Вестник
МОСКОВСКОГО УНИВЕРСИТЕТА
№ 5 — 1975

УДК 548.0 : 537

А. А. ВЛАСОВ, В. Н. КУРАЕВ

ОБЩНОСТЬ ПРИРОДЫ ЯВЛЕНИЯ ПЯТЕН ВЕНЕРА И БЛОКИРОВОЧНОГО ЭФФЕКТА ПРИ ПРОХОЖДЕНИИ ЧАСТИЦ ЧЕРЕЗ МОНОКРИСТАЛЛЫ

Обоснован и развит аппарат, вскрывающий общность в явлениях пятен Венера и блокировочного эффекта при прохождении частиц через монокристаллы. Метод базируется на работах авторов по теории блокировочного эффекта на основе нелокально-статистического описания частиц пучка, атомов кристалла и взаимодействия их между собой.

Существуют следующие основания для постановки вопроса об общности механизма явлений распыления атомов кристаллов, приводящего к пятнам Венера [1—3], с одной стороны, и эффекту блокировки движения ионов в направлениях главных кристаллографических осей кристалла [4—7], с другой стороны. В обоих случаях существует находящийся внутри кристалла центр излучения (или рассеяния). В обоих случаях основную роль играют отталкивающие силы взаимодействия между движущимися частицами пучка и атомами кристалла.

Имеется замкнутый аппарат [8—10] статистической теории, описывающей перемещения произвольных частиц в заданном периодическом поле кристалла. Этот аппарат чувствителен к деталям взаимодействия частиц пучка с атомами кристалла.

Естественно возникает вопрос: не являются ли качественные различия между пятнами Венера и лунками блокировок следствием лишь количественного различия в параметре взаимодействий, характеризующем силы отталкивания между атомами кристалла и движущимися частицами пучка, при сохранении в обоих случаях механизма трансляции частиц через кристалл. Если указанный параметр определяется кинетической энергией частиц, то при изменении этой энергии должен существовать непрерывный переход картины пятен Венера в лунки блокировок и обратно. Статистическую теорию, разработанную ранее для явлений блокировок и каналирования, мы и распространим на решение указанной проблемы.

Исходная статистическая теория основана на отказе от понятия локализации частиц пучка и атомов кристалла как первичного понятия. В основу теории положены непрерывные поля вероятностей местоположений, скоростей и ускорений частиц в виде функций распределения

$$\rho(\mathbf{r}, t),\ f(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t),\ f(\mathbf{r}, \mathbf{v}, \dot{\mathbf{v}}, t)$$

и законы сохранения для этих функций [11—12].

В этой статье ставятся следующие задачи.

Разработать статистический аппарат для произвольного закона сил взаимодействия между движущимися частицами и атомами кристалла с целью унифицирования механизма движения через кристалл как ионов, так и нейтральных частиц.

Выявить в указанном законе взаимодействия параметр, который был бы чувствителен к изменению кинетической энергии движения частиц. Изменение этого параметра давало бы возможность проверить основную гипотезу: переходят ли непрерывно друг в друга эффекты пятен Венера и блокировки без какого-либо изменения статистического механизма трансляции частиц пучка через кристалл?

Исходная система уравнений для функции распределения частиц в пучке (f), вероятности местоположения атомов в кристалле (ρ) и взаимодействия между частицами пучка и атомами кристалла такая же, как и в [8—10]:

$$\frac{\partial f(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t)}{\partial t} + div_{\mathbf{r}}\, \mathbf{v} f + div_{\mathbf{v}} \langle \dot{\mathbf{v}} \rangle f =$$

$$= \Phi(|\mathbf{v}|) \left(\frac{w_{aa}}{2\pi\theta}\right)^{\frac{3}{2}} e^{\frac{-w_{aa}}{2\theta} r^2},$$

$$\langle \dot{\mathbf{v}} \rangle = \frac{\int\limits_{(\infty)} \dot{\mathbf{v}} f(\mathbf{r}, \mathbf{v}, \dot{\mathbf{v}}, t)\, d\dot{\mathbf{v}}}{f(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t)} = -\frac{1}{m} \operatorname{grad}_{\mathbf{r}} [U_f(r) + Z_1 e \varphi(\mathbf{r}, t)],$$

$$U_f(\mathbf{r}) = \int K_f(|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|) \rho(\mathbf{r}', t) d\mathbf{r}', \quad \Delta \varphi(\mathbf{r}, t) = -4\pi Z_1 e \int\limits_{(\infty)} f d\mathbf{v}, \tag{1}$$

$$\rho(\mathbf{r}) = C \exp\left[-\frac{U(\mathbf{r})}{\theta}\right], \ U(\mathbf{r}) = C \int K(|\mathbf{r} - r'|) e^{-\frac{U(\mathbf{r}')}{\theta}} d\mathbf{r}'.$$

Здесь $K_f(|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|)$ и $K(|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|)$ — потенциалы парного взаимодействия движущейся частицы пучка с атомом кристалла, находящиеся в точках $\mathbf{r}$ и $\mathbf{r}'$, и соответственно двух атомов кристалла друг с другом в условиях равновесного состояния.

Конкретизация природы перемещающихся частиц полностью определяется энергией взаимодействия $K_f(|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|)$. Поэтому исходные уравнения правомерны для движения через заданную кристаллическую структуру как заряженных, так и нейтральных частиц.

Источник частиц (заряженных или нейтральных) в кристалле описывается в первом уравнении справа заданной функцией распределения скоростей частиц пучка у источника $\Phi(|\mathbf{v}|)$ и гауссовским распределением своего положения в окрестности начала координат.

Система уравнений (1) позволяет определить функцию распределения движущихся через кристалл частиц по заданным характеристикам источника, структуре кристалла, по виду взаимодействия всех частиц между собой.

Распределение плотности вероятности $\rho(\mathbf{r})$ местоположения атомов в кристалле определено в [8]. Применительно к ограниченной кристаллической пластине оно определяется рядом — интегралом Фурье:

$$\rho(\mathbf{r}) = \sum_{n_x, n_y=-\infty}^{+\infty} e^{ik_\perp r_\perp} \int_{-\infty}^{\infty} \Big(\sum_{n_z=-\nu_b}^{\nu_a} e^{-in_z a_z k_z} \Big) \rho_{\mathbf{k}_\perp k_z} e^{ik_z z}\, dk_z,$$

где

$$\mathbf{k} = \left(\frac{2\pi}{a_x} n_x,\ \frac{2\pi}{a_y} n_y \right),\quad n_x, n_y = 0,\ \pm 1,\ \pm 2, \ldots$$

$$\rho_{\mathbf{k}_\perp k_z} = \Big(\int_{(\Omega)} \rho\, d\mathbf{r} \Big) \frac{1}{2\pi\, a_x a_y}\, e^{-\frac{1}{2} \langle x_\alpha^2 \rangle (k_\perp^2 + k_z^2)},$$

$$\langle x_\alpha^2 \rangle = \frac{\theta]}{U_{aa}} \Big(\int_{\Omega} \rho\, d\mathbf{r} \Big)^{-1},\quad \Omega = a_x a_y a_z.$$

Здесь a_z — длина элементарной ячейки кристалла в направлении оси z, $\nu_a a_z$ — толщина кристалла в направлении выхода частиц, ν_a — максимальное число плоских подрешеток в кристалле, через которые проходит частица на своем пути к коллектору, $-\nu_b a_z$ — расстояние от центра рассеяния частиц пучка до задней границы кристалла.

Решение для функции распределения частиц в пучке $f(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t)$ будем искать в виде ряда последовательных приближений по параметру, пропорциональному интенсивности атомных и атом-ионных взаимодействий (т. е. заряду ионов в пучке):

$$U_f \to \varepsilon U_f,\quad e\varphi \to \varepsilon e\varphi,\quad f = f_0 + \varepsilon f_1 + \varepsilon^2 f_2 + \ldots,$$
$$\varphi = \varepsilon\varphi_1 + \varepsilon^2\varphi_2 + \varepsilon^3\varphi_3 + \ldots$$

Основания для решения в виде ряда по ε изложены в [8]. Здесь мы ставим задачу получения распределения концентрации в пучке частиц, прошедших через кристалл, не специализируя энергию парного взаимодействия $K_f(|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|)$ с целью выяснения чувствительности картины рассеяния по отношению к изменению энергии частиц пучка, входящей в $K_f(|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|)$. Следуя [8], получаем в первом приближении

$$\int_{(\infty)} \overset{(1)}{f}(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t)\, d\mathbf{v} = \rho_f^{(1)}(\mathbf{r}, t),$$

$$\rho_f^{(1)}(\mathbf{r}, t) = -\Big(\int_{(\Omega)} \rho\, d\mathbf{r} \Big) \frac{1}{m|z|^2} \frac{a_z}{a_x a_y} \int_{\frac{|\mathbf{r}|}{t}}^{\infty} \frac{1}{\xi} \Phi(\xi)\, d\xi \sum_{n_z=1}^{\nu_a} n_z \times$$

$$\times \sum_{n_x, n_y=-\infty}^{+\infty} \sigma_f(k_\perp)\, k_\perp^2 \exp\left[-\frac{1}{2} \langle r_\perp^2 \rangle k_\perp^2 + i\mathbf{k}_\perp \mathbf{r}_\perp \frac{n_z a_z}{|z|} \right], \tag{2}$$

где

$$\sigma_f(k_\perp) = 4\pi \int K_f(s) \frac{\sin k_\perp s}{k_\perp s} s^2\, ds,$$

$$\langle r_1^2 \rangle = \langle x_\alpha^2 \rangle + \frac{\theta}{W_{aa}}.$$

Преобразуем (2), используя для двойной суммы по n_x и n_y формулу суммирования Пуассона

$$\sum_{n=-\infty}^{+\infty} F(n, x^\alpha) = \sum_{m=-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{\infty} F(t, x^\alpha)\, e^{i2\pi mt}\, dt.$$

Тогда получаем

$$\rho_f^{(1)}(\mathbf{r}, t) = \left(\int_{(\Omega)} \rho\, d\mathbf{r}\right) \frac{1}{m\,|z|^2}\, \frac{a_z}{2\pi} \int_{\frac{|\mathbf{r}|}{t}}^{\infty} \frac{1}{\xi}\, \Phi(\xi)\, d\xi \sum_{n_z=1}^{\nu_a} n_z \sum_{m_y, m_x=-\infty}^{+\infty} S(R_\perp). \tag{3}$$

Здесь функция $S(R_\perp)$ представляет следующую зависимость распределения плотности частиц пучка в плоскости, перпендикулярной к оси симметрии:

$$S(R_\perp) = -\int_0^\infty k_\perp^2\, \sigma_f(k_\perp)\, e^{-\frac{1}{2}\langle r_\perp^2\rangle k_\perp^2} J_0\left(k_\perp R_\perp \frac{n_z a_z}{|z|}\right) k_\perp\, dk_\perp,$$

$$\left(R_\perp = \left|\mathbf{r}_\perp + (m_x \mathbf{a}_x + m_y \mathbf{a}_y)\frac{|z|}{n_z a_z}\right|\right). \tag{4}$$

Отметим наиболее характерные из полученных результатов.

Формула (3) выведена при условии, что радиус эффективной зоны сосредоточения пучка в плоскости сечения $\mathbf{r}_\perp$ мал по сравнению с расстоянием $|z|$ до коллектора, т. е.

$$|\mathbf{r}_\perp| \ll \frac{1}{\gamma}|z|, \quad \gamma \gg 1,$$

где γ — эмпирический коэффициент, определяющий особенности экспериментальной установки. Численное значение этого коэффициента может определять максимально возможное число пятен Венера или лунок.

Из выражения для $R_\perp$ видно, что двойная сумма

$$\sum_{m_x, m_y=-\infty}^{+\infty} S\left(\left|\mathbf{r}_\perp + (m_x \mathbf{a}_x + m_y \mathbf{a}_y)\frac{|z|}{n_z a_z}\right|\right)$$

представляет собой периодическую функцию в плоскости x, y. В точках

$$\mathbf{r}_\perp = -(m_x \mathbf{a}_x + m_y \mathbf{a}_y)\frac{|z|}{n_z a_z}, \quad m_x, m_y = 0, \pm 1, \pm 2, \ldots$$

функция $S(R_\perp)$ имеет экстремумы. В случае, когда расстояние между соседними экстремумами $(d_x, d_y) = (a_x, a_y)\frac{|z|}{n_z a_z}$ превышает эффективную ширину функции $S(R_\perp)$, двойная сумма в (3) описывает систему изолированных и периодически расположенных в плоскости коллектора пятен.

Тройная сумма в (3)

$$\sum_{n_z=1}^{\nu_a} n_z \sum_{m_x, m_y=-\infty}^{+\infty} S(R_\perp) \tag{5}$$

представляет результат наложения пятен от разных плоских подрешеток, полное число которых равно ν_a. Каждая из этих подрешеток дает пятна с разными периодами, шириной и интенсивностью.

Специальная функция $S(R_\perp$ представляет результат распределения интенсивности в пятне, даваемом одним атомом кристалла, находящимся в подрешетке с номером n_z и удаленным от оси z на расстояние $|m_x \mathbf{a}_x + m_y \mathbf{a}_y|$. Фактор $|z|/n_z a_z$ указывает на увеличение масштабов при проектировании пучком плоских подрешеток на плоскость коллектора.

Специальная функция $S(R_\perp)$ содержит информацию об основных параметрах явления рассеяния частиц пучка кристаллом: силовое взаимодействие между частицами пучка и атомами кристалла, включающее зависимость от кинетической энергии частиц пучка; периоды кристалла a_x, a_y, a_z; величина суммарного теплового разброса атомов около узлов кристалла и гауссовский разброс центра расхождения пучка

$$\langle r_\perp^2 \rangle = \frac{\theta}{U_{aa}} \left(\int\limits_{(\Omega)} \rho \, d\mathbf{r} \right)^{-1} + \frac{\theta}{W_{aa}}, \tag{6}$$

где U_{aa} и W_{aa} — упругие коэффициенты, характеризующие потенциальные ямы узлов кристалла и центра источника.

Для включения в $K_f(|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|)$ параметра, зависящего от кинетической энергии движущихся частиц, используем экранированный потенциал сил отталкивания в модели Томаса—Ферми, вводя в него непроницаемую сферу радиуса r_0 и полагая

$$K_f(r) = \begin{cases} \frac{G}{r} \exp(-\varkappa r), & r \geqslant r_0, \\ \infty, & r < r_0, \end{cases}$$
$$\frac{G}{r_0} \exp(-x r_0) = \frac{m v_{\text{кр}}^2}{2}, \quad |\mathbf{v}| < |\mathbf{v}_{\text{кр}}|, \tag{7}$$

где для ионов $G = Z_1 Z_2 e^2$, $\varkappa^{-1} = a_B \cdot 0{,}8853 (Z_1^{2/3} + Z_2^{2/3})^{-\frac{1}{2}}$, для атомов указанные параметры верны по порядку величины; выступающее условие требует существования верхней границы спектра скоростей частиц пучка ($v_{\text{кр}}$).

Было бы более точным использовать некоторый спектр значений параметра r_0. Внутри указанной сферы устраняются все величины, связанные с движущимися частицами. В частности, Фурье-образ взаимодействия частицы пучка со всем кристаллом должен содержать обрезывающий параметр r_0

$$\sigma_f(k_\perp) = 4\pi Z_1 Z_2 e^2 \int\limits_{r_0}^{\infty} e^{-xs} \frac{\sin k_\perp s}{k_\perp s} s \, ds. \tag{8}$$

Подставив (8) в выражение (4), для специальной функции $S(R_\perp)$ приходим к основному двойному интегралу теории:

$$S(R_\perp) = -4\pi Z_1 Z_2 e^2 \int_{r_0}^{\infty} e^{-\varkappa s}\, ds \int_0^{\infty} k_\perp^2 e^{-\frac{1}{2}\langle r_\perp^2\rangle k_\perp^2} J_0\left(k_\perp R_\perp \frac{n_z a_z}{|z|}\right) \sin k_\perp s\, dk_\perp. \tag{9}$$

Здесь мы воспользовались абсолютной сходимостью выступающих интегралов.

Если в окрестности центра пятна ($R_\perp \sim 0$) функция $S(R_\perp)>0$, то на основании (3) будет иметь место усиление интенсивности рассеяния над фоном ($\overset{(1)}{\rho_f}>0$), что соответствует пятну Венера. В центре пятна $R_\perp = 0$, $J_0\left(k_\perp R_\perp \frac{n_z a_z}{|z|}\right) = 1$ и внутренний интеграл в (9) сводится к специальной функции $I(\mu)$:

$$\int_0^{\infty} k_\perp^2 e^{-\frac{1}{2}\langle r_\perp^2\rangle k_\perp^2} \sin k_\perp s\, dk_\perp = \frac{dI(\mu)}{d\mu}, \quad \left(\mu = s\left(\frac{1}{2}\langle r_\perp^2\rangle\right)^{-\frac{1}{2}}\right) \tag{10}$$

$$I(\mu) = -\int_0^{\infty} x e^{-x^2} \cos \mu x\, dx.$$

Асимптотическое поведение этой функции при больших и малых значениях μ имеет следующий вид:

$$I(\mu) \to \begin{cases} -\dfrac{1}{2}, & \text{при } \mu \to 0 \\ \dfrac{1}{\mu^2}, & \text{при } \mu \to \infty \end{cases}.$$

μ	$I(\mu)$
0	—0,5
1	—0,286
1,5708	—0,082
2	0,043
2,5	0,121
3	0,142
4	0,105
5	0,059
6	0,032
7,854	0,017
10	0,0103

Значения функции $I(\mu)$ приведены в таблице. Как видно из этой таблицы, функция $I(\mu)$ положительна для всех значений $\mu > 1{,}57$, а ее производная $I'(\mu) = dI(\mu)/d\mu$ отрицательна для всех $\mu \geqslant 3$.

Функция $S(R_\perp)$ при $R_\perp = 0$ выражается через функцию $I'(\mu)$ следующим образом:

$$S(0) = -4\pi Z_1 Z_2 e^2 \left(\frac{2}{\langle r_\perp^2\rangle}\right)^{1/2} \int_{r_0\left(\frac{2}{\langle r_\perp^2\rangle}\right)^{1/2}}^{\infty} I'(\mu) \exp\left[-\left(\frac{\langle r_\perp^2\rangle}{2}\right)^{1/2} \varkappa\mu\right] d\mu. \tag{11}$$

Заключаем, что достаточным условием положительности функции $S(0)$ является требование

$$r_0 \geqslant 3\left(\frac{1}{2}\langle r_\perp^2\rangle\right)^{1/2}. \tag{12}$$

При выполнении условия (12) получаем следующую формулу для глубины пятна:

$$\rho_l^{(1)}(\mathbf{r}, t)\big|_{R_\perp=0} = \left(\int\limits_{(\Omega)} \rho\, d\mathbf{r}\right) \frac{1}{m\,|z|^2}\, \frac{a_z}{2\pi} \int\limits_{\frac{|\mathbf{r}|}{t}}^{\infty} \frac{1}{\xi}\, \Phi(\xi)\, d\xi \sum_{n_z=1}^{\nu_a} n_z S(0) > 0.$$

Таким образом, если в силах взаимодействия между частицами пучка и атомами кристалла доминирующими являются силы отталкивания при наличии непроницаемых сфер вокруг атомов кристалла и если радиус непроницаемых сфер удовлетворяет условию (12), имеет место не блокировка, а усиление интенсивности частиц в тех местах коллектора, которые приходятся на центры лунок.

Доказательство изменения знака интенсивности проведено только для центра пятна. Однако оно остается справедливым и в некоторой окрестности этого центра, окрестности достаточно большого радиуса, чтобы играть роль в эксперименте.

В самом деле, для этого необходимо, чтобы в интеграле (9) функцию Бесселя $J_0(k_0 R_\perp n_z a_z/|z|)$ можно было бы аппроксимировать единицей даже в областях, где ее аргумент отличен от нуля. Это возможно, если эффективная ширина другого множителя в подынтегральном выражении (гауссовской функции $\exp\left[-\frac{1}{2}\langle r_\perp^2\rangle k_\perp^2\right]$) будет находиться внутри первого максимума функции Бесселя нулевого порядка. Для этого необходимо одновременное выполнение двух неравенств

$$\left(\frac{1}{2}\langle r_\perp^2\rangle\right)^{1/2} k_\perp > 1,$$

$$k_\perp\, \delta r_\perp \frac{n_z a_z}{|z|} \leqslant 2{,}405,$$

что осуществимо при достаточно малом значении радиуса окрестности вокруг центра пятна ($\delta r_\perp$). Находим:

$$\delta r_\perp \leqslant \left(\frac{1}{2}\langle r_\perp^2\rangle\right)^{1/2} \frac{2{,}405\,|z|}{n_z a_z}.$$

Полагая $\left(\frac{1}{2}\langle r_\perp^2\rangle\right)^{1/2}/a_z \sim 10^{-1}$, $|z| \sim 10$ см, $n_z \sim 5$, получаем $\delta r_\perp \leqslant$ $\leqslant 0{,}5$ см, что является достаточным для того, чтобы играть заметную роль в эксперименте.

При другом пределе $r_0 = 0$ имеем

$$S(R_\perp) \equiv 2\pi Z_1 Z_2 e^2 \varkappa^2 S(a, X, 0);$$

$$S(a, X, 0) = -\frac{1}{2} e^{-\frac{X^2}{4a}} + e^a \int\limits_a^{\infty} e^{-t-\frac{X^2}{4t}} \frac{dt}{t}; \qquad a = \frac{1}{2}\langle r_\perp^2\rangle \varkappa^2;$$

$$X = R_\perp \frac{n_z a_z}{|z|} \varkappa = \left|\mathbf{r}_\perp + (m_x \mathbf{a}_x + m_y \mathbf{a}_y) \frac{|z|}{n_z a_z}\right| \cdot \frac{n_z a_z}{|z|} \varkappa.$$

Эта функция исследована в [8]. Ее асимптотическое поведение в окрестности центра и на периферии пятна такое:

$$S(a, X, 0) \to \begin{cases} -\dfrac{1}{a^2} e^{-\frac{X^2}{4a}} & \text{при } X \to 0 \\ 2e^a K_0(X) & \text{при } X \to \infty \end{cases}$$

где $K_0(t)$ — функция Макдональда. В этом случае функция $S(R_\perp)$ описывает характерную для блокировки ионов «лунку с ореолом». В частности, в отличие от предыдущего случая, $S(0)<0$.

В итоге приходим к заключению, что при изменении радиуса непроницаемых сфер, зависящего от кинетической энергии движущихся частиц, в отталкивательном потенциале пятна Венера по крайней мере в окрестности своего центра переходят в блокировочные лунки при переходе r_0 через критическое значение $r_0 \sim 3\left(\frac{1}{2}\langle r_\perp^2\rangle\right)^{1/2}$. При этом в обоих случаях полностью сохраняется статистический механизм трансляции частиц через кристалл.

ЛИТЕРАТУРА

1. Wehner G. K. «Phys. Rev.», 102, 690, 1956.
2. Юрасова В. Е. ЖТФ, 28, 1966, 1958.
3. Томпсон М. Дефекты и радиационные повреждения в металлах. М., 1971.
4. Юрасова В. Е., Бржезинский В. А., Иванов Г. М. ЖЭТФ, 47, вып. 2 (8) 473, 1964.
5. Тулинов А. Ф. ДАН СССР, 162, 546, 1965.
6. Тулинов А. Ф. «Успехи физических наук», 87, вып. 4, 585, 1965.
7. Томпсон М. «Успехи физических наук», 99, вып. 2, 297, 1969.
8. Власов А. А., Кураев В. Н. «Вестн. Моск. ун-та», физ., астрон., 13, № 3, 328, 1972.
9. Власов А. А., Кураев В. Н. «Вестн. Моск. ун-та», физ., астрон., 13, № 4, 471, 1972.
10. Власов А. А., Кураев В. Н. «Вестн. Моск. ун-та», физ., астрон., 13, № 4, 431, 1972.
11. Власов А. А. «Теоретическая и математическая физика», 5, № 3, 388, 1970.
12. Власов А. А. Статистические функции распределения. М., 1966.

Поступила в редакцию
17.2 1973 г.

Кафедра
теоретической физики