5. *Ефимкин Н.Г.* Дис. ... канд. физ.-мат. наук. М. (МГУ), 1993.

6. *Dunford C.L.* Nuclear Date Evaluation Methodology. World Sci. Publishing Co. Pte. Ltd. POBox 128, Faver Road, Singapore.

7. *Гришин В.К., Живописцев Ф.А., Иванов В.А.* Математическая обработка и интерпретация физического эксперимента. М.: Изд-во Моск. ун-та, 1988.

8. URL: http://wwwinfor.cern.ch/asdoc/minuit/

Поступила в редакцию 14.12.01

УДК 537.534

ФОКУСИРОВКА ЧАСТИЦ АТОМНЫМИ ЛИНЗАМИ В КРИСТАЛЛАХ

В.И. Шульга

(*НИИЯФ*)

E-mail: shulga@anna19.npi.msu.su

В малоугловом приближении рассчитано рассеяние частиц при прохождении сквозь трех- и четырехатомные линзы. Получены аналитические выражения для энергии фокусировки этих систем для произвольного и ряда конкретных межатомных потенциалов (Борна–Майера и Мольера). Отмечена двузначность энергии фокусировки для линзы, имеющей форму прямоугольника. Показано, что энергия фокусировки правильной треугольной линзы совпадает с энергией фокусировки двухатомной линзы того же радиуса. Проведено сравнение с результатами других работ.

Введение

Фокусировка атомных траекторий играет важную роль во многих процессах при взаимодействии атомных частиц с кристаллами. Для частиц первичного пучка она ярко проявляется при рассеянии атомов и молекул поверхностными полуканалами кристаллической решетки, при переходах ось–плоскость каналированных частиц, служит одной из причин нарушения статистического равновесия частиц в каналах и т. д. В случае распыления кристаллов фокусировка атомов отдачи способствует появлению направлений преимущественного распыления (пятна Венера) и при определенных условиях может значительно усилить распыление атомов подповерхностного слоя кристаллической решетки.

Как известно, уже рассеяние на одном атоме приводит к сгущению траекторий позади рассеивающего центра, что связано с уменьшением угла рассеяния частиц с ростом прицельного параметра столкновения (радужное рассеяние). Эффект усиливается при рассеянии на двух и большем числе атомов, образующих фокусирующую линзу. При каналировании фокусирующие линзы формируются атомными цепочками (струнами Линдхарда).

Основной характеристикой фокусирующего действия атомной линзы является энергия фокусировки, т. е. энергия, при которой траектории падающих частиц сходятся в заданную точку или, наоборот, расходящийся пучок частиц преобразуется в параллельный. Для случая рассеяния на одном атоме задача сводится к вычислению радиуса тени атома, поскольку именно вблизи границы тени наблюдается самое сильное сгущение траекторий (см., напр., [1]). В малоугловом приближении задача решается точно лишь для степенных ионно-атомных потенциалов [1, 2]. Имеется довольно точная аппроксимация радиуса тени, полученная с использованием потенциала Мольера [3].

Расчеты энергии фокусировки более сложных атомных систем первоначально проводились в связи с проблемами распыления и дефектообразования в кристаллах. Рассматривалась фокусировка кольцевыми трех- и четырехатомными линзами в предположении, что взаимодействие частиц описывается потенциалом Борна–Майера $V(R) = A\exp(-R/B)$, где A и B — константы, R — межатомное расстояние. Результаты этих работ, проводившихся в 1960-х годах, подробно изложены в монографии Томпсона [4].

Теория линзовой фокусировки для произвольного потенциала предложена в работах [5–8]. Наиболее подробно рассмотрены случаи рассеяния атомными цепочками, образующими структуру полуканала [5, 7], двухатомной линзой [6], а также линзой, имеющей форму ромба [8]. Как и в [1–4], в работах [5–8] углы рассеяния частиц рассчитывались в импульсном (малоугловом) приближении. Наиболее эффектный результат получен в случае рассеяния частиц поверхностными полуканалами [7], для которого энергию фокусировки удалось выразить непосредственно через ионно-атомный потенциал:

$$E_f = -2\pi b d^{-1} \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}p} \left[pV(p)\right]_{p=a}. \qquad (1)$$

Здесь a и b — соответственно полуширина и глубина полуканала, d — расстояние между атомами в цепочках, формирующих полуканал, и $V(p)$ — потенциал, вычисленный в точке $R = p$. Энергия фокусировки оказалась очень чувствительной к изменению потенциала, что было использовано для определения потенциала из экспериментальных данных [9, 10]. Для пары Ar–Cu найденный потенциал оказался близок к квантовомеханическому потенциалу, рассчитанному методом самосогласованного поля [11].

В настоящей статье рассмотрено рассеяние частиц прямоугольной и треугольной атомными линзами. Цель работы – получить аналитические выражения для энергии фокусировки этих систем в случае произвольного и ряда конкретных потенциалов.

1. Фокусировка прямоугольной линзой

Допустим, что ионы с энергией E падают однородным по сечению пучком параллельно прямой OO', рассеиваются атомами 1–4, центры которых лежат в плоскости P_1, и попадают на плоскость-экран P_2 (рис. 1, *а*). Пусть a — расстояние от атомов до прямой OO' (радиус линзы), а b — расстояние между плоскостями P_1 и P_2. Обозначим через x и y координаты точки прицеливания иона на плоскости P_1, а через X и Y — координаты точки падения иона на плоскость P_2. В импульсном приближении [12] угол рассеяния частицы на атоме выражается через поперечный импульс, приобретаемый частицей при равномерном движении по прямолинейной траектории. В случае рассеяния на четырех атомах импульсы векторным образом складываются, что приводит к выражениям

$$X = x + b\sum_{j=1}^{4} \vartheta(p_j, E) p_{jx}/p_j, \tag{2}$$

и

$$Y = y + b\sum_{j=1}^{4} \vartheta(p_j, E) p_{jy}/p_j. \tag{3}$$

Здесь p_j — прицельный параметр иона относительно j-го атома ($p_j = (p_{jx}^2 + p_{jy}^2)^{1/2}$, где $p_{1x} = p_{2x} = a_x + x$, $p_{3x} = p_{4x} = a_x - x$, $p_{1y} = p_{4y} = a_y + y$, $p_{2y} = p_{3y} = a_y - y$); $\vartheta(p, E) = f(p)/E$ — угол рассеяния иона на отдельном атоме ($\vartheta \ll 1$); функция $f(p)$ выражается через ионно-атомный потенциал $V(R)$:

$$f(p) = -p\int_p^\infty \frac{dV}{dR}\frac{dR}{\sqrt{R^2 - p^2}}. \tag{4}$$

При выводе формул (2) и (3) предполагалось, что к моменту падения иона на экран его взаимодействие с атомами прекращается и траектория иона выходит на асимптоту (практически это условие можно считать выполненным при $b > a$). Предполагалось также, что указанная асимптота пересекает асимптоту к начальному участку траектории в точке, лежащей в плоскости P_1.

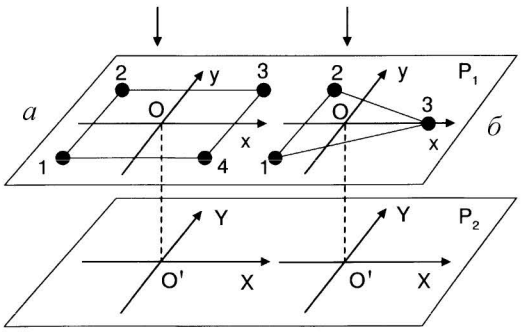

Рис. 1. Атомные линзы: *а* — прямоугольная; *б* — треугольная

Получим распределение плотности потока ионов на плоскости P_2. Число частиц, точки прицеливания которых находятся на элементарной площадке $dx\,dy$ в плоскости P_1, равно произведению $I_0\,dx\,dy$, где I_0 — плотность первичного пучка. После рассеяния частицы попадут на некоторую элементарную площадку dS плоскости P_2. Учитывая, что площадки dS и $dx\,dy$ связаны соответствующим якобианом, для плотности потока рассеянных частиц находим

$$\frac{I}{I_0} = \sum_{i=1}^{m} \left| \frac{\partial X}{\partial x}\frac{\partial Y}{\partial y} - \frac{\partial X}{\partial y}\frac{\partial Y}{\partial x} \right|^{-1}_{x=x_i, y=y_i}, \tag{5}$$

где x_i и y_i — корни системы уравнений

$$\begin{cases} X(x, y) = X_0, \\ Y(x, y) = Y_0, \end{cases} \tag{6}$$

и m — число корней. Величины m, x_i и y_i в формулах (5) и (6) имеют простой физический смысл: m — это число путей, по которым ионы могут попасть в точку с координатами X_0 и Y_0, x_i и y_i — координаты соответствующих этим путям точек прицеливания.

Из (5) следует, что величина I обращается в бесконечность лишь в том случае, когда

$$\frac{\partial X}{\partial x}\frac{\partial Y}{\partial y} - \frac{\partial X}{\partial y}\frac{\partial Y}{\partial x} = 0 \tag{7}$$

для какой-либо одной пары корней x_i и y_i. При $X_0 = Y_0 = 0$ система уравнений (6) имеет корни $x_1 = y_1 = 0$. Нетрудно показать, что для этих корней уравнение (7) распадается на два уравнения: $\partial X/\partial x = 0$ и $\partial Y/\partial y = 0$, решая которые находим две энергии фокусировки:

$$E_{fx}^{(4)} = -4b\left[\left(\frac{a_x}{a}\right)^2 f'(a) + \left(\frac{a_y}{a}\right)^2 \frac{f(a)}{a}\right] \tag{8}$$

и

$$E_{fy}^{(4)} = -4b\left[\left(\frac{a_y}{a}\right)^2 f'(a) + \left(\frac{a_x}{a}\right)^2 \frac{f(a)}{a}\right]. \tag{9}$$

Первая энергия соответствует фокусировке пучка по направлению к плоскости $x = 0$, вторая — к плоскости $y = 0$ (рис. 1, *а*). Здесь $a = (a_x^2 + a_y^2)^{1/2}$ — радиус линзы. Формулы (8) и (9) справедливы при $E_{fx}^{(4)}, E_{fy}^{(4)} \gg f(a_m)$, где $a_m = \min(a_x, a_y)$. Из формул (8) и (9) следует, что энергия фокусировки прямо

пропорциональна величине b. Зависимость от a_x и a_y является более сложной и определяется видом функции $f(p)$, т. е. в конечном счете видом потенциала. Знак минус в правой части (8) и (9) указывает на то, что фокусировка частиц возможна лишь в том случае, когда выражение в квадратных скобках отрицательно.

Для квадратной линзы ($a_x = a_y = a/\sqrt{2}$)

$$E_{fx}^{(4)} = E_{fy}^{(4)} = -2b\left[f'(a) + \frac{f(a)}{a}\right]. \qquad (10)$$

При $a_y = 0$ и $a_x = a$ формула (8) дает удвоенную энергию фокусировки пары атомов [6]:

$$E_f^{(2)} = -2bf'(a). \qquad (11)$$

Для потенциала $V = C/R^n$ функция $f(p)$ имеет вид [12]

$$f(p) = \sqrt{\pi}Ca^{-n}\Gamma\left(\frac{n+1}{2}\right)\Big/\Gamma\left(\frac{n}{2}\right), \qquad (12)$$

где $\Gamma(x)$ — гамма-функция.

Из формул (8), (9) и (11) с учетом (12) находим

$$E_{fx}^{(4)}/E_f^{(2)} = \frac{2}{n}\left[(1+n)\frac{a_x^2}{a^2} - 1\right] \qquad (13)$$

и

$$E_{fy}^{(4)}/E_f^{(2)} = \frac{2}{n}\left[n - (1+n)\frac{a_x^2}{a^2}\right]. \qquad (14)$$

Зависимости, рассчитанные по формулам (13) и (14) для $n = 2$, 3 и 4, показаны на рис. 2. Видно, что две энергии фокусировки реализуются одновременно лишь при $a_x/a \sim 0.7$, т. е. при близких значениях a_x и a_y.

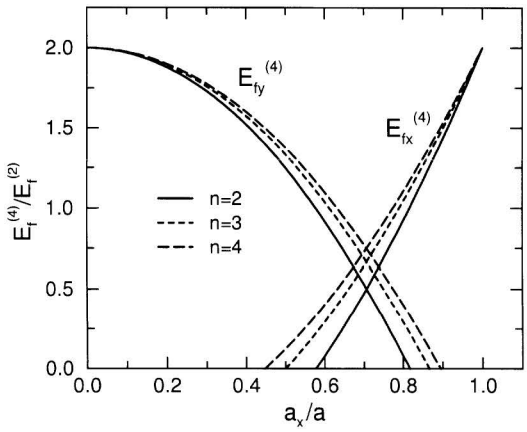

Рис. 2. Энергии фокусировки $E_{fx}^{(4)}$ и $E_{fy}^{(4)}$ (нормированные на $E_f^{(2)}$ — энергию фокусировки двумя атомами) для прямоугольной линзы в зависимости от отношения a_x/a. Потенциал $V = C/R^n$ ($n = 2, 3, 4$)

2. Фокусировка трехатомной линзой

Для ряда атомных направлений в кристаллах (например, для оси ⟨111⟩ в ГЦК решетках) существенна фокусировка трехатомными линзами [4]. Рассмотрим случай, когда атомы 1–3 образуют правильный треугольник радиуса a и лежат в точках с координатами $(-a/2, -a\sqrt{3}/2)$, $(-a/2, a\sqrt{3}/2)$ и $(a, 0)$ соответственно (см. рис. 1, *б*). Система уравнений (6) в этом случае имеет решение $x = y = 0$, что отвечает траектории, равноудаленной от атомов 1–3. Нетрудно показать, что для такой траектории суммарный импульс, который ион получает в результате рассеяния на атомах 1 и 2, равен и противоположен по направлению импульсу, получаемому ионом в результате рассеяния на атоме 3. Отсюда следует, что при расчете энергии фокусировки суммарное действие атомов 1 и 2 можно заменить действием одного атома, лежащего в точке $(-a, 0)$, т. е. симметричного по отношению к атому 3 и образующего вместе с ним двухатомную линзу радиуса a. Это приводит к формуле для энергии трехатомной фокусировки

$$E_{fx}^{(3)} = -2bf'(a), \qquad (15)$$

которая аналогична формуле (11).

3. Примеры

Рассмотрим в качестве примеров экспоненциальный потенциал Борна–Майера и потенциал с функцией экранирования Мольера. Оба потенциала широко используются для описания атомных столкновений в твердых телах, а функция экранирования Мольера положена в основу ряда потенциалов, аппроксимирующих результаты квантовомеханических расчетов (например, потенциалов WHB [13] и ZBL [14]).

Для потенциала Борна–Майера функция $f(p)$ равна

$$f(p) = p\frac{A}{B}K_0\left(\frac{p}{B}\right), \qquad (16)$$

и подстановка (16) в (8) дает

$$E_{fx}^{(4)} = \frac{4bA}{B}\left[\frac{a_x^2}{aB}K_1\left(\frac{a}{B}\right) - K_0\left(\frac{a}{B}\right)\right], \qquad (17)$$

где $K_0(x)$ и $K_1(x)$ — модифицированные функции Бесселя второго рода нулевого и первого порядка.

Для потенциала Мольера функция $f(p)$ имеет вид

$$f(p) = \frac{Z_1 Z_2 e^2}{a_s}\sum_{i=1}^{3}\alpha_i\beta_i K_1\left(\beta_i\frac{p}{a_s}\right), \qquad (18)$$

где Z_1 и Z_2 — атомные номера налетающей частицы и атомов линзы, a_s — длина экранирования, α_i и β_i — параметры потенциала. Подставляя (18) в (8), находим

$$E_{fx}^{(4)} = \frac{4Z_1Z_2e^2b}{aa_s}\sum_{i=1}^{3}\alpha_i\beta_i\times \\ \times\left[\gamma_i\left(\frac{a_x}{a}\right)^2 K_0(\gamma_i) + \frac{a_x^2 - a_y^2}{a^2}K_1(\gamma_i)\right], \qquad (19)$$

где $\gamma_i = \beta_i a/a_s$. Выражения для энергии фокусировки $E_{fy}^{(4)}$ можно получить из (17) и (19), заменив a_x

на a_y и a_y на a_x. В случае квадратной линзы

$$E_{fx}^{(4)} = \frac{2bA}{B}\left[\frac{a}{B}K_1\left(\frac{a}{B}\right) - 2K_0\left(\frac{a}{B}\right)\right] \qquad (20)$$

и

$$E_{fx}^{(4)} = \frac{2Z_1Z_2e^2b}{a_s^2}\sum_{i=1}^{3}\alpha_i\beta_i^2K_0\left(\beta_i\frac{a}{a_s}\right) \qquad (21)$$

для потенциалов Борна–Майера и Мольера соответственно.

Энергия фокусировки трех- и двухатомной линзы определяется выражениями

$$E_{fx}^{(3)} = E_{fx}^{(2)} = \frac{2bA}{B}\left[\frac{a}{B}K_1\left(\frac{a}{B}\right) - K_0\left(\frac{a}{B}\right)\right] \qquad (22)$$

и

$$E_{fx}^{(3)} = E_{fx}^{(2)} = \frac{2Z_1Z_2e^2b}{aa_s}\sum_{i=1}^{3}\alpha_i\beta_i\left[\gamma_iK_0(\gamma_i) + K_1(\gamma_i)\right] \qquad (23)$$

для потенциалов Борна–Майера и Мольера соответственно.

Для случаев рассеяния пучка ионов парой атомов и парой атомных цепочек в работах [5, 6] проведено сравнение с результатами численных расчетов, выполненных путем интегрирования уравнений движения ионов в поле атомов (цепочек атомов), т. е. без тех упрощающих предположений, что сделаны выше. Хорошее согласие аналитической теории и моделирования, которое было достигнуто, казалось бы, противоречит выводу Томпсона [4, 15] о том, что импульсное приближение является грубым для описания линзовой фокусировки. В действительности противоречия нет, поскольку в [4, 15] рассмотрена фокусировка расходящегося пучка частиц, источник которого находится непосредственно в поле атомной линзы. В случае параллельного пучка, рассмотренного в данной работе, фокусировка частиц в заданную точку происходит при меньших углах рассеяния и, следовательно, больших энергиях по сравнению со случаем расходящегося пучка. С уменьшением угла рассеяния точность импульсного (малоуглового) приближения возрастает, чем и объясняется хорошее согласие теории и моделирования.

Литература

1. *Линдхард Й.* // УФН. 1969. **99**. P. 249.
2. *Martynenko Yu.V.* // Rad. Eff. 1973. **20**. P. 221.
3. *Oen O.S.* // Surf. Sci. 1983. **131**. P. L407.
4. *Томпсон М.* Дефекты и радиационные повреждения в металлах. М.: Мир, 1971.
5. *Shulga V.I.* // Rad. Eff. 1975. **26**. P. 61.
6. *Shulga V.I.* // Rad. Eff. 1978. **37**. P. 1.
7. *Shulga V.I.* // Rad. Eff. 1986. **100**. P. 71.
8. *Лусников А.В., Шульга В.И.* Взаимодействие атомных частиц с твердым телом. Минск: Изд-во МРТИ, 1978. С. 69.
9. *Машкова Е.С., Молчанов В.А., Шульга В.И.* // ЖТФ. 1982. **52**. P. 532.
10. *Шульга В.И.* // ЖТФ. 1982. **52**. P. 534.
11. *Broomfield K., Stansfield R.A., Clary D.C.* // Surf. Sci. 1988. **202**. P. 320.
12. *Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М.* Механика. М.: Наука, 1965.
13. *Wilson W.D., Haggmark L.G., Biersack J.P.* // Phys. Rev. 1977. **B15**. P. 2458.
14. *Ziegler J.F., Biersack J.P., Littmark U.* / Ed. *J.F. Ziegler*. The Stopping and Range of Ions in Solids. Vol. 1. N. Y.: Pergamon Press, 1985.
15. *Nelson R.S., Thompson M.W.* // Proc. Roy. Soc. 1961. **A259**. P. 458.

Поступила в редакцию
19.12.01

ОПТИКА И СПЕКТРОСКОПИЯ

УДК 535.375.55+539.194

РАЗНОСТЬ ПОЛЯРИЗУЕМОСТЕЙ КАК ХАРАКТЕРИСТИКА КОМБИНАЦИОННО-АКТИВНЫХ СВОЙСТВ МОЛЕКУЛЫ

С.Ю. Никитин

(*кафедра общей физики и волновых процессов*)

Показано, что разность поляризуемостей в состояниях, образующих комбинационно-активный переход, является удобной характеристикой свойств молекулы в отношении комбинационного рассеяния света. Получены выражения для удельного коэффициента усиления вынужденного комбинационного рассеяния и сечения спонтанного комбинационного рассеяния через разность поляризуемостей. Сделаны численные оценки для водорода.

Введение

Теоретический расчет сечения спонтанного комбинационного рассеяния (СКР) света на молекуле $d\sigma/d\Omega$ и коэффициента усиления вынужденного комбинационного рассеяния (ВКР) g в молекулярной среде представляет собой трудную задачу. В приближении Плачека сечение СКР выражается через