Вестник
МОСКОВСКОГО УНИВЕРСИТЕТА
№ 6 — 1975

УДК 539.121.7

Н. М. САДЫКОВ

ВЗАИМООТНОШЕНИЕ БЛОКИРОВОЧНОГО ЭФФЕКТА И РЕЗЕРФОРДОВСКОГО РАССЕЯНИЯ В НЕЛОКАЛЬНО-СТАТИСТИЧЕСКОЙ ТЕОРИИ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ ЗАРЯЖЕННЫХ ЧАСТИЦ С МОНОКРИСТАЛЛОМ

Исследуется взаимоотношение эффектов блокировки и резерфордовского рассеяния в нелокально-статистической теории ориентационных эффектов Власова и Кураева. Получено решение исходной системы уравнений теории во втором приближении и показано, что резерфордовское рассеяние выступает во втором приближении, в то время как блокировочные эффекты получаются уже в первом приближении по отношению к заряду частиц пучка. Расчет произведен без учета экранирующего фактора.

§ 1. Постановка задачи и метод решения. Получение формул для второго приближения

В работах Власова и Кураева [1—4] развита статистическая теория взаимодействия быстрых заряженных частиц с монокристаллом и показано, что наблюдающиеся при этом эффекты можно изучать на основе уравнения Власова [5] и модели кристалла со свободно перемещающимися атомами.

Пусть источник заряженных частиц описывается функцией $Q(\mathbf{r}, \mathbf{v})$. $Q(\mathbf{r}, \mathbf{v})dt$ — плотность вероятности рождения частицы в точке $(\mathbf{r}, \mathbf{v})$ фазового пространства за время dt. Конкретный вид функции $Q(\mathbf{r}, \mathbf{v})$ зависит от физических условий, при которых рождаются частицы пучка.

В данной работе рассматривается рассеяние на монокристалле быстрых заряженных частиц, которые выбрасываются из источников, находящихся внутри монокристалла. Примером такого источника могут служить радиоактивные атомы, внедренные в кристаллическую решетку и испускающие заряженные, например, α-частицы. Другим примером являются возбужденные ядра, которые при переходе в невозбужденное состояние испускают заряженные частицы, например протоны. Такие ядра могут возникать при облучении кристалла высокоэнергетическими частицами. Во всех этих случаях можно говорить о рождении заряженных частиц такими источниками. В дальнейшем мы будем предполагать, что $Q(\mathbf{r}, \mathbf{v})$ можно представить в виде $Q(\mathbf{r}, \mathbf{v}) = q\Phi(|\mathbf{v}|)Q(\mathbf{r})$.

Система уравнений для функции распределения частиц пучка $f(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t)$, опирающаяся на статистическое описание частиц пучка и нелокальную теорию кристалла, будет

$$\frac{\partial f(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t)}{\partial t} + \mathbf{v}\nabla_{\mathbf{r}} f - \frac{1}{m} \nabla_{\mathbf{r}} \{U_f(\mathbf{r}) + Ze\varphi(\mathbf{r}, t)\} \cdot \nabla_{\mathbf{v}} f = Q(\mathbf{r}, \mathbf{v}),$$

$$U_f(\mathbf{r}) = \int K_f(|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|)\rho(\mathbf{r}')\,d\mathbf{r}', \tag{1}$$

$$\rho(\mathbf{r}) = C\exp\left\{-\frac{U_f(\mathbf{r})}{\theta}\right\},$$

$$\Delta\varphi = -4\pi Ze \int\limits_{(\infty)} f(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t)\,d\mathbf{v},$$

где $U_f(\mathbf{r})$ — потенциальная энергия взаимодействия частицы пучка, находящейся в точке $\mathbf{r}$, со всем кристаллом, θ — температура кристалла, m — масса, а Ze — заряд частицы пучка, $C \equiv \mathrm{const}$, $K_f(|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|)$ — ядро, описывающее взаимодействие между частицами пучка и всем кристаллом.

Для случая рассеяния заряженных частиц высокой энергии кристаллом можно пользоваться конкретизацией $K_f(|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|)$ в форме экранированного кулоновского потенциала

$$K_f(|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|) = \frac{ZZ_1e^2}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|}\exp(-\varkappa|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|),$$

где Ze и Z_1e — заряды частиц пучка и атомных ядер кристалла, а $\varkappa^{-1} = a_B \cdot 0{,}8853\ (Z^{2/3} + Z_1^{2/3})^{-1/2}$ (a_B — боровский радиус).

В [2] показано, что решение системы (1) можно искать в виде ряда по параметру, пропорциональному заряду частиц пучка. Полагая

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

получим выражение для плотности распределения частиц в первом приближении

$$\tilde{\rho}_f^{\mathrm{I}}(\mathbf{r}, \mathbf{r}_0, t) = \int\limits_{(\infty)} \tilde{f}^{\mathrm{I}}(\mathbf{r}, \mathbf{r}_0, \mathbf{v}, t)\,d\mathbf{v},$$

испущенных точечным источником

$$Q(\mathbf{r}, \mathbf{v}) = q\Phi(|\mathbf{v}|)\,\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_0):$$

$$\tilde{\rho}_f^{\mathrm{I}}(\mathbf{r}, \mathbf{r}_0, t) = \frac{q}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}_0|^2} \int\limits_{\frac{|\mathbf{r}-\mathbf{r}_0|}{t}}^{\infty} \Phi(\xi)\,\xi d\xi + \frac{q}{m} \int\limits_{\frac{|\mathbf{r}-\mathbf{r}_0|}{t}}^{\infty} \Phi(\xi)\,\frac{d\xi}{\xi} \int\limits_0^1 \Delta U_f\,[(\mathbf{r} - \mathbf{r}_0)(1 - \eta) + \mathbf{r}_0]\,\eta(1 - \eta)\,d\eta. \tag{2}$$

Функцией $\tilde{\rho}_f^{\mathrm{I}}(\mathbf{r}, \mathbf{r}_0, t)$ хорошо объясняются эффекты блокирования пучка падающих частиц монокристаллом, но не описывается резерфордовское рассеяние.

В данной работе исследуются взаимоотношения блокировочного эффекта и резерфордовского рассеяния в нелокально-статистической теории взаимодействия заряженных частиц с кристаллом. Для этого получаем решение системы (1) во втором приближении, предполагая, что взаимодействием частиц пучка между собой можно пренебречь. Для этого система (1) упрощается и принимает вид

$$\begin{aligned} &\frac{\partial f_0(\mathbf{r},\ \mathbf{v},\ t)}{\partial t} + \mathbf{v}\nabla_{\mathbf{r}} f_0 = q\Phi(|\mathbf{v}|)\,Q(\mathbf{r}),\\ &\frac{\partial f_1(\mathbf{r},\ \mathbf{v},\ t)}{\partial t} + \mathbf{v}\nabla_{\mathbf{r}} f_1 = \frac{1}{m}\nabla_{\mathbf{r}} U_f \nabla_{\mathbf{v}} f_0,\\ &\frac{\partial f_2(\mathbf{r},\ \mathbf{v},\ t)}{\partial t} + \mathbf{v}\nabla_{\mathbf{r}} f_2 = \frac{1}{m}\nabla_{\mathbf{r}} U_f \nabla_{\mathbf{v}} f_1,\\ &\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots \end{aligned} \tag{3}$$

Так как (3) — система линейных уравнений, то надо сначала найти решение, вызванное малым объемом источника, т. е. представить источник и решение в виде

$$Q(\mathbf{r}) = \int_{(\infty)} d\mathbf{r}_0 Q(\mathbf{r}_0)\,\delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}_0), \tag{4}$$

$$\widetilde{f}(\mathbf{r},\ \mathbf{v},\ t) = \int_{(\infty)} d\mathbf{r}_0 Q(\mathbf{r}_0)\,\widetilde{f}(\mathbf{r},\ \mathbf{r}_0,\ \mathbf{v},\ t).$$

Тогда для $\widetilde{f} = \widetilde{f}_0 + \varepsilon\widetilde{f}_1 + \varepsilon^2\widetilde{f}_2 + \ldots$ получим систему уравнений

$$\begin{aligned} &\frac{\partial \widetilde{f}_0(\mathbf{r},\ \mathbf{r}_0,\ \mathbf{v},\ t)}{\partial t} + \mathbf{v}\nabla_{\mathbf{r}}\widetilde{f}_0 = q\Phi(|\mathbf{v}|)\,\delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}_0),\\ &\frac{\partial \widetilde{f}_1(\mathbf{r},\ \mathbf{r}_0,\ \mathbf{v},\ t)}{\partial t} + \mathbf{v}\nabla_{\mathbf{r}}\widetilde{f}_1 = \frac{1}{m}\nabla_{\mathbf{r}} U_f \nabla_{\mathbf{v}}\widetilde{f}_0,\\ &\frac{\partial \widetilde{f}_2(\mathbf{r},\ \mathbf{r}_0,\ \mathbf{v},\ t)}{\partial t} + \mathbf{v}\nabla_{\mathbf{r}}\widetilde{f}_2 = \frac{1}{m}\nabla_{\mathbf{r}} U_f \nabla_{\mathbf{v}}\widetilde{f}_1,\\ &\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots \end{aligned} \tag{5}$$

Так как решением дифференциального уравнения $\frac{\partial \widetilde{f}}{\partial t} + \mathbf{v}\nabla_{\mathbf{r}}\widetilde{f} = Q(\mathbf{r},\ \mathbf{v},\ t)$ является функция

$$\widetilde{f}(\mathbf{r},\ \mathbf{v},\ t) = \int_0^t Q(\mathbf{r}-\mathbf{v}(t-t_1),\ \mathbf{v},\ t_1)\,dt_1,$$

то из (5) находим

$$\widetilde{f}_0(\mathbf{r},\ \mathbf{r}_0,\ \mathbf{v},\ t) = \int_0^t q\Phi(|\mathbf{v}|)\,\delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}_0-\mathbf{v}(t-t_3))\,dt_3,$$

$$\widetilde{f}_1(\mathbf{r},\ \mathbf{r}_0,\ \mathbf{v},\ t) = \int_0^t \frac{1}{m}\nabla U_f(\mathbf{r}-\mathbf{v}(t-t_2))\,\nabla_{\mathbf{v}_2}\Big|_{\mathbf{v}_2=\mathbf{v}} \int_0^{t_2} \delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}_0-\mathbf{v}(t-t_2)- -\mathbf{v}_2(t_2-t_3))\,q\Phi(|\mathbf{v}_2|)\,dt_2 dt_3,$$

$\nabla_{\mathbf{v}_2}|_{\mathbf{v}_2=\mathbf{v}}$ — символическая запись операции дифференцирования выражения, стоящего за этим оператором, по $\mathbf{v}_2$, после чего надо положить $\mathbf{v}_2=\mathbf{v}$.

Подставляя это выражение для $\tilde{f}_1(\mathbf{r}, \mathbf{r}_0, \mathbf{v}, t)$ в последнее уравнение системы (5), получим

$$\begin{gathered}
\tilde{f}_2(\mathbf{r}, \mathbf{r}_0, \mathbf{v}, t) = \frac{q}{m^2}\int_0^t dt_1 \int_0^{t_1} dt_2 \int_0^{t_2} dt_3 \dot{\nabla} U_f(\mathbf{r}-\mathbf{v}(t-t_1)) \times \\
\times \dot{\nabla}_{\mathbf{v}_1}\Big|_{\mathbf{v}_1=\mathbf{v}} \{\ddot{\nabla} U_f(\mathbf{r}-\mathbf{v}(t-t_1)-\mathbf{v}_1(t_1-t_2)) \times \\
\times \ddot{\nabla}_{\mathbf{v}_2}\Big|_{\mathbf{v}_2=\mathbf{v}_1} [\Phi(|\mathbf{v}_2|)\,\delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}_0-\mathbf{v}(t-t_1)-\mathbf{v}_1(t_1-t_2)-\mathbf{v}_2(t_2-t_3))]\},
\end{gathered} \tag{6}$$

∇ — оператор дифференцирования по всему аргументу функции, стоящей непосредственно за этим оператором.

Векторы, над которыми проставлено одинаковое количество точек, перемножаются скалярно друг на друга (например, $\dot{\mathbf{a}}\ddot{\mathbf{b}}\dot{\mathbf{c}}\ddot{\mathbf{d}}=(\mathbf{ac})(\mathbf{bd})$, где $\mathbf{a}$, $\mathbf{b}$, $\mathbf{c}$, $\mathbf{d}$ — произвольные векторы).

Плотность распределения рассеянных частиц $\tilde{\rho}_f^{(2)}(\mathbf{r}, \mathbf{r}_0, t)$ получим по формуле

$$\tilde{\rho}_f^{(2)}(\mathbf{r}, \mathbf{r}_0, t) = \int_{(\infty)} \tilde{f}_2(\mathbf{r}, \mathbf{r}_0, \mathbf{v}, t)\,d\mathbf{v},$$

т. е.

$$\begin{gathered}
\tilde{\rho}_f^{(2)}(\mathbf{r}, \mathbf{r}_0, t) = \frac{q}{m^2}\int_{(\infty)} d\mathbf{v} \int_0^t dt_1 \int_0^{t_1} dt_2 \int_0^{t_2} dt_3\, \dot{\nabla} U_f(\mathbf{r}-\mathbf{v}(t-t_1)) \times \\
\times \dot{\nabla}_{\mathbf{v}_1}\Big|_{\mathbf{v}_1=\mathbf{v}} \{\ddot{\nabla} U_f(\mathbf{r}-\mathbf{v}(t-t_1)-\mathbf{v}_1(t_1-t_2)) \times \\
\times \ddot{\nabla}_{\mathbf{v}_2}\Big|_{\mathbf{v}_2=\mathbf{v}_1} [\Phi(|\mathbf{v}_2|)\,\delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}_0-\mathbf{v}(t-t_1)-v_1(t_1-t_2)-v_2(t_2-t_3))]\}.
\end{gathered} \tag{7}$$

Так как под интегралом имеется δ-функция $\delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}_0-\mathbf{v}(t-t_1)-\mathbf{v}_1(t_1-t_2)-\mathbf{v}_2(t_2-t_3))$, то в (7) можно произвести интегрирование по скоростям. В результате, после приведения подобных членов, получим

$$\begin{gathered}
\tilde{\rho}_f^{(2)}(\mathbf{r}, \mathbf{r}_0, t) = \frac{q}{m^2}\int_0^t dt_1 \int_0^{t_1} dt_2 \int_0^{t_2} dt_3 \frac{(t-t_1)}{(t-t_3)^5} \{\Phi\cdot(t_2-t_3) \times \\
\times [(t-t_2)(t_1-t_3)\Delta U_{f_1}\cdot\Delta U_f + (t-t_1)(t_1-t_3)\ddot{\nabla}\Delta U_{f_1}\cdot\ddot{\nabla} U_f + \\
+ (t-t_2)(t_2-t_3)\dot{\nabla} U_{f_1}\cdot\dot{\nabla}\Delta U_f + (t-t_1)(t_2-t_3)\dot{\nabla}\ddot{\nabla} U_{f_1}\cdot\dot{\nabla}\ddot{\nabla} U_f] + \\
+ \dot{\nabla}\Phi[(t_2-t_3)(t-t_2)\ddot{\nabla} U_{f_1}\cdot\dot{\nabla}\ddot{\nabla} U_f + (t_1-t_3)(t-t_2)\Delta U_{f_1}\cdot\dot{\nabla} U_f + \\
+ (t-t_1)(t_2-t_3)\dot{\nabla}\ddot{\nabla} U_{f_1}\cdot\ddot{\nabla} U_f + (t-t_2)(t_2-t_3)\dot{\nabla} U_{f_1}\cdot\Delta U_f] + \\
+ \dot{\nabla}\ddot{\nabla}\Phi(t-t_2)\dot{\nabla} U_{f_1}\cdot\ddot{\nabla} U_f\};
\end{gathered} \tag{8}$$

здесь

$$\Phi \equiv \Phi\left(\left|\frac{\mathbf{r}-\mathbf{r}_0}{t-t_3}\right|\right), \text{ а } \nabla\Phi \equiv \nabla_{\frac{\mathbf{r}-\mathbf{r}_0}{t-t_3}} \Phi\left(\left|\frac{\mathbf{r}-\mathbf{r}_0}{t-t_3}\right|\right),$$

$$U_{f_1} \equiv U_f\left((\mathbf{r}-\mathbf{r}_0)\frac{t_1-t}{t-t_3}+\mathbf{r}\right),$$

$$U_f \equiv U_f\left((\mathbf{r}-\mathbf{r}_0)\frac{t_2-t}{t-t_3}+\mathbf{r}\right).$$

Для произвольной функции $\varphi(t_1, t_2, t_3)$ справедливо соотношение

$$\int_0^t dt_1 \int_0^{t_1} dt_2 \int_0^{t_2} dt_3 \varphi(t_1, t_2, t_3) =$$

$$= \int_0^t dt_3 \int_{t_3}^t dt_2 \int_{t_2}^t dt_1 \varphi(t_1, t_2, t_3).$$

Поэтому можно написать, что

$$\tilde{\rho}_f^{(2)}(\mathbf{r}, \mathbf{r}_0, t) = \frac{q}{m^2}\int_0^t \frac{dt_3}{(t-t_3)^5}\int_{t_3}^t dt_2 \int_{t_2}^t dt_1 (t-t_1)\mathcal{R},$$

где через $\mathcal{R}$ обозначено выражение, стоящее в фигурных скобках в (8). Сделав в этом выражении замену переменных

$$\eta = \frac{t-t_2}{t-t_3}, \quad \eta_1 = \frac{t-t_1}{t-t_3}, \quad \xi = \frac{|\mathbf{r}-\mathbf{r}_0|}{t-t_3},$$

получим

$$\tilde{\rho}_f^{(2)}(\mathbf{r}, \mathbf{r}_0, t) = \frac{q}{m^2}|\mathbf{r}-\mathbf{r}_0|^2 \int_{\left|\frac{\mathbf{r}-\mathbf{r}_0}{t}\right|}^{\infty} \Phi(\xi)\frac{d\xi}{\xi^3}\int_0^1 (1-\eta)\,d\eta \int_0^{\eta} \eta_1 d\eta_1 \times$$

$$\times [\eta(1-\eta_1)\Delta U_{f_1}\Delta U_f + \eta_1(1-\eta_1)\dot{\nabla}\Delta U_{f_1}\cdot\dot{\nabla}U_f +$$

$$+ \eta(1-\eta)\dot{\nabla}U_{f_1}\dot{\nabla}\Delta U_f + \eta_1(1-\eta)\dot{\nabla}\ddot{\nabla}U_{f_1}\cdot\dot{\nabla}\ddot{\nabla}U_f] +$$

$$+ \frac{q}{m^2}|\mathbf{r}-\mathbf{r}_0| \int_{\frac{|\mathbf{r}-\mathbf{r}_0|}{t}}^{\infty} \dot{\nabla}_\xi\Phi(\xi)\frac{d\xi}{\xi^2}\int_0^1 d\eta \int_0^{\eta}\eta_1 d\eta_1 \times$$

$$\times [\eta(1-\eta)\ddot{\nabla}U_{f_1}\cdot\dot{\nabla}\ddot{\nabla}U_f + \eta(1-\eta_1)\Delta U_{f_1}\cdot\dot{\nabla}U_f +$$

$$+ \eta_1(1-\eta)\dot{\nabla}\ddot{\nabla}U_{f_1}\ddot{\nabla}U_f + \eta(1-\eta)\dot{\nabla}U_{f_1}\cdot\Delta U_f] +$$

$$+ \frac{q}{m^2}\int_{\frac{|\mathbf{r}-\mathbf{r}_0|}{t}}^{\infty} \dot{\nabla}_\xi\ddot{\nabla}_\xi\Phi(\xi)\frac{d\xi}{\xi}\int_0^1 d\eta\eta \int_0^{\eta} d\eta_1\eta_1 \dot{\nabla}U_{f_1}\cdot\ddot{\nabla}U_f, \qquad (9)$$

где

$$U_{f_1} \equiv U_f((\mathbf{r}-\mathbf{r}_0)(1-\eta_1)+\mathbf{r}_0),$$

$$U_f \equiv U_f((\mathbf{r}-\mathbf{r}_0)(1-\eta)+\mathbf{r}_0).$$

Дальнейшие преобразования сделаем, учитывая, что

$$\nabla_\xi\Phi(\xi) = \Phi'(\xi)\frac{\xi}{\xi},$$

а так как

$\frac{\boldsymbol{\xi}}{\xi} = \frac{\mathbf{r}-\mathbf{r}_0}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}_0|} = \mathbf{n}$ — единичный вектор в направлении вектора $\mathbf{r}-\mathbf{r}_0$, то

$$\nabla_\xi \Phi(\xi) = \Phi'(\xi)\,\mathbf{n}, \quad \left(\Phi'(\xi) \equiv \frac{d}{d\xi}\Phi(\xi)\right);$$

$$\dot{\nabla}_\xi \ddot{\nabla}_\xi \Phi(\xi) = \Phi''(\xi)\,\dot{\mathbf{n}}\ddot{\mathbf{n}} - \Phi'(\xi)\,[\dot{\mathbf{n}}\ddot{\mathbf{n}} - \dot{\nabla}_\xi(\ddot{\boldsymbol{\xi}})]\,\frac{1}{\xi},$$

причем $\dot{\mathbf{a}}\dot{\nabla}_\xi(\ddot{\boldsymbol{\xi}})\ddot{\mathbf{b}} = \mathbf{ab}$, где $\mathbf{a}$ и $\mathbf{b}$ — произвольные вектора;

$$\int\limits_{\frac{|\mathbf{r}-\mathbf{r}_0|}{t}}^{\infty} \dot{\nabla}_\xi \Phi(\xi)\,\frac{d\xi}{\xi^2} = 2\dot{\mathbf{n}} \int\limits_{\frac{|\mathbf{r}-\mathbf{r}_0|}{t}}^{\infty} \Phi(\xi)\,\frac{d\xi}{\xi^3},$$

$$\int\limits_{\frac{|\mathbf{r}-\mathbf{r}_0|}{t}}^{\infty} \dot{\nabla}_\xi \ddot{\nabla}_\xi \Phi(\xi)\,\frac{d\xi}{\xi} = 2\dot{\nabla}_\xi(\ddot{\boldsymbol{\xi}}) \int\limits_{\frac{|\mathbf{r}-\mathbf{r}_0|}{t}}^{\infty} \Phi(\xi)\,\frac{d\xi}{\xi^3}.$$

Тогда, принимая также во внимание и формулу (2), получим решение системы (1) во втором приближении для плотности распределения $\tilde{\rho}_f^{\mathrm{II}}(\mathbf{r}, \mathbf{r}_0, t)$ частиц, испущенных источником $Q(\mathbf{r}, \mathbf{v}) = q\Phi(|\mathbf{v}|)\,\delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}_0)$:

$$\begin{aligned}
\tilde{\rho}_f^{\mathrm{II}}(\mathbf{r}, \mathbf{r}_0, t) &= \frac{q}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}_0|^2} \int\limits_{\frac{|\mathbf{r}-\mathbf{r}_0|}{t}}^{\infty} \Phi(\xi)\,\xi d\xi + \\
&+ \frac{q}{m} \int\limits_{\frac{|\mathbf{r}-\mathbf{r}_0|}{t}}^{\infty} \Phi(\xi)\,\frac{d\xi}{\xi} \int\limits_0^1 \Delta U_f \cdot \eta(1-\eta)\,d\eta + \\
&+ \frac{q}{m^2} \int\limits_{\frac{|\mathbf{r}-\mathbf{r}_0|}{t}}^{\infty} \Phi(\xi)\,\frac{d\xi}{\xi^3} \Big\{ |\mathbf{r}-\mathbf{r}_0|^2 \int\limits_0^1 (1-\eta)\,d\eta \int\limits_0^{\eta} \eta_1 d\eta_1 \times \\
&\times [\eta(1-\eta_1)\,\Delta U_{f_1} \cdot \Delta U_f + \eta_1(1-\eta_1)\,\nabla\Delta U_{f_1} \cdot \nabla U_f + \\
&+ \eta(1-\eta)\,\nabla U_{f_1} \cdot \nabla\Delta U_f + \eta_1(1-\eta)\,\dot{\nabla}\ddot{\nabla} U_{f_1} \cdot \dot{\nabla}\ddot{\nabla} U_f] + \\
&+ 2|\mathbf{r}-\mathbf{r}_0| \int\limits_0^1 d\eta \int\limits_0^{\eta} \eta_1 d\eta_1\,[\eta(1-\eta)\,\dot{\nabla} U_{f_1} \cdot (\mathbf{n}\nabla)\,\dot{\nabla} U_f + \\
&+ \eta(1-\eta_1)\,\Delta U_{f_1} \cdot (\mathbf{n}\nabla)\,U_f + \eta_1(1-\eta)\,\dot{\nabla} U_f \cdot (\mathbf{n}\nabla)\,\dot{\nabla} U_{f_1} + \\
&+ \eta(1-\eta)\,(\mathbf{n}\nabla)\,U_{f_1} \cdot \Delta U_f] + 2\int\limits_0^1 \eta d\eta \int\limits_0^{\eta} \eta_1 d\eta_1\,\nabla U_{f_1} \cdot \nabla U_f \Big\},
\end{aligned} \tag{10}$$

где

$$U_{f_1} \equiv U_f((\mathbf{r}-\mathbf{r}_0)(1-\eta_1) + \mathbf{r}_0),$$

$$U_f \equiv U_f((\mathbf{r}-\mathbf{r}_0)(1-\eta) + \mathbf{r}_0), \quad \mathbf{n} = \frac{\mathbf{r}-\mathbf{r}_0}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}_0|}.$$

Интегралы по η в формуле (10) не зависят от t. От t в этой формуле зависят лишь интегралы

$$\int\limits_{\frac{|\mathbf{r}-\mathbf{r}_0|}{t}}^{\infty} \Phi(\xi)\,\xi d\xi, \qquad \int\limits_{\frac{|\mathbf{r}-\mathbf{r}_0|}{t}}^{\infty} \Phi(\xi)\,\frac{d\xi}{\xi}, \qquad \int\limits_{\frac{|\mathbf{r}-\mathbf{r}_0|}{t}}^{\infty} \Phi(\xi)\,\frac{d\xi}{\xi^3},$$

которые при $t\to\infty$ и $|\mathbf{r}-\mathbf{r}_0|<\infty$ переходят в интегралы

$$\int\limits_0^{\infty} \Phi(\xi)\,\xi d\xi, \qquad \int\limits_0^{\infty} \Phi(\xi)\,\frac{d\xi}{\xi}, \qquad \int\limits_0^{\infty} \Phi(\xi)\,\frac{d\xi}{\xi^3}. \qquad (*)$$

Очевидно, сходимость или расходимость этих интегралов полностью определяется функцией $\Phi(\xi)$, которая есть не что иное, как функция распределения по скоростям частиц, испущенных источником заряженных частиц. Практически наиболее часто встречаются и поэтому наиболее важен случай, когда функция распределения по скоростям $\Phi(\xi)$ имеет δ-образный $\Phi(\xi)=\frac{1}{4\pi v_0^2}\,\delta(\xi-v_0)$ или близкий к нему вид. Для такого класса функций $\Phi(\xi)$ интегралы $(*)$, очевидно, сходятся.

§ 2. Условия выступления блокировочного эффекта и резерфордовского рассеяния

Для анализа полученного решения (10) рассмотрим частный случай, когда пучок частиц является моноэнергетическим, т. е. когда функция распределения по скоростям $\Phi(|\mathbf{v}|)$ имеет вид

$$\Phi(|\mathbf{v}|)=\frac{1}{4\pi v_0^2}\,\delta(|\mathbf{v}|-v_0).$$

Рассмотрим как $\tilde{\rho}_f^{\,\mathrm{II}}(\mathbf{r},\mathbf{r}_0,t)$ зависит от $\mathbf{r}$, $\mathbf{r}_0$, $\mathbf{v}_0$ на больших расстояниях от кристалла. В явном виде зависимость от $\mathbf{r}$ и $\mathbf{r}_0$ можно получить, рассматривая, например, второй член суммы в (10). От $\mathbf{r}$ и $\mathbf{r}_0$ зависит интеграл

$$J=\int\limits_0^1 d\eta\,(1-\eta)\,\Delta U_f\,((\mathbf{r}-\mathbf{r}_0)(1-\eta)+\mathbf{r}_0).$$

Сделаем замену переменной $\gamma=(1-\eta)|\mathbf{r}-\mathbf{r}_0|$ и примем во внимание, что $\frac{\mathbf{r}-\mathbf{r}_0}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}_0|}=\mathbf{n}$. Тогда

$$J=\frac{1}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}_0|^2}\int\limits_0^{|\mathbf{r}-\mathbf{r}_0|}\gamma d\gamma\left(1-\frac{\gamma}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}_0|}\right)\Delta U_f\,(\mathbf{n}\gamma+\mathbf{r}_0).$$

Мы изучаем распределение плотности частиц пучка на больших расстояниях $|\mathbf{r}-\mathbf{r}_0|$, гораздо бо́льших, чем путь $|\mathbf{r}_k-\mathbf{r}_0|$, проходимый пучком внутри кристалла ($\mathbf{r}_k$ — точка границы кристалла, лежащая на прямой, которая соединяет точки $\mathbf{r}$ и $\mathbf{r}_0$). Так как вне кристалла $\Delta U_f(\mathbf{r})=0$, как и $\nabla U_f(\mathbf{r})$, то

$$J \approx \frac{1}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}_0|^2} \int\limits_0^{|\mathbf{r}_k-\mathbf{r}_0|} d\gamma \cdot \gamma \Delta U_f (\mathbf{n}\gamma + \mathbf{r}_0) =$$

$$= \frac{1}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}_0|^2} Y_1(\mathbf{n},\ \mathbf{r}_0,\ \mathbf{r}_k,\ \{U_f\}), \tag{11}$$

где $Y_1(\mathbf{n},\ \mathbf{r}_0,\ \mathbf{r}_k,\ \{U_f\}) \equiv \int\limits_0^{|\mathbf{r}_k-\mathbf{r}_0|} \gamma d\gamma \Delta U_f (\mathbf{n}\gamma + \mathbf{r}_0)$ — выражение, зависящее только от $\mathbf{n}$, $\mathbf{r}_0$, $\mathbf{r}_k$ и функционально от U_f.

Подобным же образом можно выявить зависимость от $\mathbf{r}$ и $\mathbf{r}_0$ на больших расстояниях от кристалла и в других членах формулы (10). Тогда для моноэнергетического пучка

$$\widetilde{\rho}_f^{II}(\mathbf{r},\ \mathbf{r}_0,\ t) \approx \frac{q}{4\pi v_0} \frac{1}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}_0|^2} \left[1 + \left(\frac{1}{mv_0^2} Y_1 \right) (\mathbf{n},\ \mathbf{r}_0,\ \mathbf{r}_k,\ \{U_f\}) + \right.$$

$$\left. + \left(\frac{1}{mv_0^2} \right)^2 Y_2(\mathbf{n},\ \mathbf{r}_0,\ \mathbf{r}_k,\ \{U_f\},\ \{U_{f_1}\}) \right], \tag{12}$$

при $t > \frac{|\mathbf{r}-\mathbf{r}_0|}{v_0}$ и $|\mathbf{r}-\mathbf{r}_0| \gg |\mathbf{r}_k - \mathbf{r}_0|$ здесь

$$Y_2(\mathbf{n},\ \mathbf{r}_0,\ \mathbf{r}_k,\ \{U_f\},\ \{U_{f_1}\}) \equiv \int\limits_0^{|\mathbf{r}_k-\mathbf{r}_0|} \gamma d\gamma \int\limits_\gamma^{|\mathbf{r}_k-\mathbf{r}_0|} d\gamma_1 [\gamma_1 \Delta U_{f_1} \cdot \Delta U_f +$$

$$+ \gamma_1 \nabla \Delta U_{f_1} \cdot \nabla U_f + \gamma \nabla U_{f_1} \cdot \nabla \Delta U_f + \gamma \dot{\nabla} \ddot{\nabla} U_{f_1} \cdot \dot{\nabla} \ddot{\nabla} U_f] +$$

$$+ 2 \int\limits_0^{|\mathbf{r}_k-\mathbf{r}_0|} d\gamma \int\limits_\gamma^{|\mathbf{r}_k-\mathbf{r}_0|} d\gamma_1 [\gamma \nabla U_{f_1} \cdot (\mathbf{n}\nabla) \nabla U_f +$$

$$+ \gamma_1 \Delta U_{f_1} \cdot (\mathbf{n}\nabla) U_f + \gamma (\mathbf{n}\nabla) \nabla U_{f_1} \cdot \nabla U_f +$$

$$+ \gamma (\mathbf{n}\nabla) U_{f_1} \cdot \Delta U_f + \nabla U_{f_1} \cdot \nabla U_f],$$

$$(U_{f_1} \equiv U_f(\mathbf{n}\gamma_1 + \mathbf{r}_0),\quad U_f \equiv U_f(\mathbf{n}\gamma + \mathbf{r}_0)). \tag{13}$$

Введем величину $\bar{U}_f$, связанную с потенциалом U_f соотношением $U_f = ZZ_1 e^2 \bar{U}_f$. Тогда из (11) и (13) можно написать

$$\widetilde{\rho}_f^{II}(\mathbf{r},\ \mathbf{r}_0,\ t) \approx \frac{q}{4\pi v_0} \frac{1}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}_0|^2} \left[1 + \frac{zz_1 e^2}{mv_0^2} Y_1(\mathbf{n},\ \mathbf{r}_0,\ \mathbf{r}_k,\ \{\bar{U}_f\}) + \right.$$

$$\left. + \left(\frac{zz_1 e^2}{mv_0^2} \right)^2 Y_2(\mathbf{n},\ \mathbf{r}_0,\ \mathbf{r}_k,\ \{U_f\},\ \{U_{f_1}\}) \right]. \tag{14}$$

Из полученной формулы (14) видно, что при достаточно высоких энергиях частиц наиболее характерные особенности эффектов, наблюдающихся при прохождении частиц через монокристаллы, должны описываться уже первым приближением (3) к решению системы уравнений (1).

Применим формулу (10) к расчету частного случая, когда происходит рассеяние пучка параллельно падающих частиц на кулоновском потенциале, т. е. положим $U_f(\mathbf{r}) = \frac{zz_1 e^2}{|\mathbf{r}|}$.

Обозначив $\mathbf{R} = (\mathbf{r} - \mathbf{r}_0)(1 - \eta) + \mathbf{r}_0$, имеем $\Delta U_f(\mathbf{R}) = \Delta\left(\frac{zz_1e^2}{|\mathbf{R}|}\right) = 0$ во всех точках $\mathbf{R}$, кроме $\mathbf{R} = 0$ или, вводя угол ϑ между векторами $\mathbf{r}$ и $\mathbf{r}-\mathbf{r}_0$:

$$\Delta U_f(\mathbf{R}) = 0 \quad \text{при} \quad \vartheta \neq 0. \tag{15}$$

Учитывая (15) и сделав в интегралах выражения (10) замену переменных $\eta|\mathbf{r}-\mathbf{r}_0| = \gamma$, $\eta_1|\mathbf{r}-\mathbf{r}_0| = \gamma_1$, получим

$$\begin{aligned}
\tilde{\rho}_f^{\mathrm{II}}(\mathbf{r}, \mathbf{r}_0, t) = {} & \frac{1}{4\pi v_0}\frac{q}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}_0|^2}\Bigg\{1 + \\
& + \int_0^{|\mathbf{r}-\mathbf{r}_0|} d\gamma\left(1 - \frac{\gamma}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}_0|}\right)^2 \int_0^{\gamma} d\gamma_1\gamma_1^2 \times \\
& \times \dot{\nabla}\ddot{\nabla}\left(\frac{zz_1e^2}{|\mathbf{R}|}\right)\dot{\nabla}\ddot{\nabla}\left(\frac{zz_1e^2}{|\mathbf{R}_1|}\right) + \\
& + \frac{2}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}_0|}\Bigg[\int_0^{|\mathbf{r}-\mathbf{r}_0|} d\gamma\cdot\gamma\left(1 - \frac{\gamma}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}_0|}\right)\int_0^{\gamma} d\gamma_1\cdot\gamma_1 \times \\
& \times (\mathbf{n}\nabla)\nabla\left(\frac{zz_1e^2}{|\mathbf{R}|}\right)\cdot\nabla\left(\frac{zz_1e^2}{|\mathbf{R}_1|}\right) + \int_0^{|\mathbf{r}-\mathbf{r}_0|} d\gamma\left(1 - \frac{\gamma}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}_0|}\right)\times \\
& \times \int_0^{\gamma} d\gamma_1\cdot\gamma_1^2\nabla\left(\frac{zz_1e^2}{|\mathbf{R}|}\right)\cdot(\mathbf{n}\nabla)\nabla\left(\frac{zz_1e^2}{|\mathbf{R}_1|}\right)\Bigg] + \\
& + \frac{2}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}_0|^2}\int_0^{|\mathbf{r}-\mathbf{r}_0|} d\gamma\cdot\gamma\int_0^{\delta} d\gamma_1\cdot\gamma_1\nabla\left(\frac{zz_1e^2}{|\mathbf{R}|}\right)\nabla\left(\frac{zz_1e^2}{|\mathbf{R}_1|}\right)\Bigg\}.
\end{aligned} \tag{16}$$

$$(\mathbf{R} = (\mathbf{r} - \mathbf{r}_0)(1 - \eta) + \mathbf{r}_0, \quad \mathbf{R}_1 = (\mathbf{r} - \mathbf{r}_0)(1 - \eta_1) + \mathbf{r}_0).$$

Чтобы получить пучок частиц, падающих параллельно на рассеивающий центр, устремим $|\mathbf{r}_0|$ к бесконечности. Введем кроме этого плотность падающего пучка

$$\tilde{\rho}_0 = \frac{1}{4\pi v_0}\frac{q}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}_0|^2}.$$

Тогда имеем

$$\begin{aligned}
\tilde{\rho}_f^{\mathrm{II}}(\mathbf{r}, \mathbf{r}_0, t) \xrightarrow[|\mathbf{r}_0|\to\infty]{} \tilde{\rho}_\infty^{\mathrm{II}}(\mathbf{r}) = \tilde{\rho}_0 & \Bigg[1 + \left(\frac{zz_1e^2}{mv_0^2}\right)^2\int_0^{\infty} d\gamma\int_0^{\gamma} d\gamma_1\cdot\gamma_1^2 \times \\
& \times \dot{\nabla}\ddot{\nabla}\left(\frac{1}{|\mathbf{R}|}\right)\cdot\dot{\nabla}\ddot{\nabla}\left(\frac{1}{|\mathbf{R}_1|}\right)\Bigg].
\end{aligned} \tag{17}$$

Обозначим через I_∞ интеграл в формуле (17):

$$I_\infty = \int_0^{\infty} d\gamma\int_0^{\gamma}\gamma_1^2 d\gamma_1\dot{\nabla}\ddot{\nabla}\left(\frac{1}{|\mathbf{R}|}\right)\cdot\dot{\nabla}\ddot{\nabla}\left(\frac{1}{|\mathbf{R}_1|}\right). \tag{18}$$

Выполнив дифференцирование в (18), получим

$$I_\infty = \int_0^\infty d\gamma \int_0^\gamma \gamma_1^2 d\gamma_1 \left(\frac{9\,(\mathbf{R}\mathbf{R}_1)^2}{|\mathbf{R}|^5\,|\mathbf{R}_1|^5} - \frac{3}{|\mathbf{R}|^3\,|\mathbf{R}_1|^3} \right)$$

или

$$I_\infty = 9 \int_0^\infty d\gamma \int_0^\gamma d\gamma_1 \frac{\gamma_1^2}{|\mathbf{R}|^5\,|\mathbf{R}_1|^5} \left\{ \gamma_1^2\gamma^2 + \frac{b^2}{4}(\gamma^2+\gamma_1^2) + b\,(\gamma_1\gamma^2 + \gamma\gamma_1^2) + \right.$$

$$\left. + \left(2a + \frac{b^2}{2}\right)\gamma_1\gamma + ab\,(\gamma+\gamma_1) + a^2 \right\} - 3 \int_0^\infty \frac{d\gamma}{|\mathbf{R}|^3} \int_0^\gamma \frac{\gamma_1^2 d\gamma_1}{|\mathbf{R}_1|^3}; \qquad (18')$$

где

$$|\mathbf{R}| = \sqrt{a + b\gamma + \gamma^2}, \quad |\mathbf{R}_1| = \sqrt{a + b\gamma_1 + \gamma_1^2},$$

$a = r^2$, $b = -2\,|\mathbf{r}|\cos\vartheta$ (ϑ — угол между векторами $\mathbf{r}$ и $\mathbf{r}-\mathbf{r}_0$).

В результате вычисления интегралов в (18′) получим

$$I_\infty = \frac{4\,(2\sqrt{a} - b)^2}{\Delta^2},$$

где $\Delta = 4r^2 \sin^2\vartheta$, т. е.

$$I_\infty = \left(4r^2 \sin^4 \frac{\vartheta}{2}\right)^{-1}, \quad (\vartheta \neq 0).$$

Подставляя это значение для I_∞ в выражение (17), получим окончательно

$$\tilde{\rho}_\infty^{\mathrm{II}}(\mathbf{r}) = \tilde{\rho}_0 \left\{ 1 + \left(\frac{zz_1e^2}{2mv_0^2} \right)^2 \frac{1}{r^2 \sin^4 \frac{\vartheta}{2}} \right\} \quad (\vartheta \neq 0). \qquad (19)$$

Формулы (12) и (19) являются приближенными формулами, которые получаются из точного выражения (10). Формула (12) получается из (10) в предельном случае, когда $|\mathbf{r}-\mathbf{r}_0| \gg |\mathbf{r}_k - \mathbf{r}_0|$, где $|\mathbf{r}_k - \mathbf{r}_0|$ — путь, проходимый частицей в кристалле; а формула (19) получается из (10) в предельном случае, когда $|\mathbf{r}_0| \to \infty$, $|\mathbf{r}| < \infty$.

Полученное выражение (19), совпадающее с формулой Резерфорда, и есть результат второго приближения в формуле (10).

Анализ выражения (10), полученного для функции распределения плотности $\tilde{\rho}_f^{\mathrm{II}}(\mathbf{r}, \mathbf{r}_0, t)$ при решении системы (1) во втором приближении, дает возможность выяснить, в каких случаях основными являются блокировочные эффекты, в каких — резерфордовское рассеяние. В [2] показано, что если рассеивающие атомы расположены со строгой периодичностью, то эффекты блокировки усиливаются в направлениях кристаллографических осей и плоскостей с малыми индексами. Если же атомы расположены не периодически, а хаотически (например, поликристаллические мишени), то частицы будут рассеиваться в основном по резерфордовскому закону. Из формулы (14) следует, что при прочих равных условиях с увеличением энергии частиц пучка эффекты блокировки становятся более ярко выраженными.

В заключение отметим, что в работе получено решение исходной системы уравнений теории во втором приближении и показано, что резерфордовское рассеяние выступает во втором приближении, в то время как блокировочные эффекты получаются уже в первом приближении по отношению к заряду частиц пучка. Расчет произведен без учета экранирующего фактора.

Автор выражает благодарность проф. А. А. Власову за предложенную тему, руководство работой и ценные консультации.

ЛИТЕРАТУРА

1. Власов А. А. «Теоретическая и математическая физика», 3, 388, 1970.
2. Власов А. А., Кураев В. Н. «Вестн. Моск. ун-та», физ., астрон., 13, № 3, 328, 1972.
3. Власов А. А., Кураев В. Н. «Вестн. Моск. ун-та», физ., астрон., 13, № 4, 471, 1972.
4. Власов А. А., Кураев В. Н. «Вестн. Моск. ун-та», физ., астрон., 13, № 4, 431, 1972.
5. Власов А. А. «Статистические функции распределения». М., 1967.

Поступила в редакцию
20.11 1973 г.

Кафедра
теоретической физики