, \vec{v}, t) = c\omega_{\parallel} \left(\left[v_z - \left(\frac{2E_0}{m} \right)^{1/2} \right]^2 \right) \exp \left[- \frac{U_f(\vec{r}_{\perp} - \vec{v}_{\perp} t)}{\theta_{\perp}} - \frac{E_0}{\theta_{\perp}} \left(\frac{E - E_0}{E_0} \right) \right] \quad (8)$$

Среднее отклонение в энергии частиц и связь энергетического спектра с угловым есть

$$\left\langle \frac{E - E_0}{E_0} \right\rangle = \frac{\theta_{\perp}}{E_0}, \quad E = E_0 (1 + \text{tg}^2 \psi). \quad (9)$$

Функция распределения по энергиям (8) оказывается асимметричной, так как всегда $E \geq E_0$.

4. Устранение возникшего противоречия.

Развитая в [1] теория рассеяния частиц с центром излучения внутри кристалла находилась в противоречии с опытом в отношении полуширин пятен и сплошных линий, так как отсутствовала зависимость полуширин от энергии частиц пучка и получалась неправильная зависимость от температуры кристалла и от величины $Z_1 Z_2$.

Нелокально-статистическая теория кристалла позволяет снять это противоречие, привлекая к рассмотрению возбужденные состояния кристалла [2] в виде блоков из нитевидных и пластинчатых структур, на которых происходит дополнительное рассеяние частиц. Переход частиц пучка из области тройко-периодического кристалла в блок из возбужденных структур, ориентированных вдоль направления движения частиц, характеризуется, во-первых, аналитической разобщенностью решения от источника частиц, во-вторых, сохранением пространственной структуры пучка при прохождении его через указанные структуры и, в-третьих, возникновением поперечного температурного разброса частиц пучка, движущихся внутри структур, на основании теоремы 2.

После выхода частиц из кристалла температурный разброс, оформившийся внутри возбужденных структур, приводит к дополнительному

рассеянию частиц, значительно превышающему разброс, обусловленный только прямо-периодической структурой кристалла. Получающееся новое значение полуширины пятен и сплошных линий полностью устаревает оставшееся противоречие теории с экспериментом.

Количественное описание указанного механизма опирается на функцию распределения частиц вне кристалла, учитывающую вышеуказанные особенности при прохождении частиц через блоки из возбужденных структур. Вблизи анализатора функция распределения частиц пучка принимает вид

$$f_0(\vec{r}, \vec{v}, t) = \delta r_f(\vec{r}_\perp - \vec{v}_\perp \tau, z - v_z \tau, \tau) \omega_\perp \left(\frac{mv_\perp^2}{2\theta_\perp} \right) \omega_\parallel (|v_z - v_0|^2), \quad (10)$$

$$\omega_\perp \left(\frac{mv_\perp^2}{2\theta_\perp} \right) = \frac{m}{2\pi\theta_\perp} e^{-\frac{mv_\perp^2}{2\theta_\perp}},$$

где δr_f определена в [1].

В δr_f координаты входят только в специальную функцию $S_1(a; X)$:

$$S_1(a; X) = - \left(\frac{1}{a} e^{-\frac{X^2}{4a}} - e^a \int_a^\infty \exp \left[-t - \frac{X^2}{4t} \right] \frac{dt}{t} \right),$$

$$X = |\vec{r}_\perp - (m_x \vec{a}_x + m_y \vec{a}_y) \frac{|z|}{n_z a_z} \frac{n_z a_z}{|z|} \kappa,$$

$$a = \frac{1}{2} \langle r_\perp^2 \rangle \kappa^2.$$

Температурный разброс в (10) приводит к усреднению функции S_1 . Результат усреднения специальной функции $S_1(a; X)$ не изменяет ее вида, а меняет только значение параметра a :

$$\int_{(\infty)} S_1(a; X[\vec{r}_\perp - \vec{v}_\perp \tau]) \omega_\perp \left(\frac{mv_\perp^2}{2\theta_\perp} \right) d\vec{v}_\perp = S_1(a^+; X),$$

$$a^+ = \frac{1}{2} \left[\langle r_\perp^2 \rangle + \frac{\theta_\perp}{2E_0} (n_z a_z)^2 \right] \kappa^2, \quad (11)$$

$$\left(\tau = \frac{z}{v_0}, E_0 = \frac{mv_0^2}{2} \right).$$

Изменение параметра a приводит к новому значению для угловой полуширины пятен и линий:

$$\langle \text{tg}^2 \psi \rangle = \frac{\theta_\perp}{2E_0}, \quad (12)$$

где θ_\perp определяется формулами (4) и (5).

Формула (12) снимает вышеуказанное противоречие как в отношении зависимости полуширин от энергии частиц, так и в отношении температуры кристалла и порядковых номеров Z_1 и Z_2 . Эта формула точно совпадает с аналогичной формулой (7) для случая каналирования на прострел.

Полученные значения для угловых полуширин пятен и линий существенно зависят от упругих постоянных структур кристалла. С увеличением коэффициента упругости, входящего в $(\lambda_{\alpha}^2)^{1/2}$, ширина пятен и линий возрастает.

Вполне аналогично формуле (9) получается распределение частиц по энергиям внутри пятен и линий в явлениях блокировки и протонограмм. При перемещении вдоль радиуса пятен и поперек сплошных линий энергия частиц меняется. На периферии пятен и сплошных линий энергия частиц больше, чем в центре. Средняя энергия частиц в пятнах больше, чем в сплошных линиях.

Необходимость существования в трехмерном кристалле блоков из нитевидных или пластинчатых структур, обеспечивающих важные детали рассеяния частиц в явлениях каналирования, блокировки и протонограмм, является предсказанием единой теории этих явлений.

ЛИТЕРАТУРА

1. Власов А. А., Кураев В. Н. «Вестн. Моск. ун-та», физ., астрон., 12, № 3, 328, 1972.
2. Власов А. А. «Теоретическая и математическая физика», 3, 388, 1970.

Поступила в редакцию
7.5 1971 г.

Кафедра
теоретической физики