

Как видно из таблицы, использование формулы (4) обеспечивает хорошее количественное согласие результатов расчета и эксперимента в исследуемой модели вихря. Преимуществом предлагаемого расчета турбулентных напряжений в вихре является независимость параметров  $\nu$  и  $\gamma$  от координат.

В целом проведенный анализ позволяет заключить, что применение варианта замыкания уравнений турбулентности с использованием формулы (4) правильно отображает процессы переноса турбулентного импульса. В частности, что очень существенно, с хорошей точностью может быть описан эффект отрицательной турбулентной вязкости, замеченный в работе [10].

#### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

- [1] Хаин А. П., Сутырин Г. Г. Тропические циклоны и их взаимодействие с океаном. Л.: Гидрометеониздат, 1983. [2] Монин А. С., Озмидов Р. В. Океанская турбулентность. Л.: Гидрометеониздат, 1981, с. 246—298. [3] Предводителев А. С. Изв. АН СССР, ОТН, 1948, № 4, с. 545. [4] Лыков А. В. Теплообмен. М.: Энергия, 1971, с. 51—63. [5] Вулис Л. А., Кашкаров В. П. Теория струй вязкой жидкости. М.: Наука, 1965. [6] Соловьев А. А. В кн.: История и методология естественных наук, физика, вып. 26. М.: Изд-во МГУ, 1981, с. 169—192. [7] Габдуллин И. З., Соловьев А. А., Солодухин А. Д. Изв. АН БССР, сер. физ.-энергет. наук, 1983, № 3, с. 54. [8] Баранов П. А., Соловьев А. А. Изв. АН СССР, ФАО, 1980, № 6, с. 656. [9] Deissler R. G. J. Atm. Sci., 1977, 34, p. 1502. [10] Старр В. П. Физика явлений с отрицательной вязкостью. М.: Мир, 1971.

Поступила в редакцию  
29.02.84

ВЕСТН. МОСК. УН-ТА. СЕР. 3. ФИЗИКА. АСТРОНОМИЯ, 1984, т. 15, № 5

УДК 539.12.04 : 162

#### СОТНОШЕНИЕ ДИСКРЕТНОСТЬ — ТЕПЛОВЫЕ КОЛЕБАНИЯ ПРИ ОСЕВОМ КАНАЛИРОВАНИИ

А. К. Ичева, А. Г. Кадменский, В. В. Самарин

(НИИЯФ)

При описании движения частиц через монокристаллы в условиях осевого каналирования важной характеристикой является сечение рассеяния их рядами атомов, расположенных вдоль кристаллографических направлений [1]. Упругое рассеяние с сохранением энергии поперечного относительно оси ряда движения частицы (для краткости — поперечной энергии) описано в модели эффективного потенциала [1]. При этом основные факторы, вызывающие несохранение поперечной энергии: дискретность атомного ряда [1—3] и тепловое движение атомов кристалла [1, 4], — рассматривались отдельно.

В данной заметке мы обсудим соотношение между этими факторами по результатам численного моделирования на ЭВМ методом

Монте-Карло рассеяния быстрых протонов ( $Z_1=1$ ) с энергией  $E=500$  кэВ главными атомными рядами  $\langle 100 \rangle$ ,  $\langle 110 \rangle$ ,  $\langle 111 \rangle$  кристалла германия ( $Z_2=32$ ), имеющего структуру алмаза. Для выявления роли базиса атомного ряда в случае направления  $\langle 111 \rangle$  рассмотрен также гипотетический ряд  $\langle 111 \rangle^*$  с тем же средним межатомным расстоянием  $d$ , но без базиса.

Особенности программы расчета, а также свойства рассеяния рядом  $\langle 100 \rangle$  золота описаны ранее [5]. Моделировалось падение протонов на атомный ряд «из бесконечности» под углом к оси ряда  $\theta_0$ , значение которого менялось в широком интервале, в диапазоне температур кристалла  $T$  от нуля до точки плавления. По полученным угловым распределениям рассеянных протонов определялась угловая величина

$$\left\langle \frac{\delta\theta_n^2}{\delta z} \right\rangle = \frac{\langle \theta^2 \rangle - \langle \theta_0^2 \rangle}{\langle s \rangle},$$

пропорциональная скорости возрастания с глубиной  $z$  средней поперечной энергии каналированных частиц из-за многократного рассеяния их на атомных ядрах. Здесь  $s$  — длина пробега частиц при взаимодействии их с атомным рядом в эффективной области радиуса  $r_0$ ,

$$r_0 = (\pi N d)^{-1/2},$$

где  $N$  — плотность атомов кристалла,  $\theta$  — угол между вектором скорости частицы и осью ряда после столкновения. Угловые скобки означают усреднение по ансамблю частиц с равновероятным распределением средних параметров столкновения частицы с атомным рядом в интервале  $(0, r_0)$ , что соответствует усреднению по статистически равновесному распределению частиц при осевом каналировании [1, 5].

Зависимость безразмерной величины

$$\omega = (\pi N b^2)^{-1} \left\langle \frac{\delta\theta_n^2}{\epsilon z} \right\rangle, \quad b = \frac{Z_1 Z_2 e^2}{E} \quad (1)$$

от безразмерной поперечной, энергии  $\epsilon_{\perp} = 20^2 \psi_1^2 / \psi_1^2$ , где  $\psi_1$  — угол Линдхарда, показана на рисунках для случаев низкой (рис. 1,  $T=48$  К) и комнатной (рис. 2,  $T=29$  К) температур. Там же показаны результаты расчета величины  $\delta\theta^2/\delta z$  (или  $\omega_L$ ) в модели Линдхарда [1,6]:

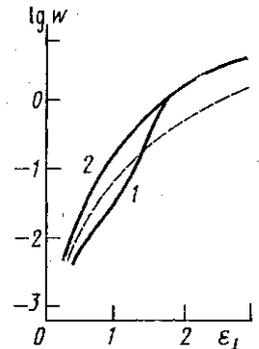
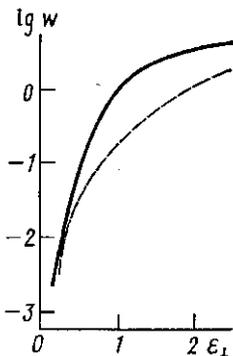


Рис. 1. Зависимость безразмерной характеристики многократного рассеяния протонов с энергией  $E=500$  кэВ атомными рядами германия  $\omega$  от безразмерной поперечной энергии  $\epsilon_{\perp}$  для температуры  $T=48$  К. Пунктир — теоретическая зависимость (2); результаты моделирования: кривая 1 — для направления  $\langle 111 \rangle$ , 2 — для направлений  $\langle 110 \rangle$ ,  $\langle 100 \rangle$  и гипотетического ряда  $\langle 111 \rangle^*$

$$\left( \frac{\delta\theta_n^2}{\delta z} \right)_L = \pi N b^2 \omega_L, \quad \omega_L = \frac{u_{\perp}^2}{C^2 a^2} \left( \exp(\epsilon_{\perp}) + \frac{2}{3} \right) (1 - \exp(-\epsilon_{\perp}))^3, \quad (2)$$

где  $C^2 \approx 3$ ,  $a$  — постоянная экранирования в модели Томаса—Ферми,  $u_{\perp}$  — среднеквадратичное тепловое смещение атомов в поперечной плоскости.



На основании полученных результатов можно сделать вывод, что зависимость  $\omega(\epsilon_{\perp}, u_{\perp})$  является универсальной для рассмотренных рядов германия, за исключением ряда с базисом  $\langle 111 \rangle$  при  $T=48$  К. В последнем случае проявление роли структуры ряда заметно при достаточно малых поперечных энергиях. Для количественной оценки соотношения теплового и дискретного факторов может быть использован

Рис. 2. То же, что на рис. 1, для температуры 293 К; пунктир — теоретическая зависимость (2), сплошная линия — результат моделирования для атомных рядов  $\langle 110 \rangle$ ,  $\langle 100 \rangle$ ,  $\langle 111 \rangle$  и  $\langle 111 \rangle^*$  германия

безразмерный параметр  $\mu = u_{\perp}/r_D$ , где  $r_D$  — критическое расстояние применимости модели эффективного потенциала [1, 2]. В случае линдхардовской формы потенциала решение уравнения для  $r_D$  [2] можно приближенно записать в виде

$$r_D \simeq 0,2568 x(1 + x/2); \quad 0 < x < 2, \quad x = \frac{d}{a} \psi_1 \sqrt{k}, \quad (3)$$

где  $k=1$  для цепочек без базиса и  $k=7/2$  для цепочки  $\langle 111 \rangle$  структуры алмаза. Расчет на основании (3) показал, что  $\mu=0,81$  для ряда  $\langle 111 \rangle$  при  $T=48$  К; в остальных случаях  $\mu > 1,8$ . Это обстоятельство указывает на то, что условие  $\mu < 1$  является необходимым (но не достаточным) условием преобладания дискретного фактора над тепловым при малых поперечных энергиях. При  $\mu > 1$  тепловое движение атомов «забывает» проявления дискретности и зависимости (1) универсальны для различных кристаллографических направлений.

Этот вывод подтверждается результатами моделирования величин типа (1) для рассеяния протонов главными атомными рядами ГЦК кристалла золота в широком температурном интервале, а также зависимости потерь энергии при взаимодействии с атомными электронами и выхода обратного рассеяния при каналировании в упомянутых кристаллах [7].

Сравнение численного (1) и аналитического (2) расчетов показывает, что выражение (2) применимо в ограниченной области малых поперечных энергий  $\epsilon_{\perp} < \epsilon_{\perp}^*$ ,  $\epsilon_{\perp}^* \sim \ln(1 + C^2 a^2 / u_{\perp}^2)$ .

Этот вывод сохраняется при учете следующих возможных членов по  $(u_{\perp}/Ca)^2$  в (2) и требует более тщательных аналитических расчетов для описания функций (1) в широком интервале поперечных энергий.

#### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

- [1] Lindhard J. Mat.-Fys. Medd. Dan. Vid. Selsk., 1965, 34(4), p. 1; УФН, 1969, 99, с. 249. [2] Мартыненко Ю. В. ФТТ, 1971, 13, с. 1155. [3] Firsov O. V. Rad. Eff., 1974, 21, p. 265. [4] Barrett J. H. Phys. Rev. B, 1971, 3, p. 1527. [5] Kadomensky A. G., Tulinov A. F. Proc. of the VII Intern. Conf. on Atomic Collisions in Solids. V. 1. M., 1981, p. 52. [6] Bonderup E. et al. Rad. Eff., 1972, 12, p. 261. [7] Кадоменский А. Г., Самарин В. В. Тр. XI Всесоюз. совещ. по физ. взаимод. заряж. частиц с кристаллами. М.: Изд-во МГУ, 1982, с. 141.

Поступила в редакцию  
13.10.83