

ВЛИЯНИЕ КРИСТАЛЛИЧЕСКОЙ РЕШЕТКИ НА ДВИЖЕНИЕ БЫСТРЫХ ЗАРЯЖЕННЫХ ЧАСТИЦ*)

Й. Линдхард

ПРЕДИСЛОВИЕ К РУССКОМУ ПЕРЕВОДУ

Меня просили изложить в предисловии к переводу мою нынешнюю точку зрения на мою работу 1965 г. Я воздержусь от подобного обсуждения недавних экспериментальных работ, относящихся к теме этой работы.

В самом деле, замечательно, что явления и идеи, связанные с ориентационными эффектами для быстрых заряженных частиц в кристалле, в тех случаях, когда характер движения частиц определяется кристаллом, могут быть получены и объяснены целиком на чисто теоретической основе. Как подчеркивалось в статье, основой является приближение цепочки (стринга), т. е. изолированного ряда атомов. Это приближение соответствует частице, движущейся под малым углом по отношению к кристаллографической оси и сталкивающейся последовательно с цепочками, причем движение частицы между столкновениями обычно является неупорядоченным двумерным. В случае движения, определяемого атомными цепочками, существуют весьма сильные ориентационные эффекты, и как раз в этом случае можно также провести анализ движения весьма подробно. Для этих целей весьма существенно, что рассмотрение может быть основано главным образом на классической механике. Этот вывод отнюдь не является тривиальным; он вкратце обсуждается в статье и более обстоятельно — в работе **), где показана существенность кулоновского характера взаимодействия.

Заслуживает внимания и то, что результаты оказываются мало чувствительными к характеру взаимодействия между ионами и атомами (лишь с одним исключением — это взаимодействие должно описываться на малых расстояниях кулоновским потенциалом). Был выбран стандартный потенциал типа Томаса — Ферми (2,6) для того, чтобы все рассмотрение могло быть выполнено аналитически. Отсутствие зависимости от экранирования, т. е. от константы a , видно из многих приведенных в статье формул. И наоборот, встречающиеся в литературе утверждения, что можно получить потенциал взаимодействия из результатов экспериментального изучения ориентационных эффектов, надлежит рассматривать лишь с оговорками.

Первичные ориентационные эффекты в кристаллах относятся к тому, как частица движется в кристаллической решетке, и включают в себя главным образом сильную тень вблизи оси атомных цепочек, т. е. в пределах расстояний порядка $a \sim (1-2) \cdot 10^{-9}$ см. Теоретические оценки размеров тени, или величины уменьшения выхода, часто можно сделать при помощи непрерывного описания атомных цепочек, принимая в расчет также и тепловые колебания атомов и эффекты, обусловленные поверхностью (ср. гл. 6). Однако последовательное и более точное рассмотрение получается из соответствующего гамильтониана (см. выражение (6,6)), куда, в частности, включены угловые компенсационные эффекты (см. также численные оценки в работе ***). Эффект затенения широко изучался экспериментально, особенно посредством резерфордовского рассеяния быстрых легких ионов на большие углы. Согласно экспериментальных результатов с простыми оценками является удовлетворительным, и практически полуширина провала обычно $\approx 2\psi_1$, когда применимо (2,9), т. е. при высоких энергиях. Минимальный выход порядка величины, даваемой формулами (6,13), (6,14), т. е. порядка $\sim 10^{-2}$.

*) Jens Lindhard, Influence of Crystal Lattice on Motion of Energetic Charged Particles, Mat.-Fys. Medd. Dan. Vid. Selsk. 34, No. 14 (1965). Перевод Е. С. Мамкуовой, под редакцией Л. А. Арцимовича.

**) Ph. Lervig, J. Lindhard, V. Nielsen, Nucl. Phys. A96, 481 (1967).

***) J. U. Andersen, Mat.-Fys. Medd. Dan. Vid. Selsk. 36, No. 7 (1967).

Что касается атомных плоскостей, то здесь первичные эффекты меньше, чем в случае атомных цепочек, и простой непрерывный потенциал позволяет приближенно описать некоторые эффекты. Однако более точное рассмотрение эффекта атомных плоскостей, подобное тому, которое было выполнено для атомных цепочек, — остается трудной задачей, как отмечалось в гл. 2.

Вторичными ориентационными эффектами являются многократное рассеяние, или изменение энергии поперечного движения, и замедление, или изменение полной энергии. Многократное рассеяние рассматривается в гл. 4, и его поведение (включая сильное уменьшение) качественно понятно. Однако надежные теоретические оценки до сих пор было трудно выполнить, поскольку на само по себе запутанное многократное рассеяние накладывается еще и рассеяние, зависящее от энергии поперечного движения. Представляет несомненный интерес получить хорошо обоснованные упрощения для рассмотрения многократного рассеяния. Рассмотрение возможного демпфирования поперечного движения (см. приложение I в конце статьи) является лишь поверхностным и требует дальнейшего анализа.

Теория ориентационных эффектов в замедлении (гл. 3) сознательно рассматривается упрощенным способом. Основная причина заключается в том, что электронное торможение, поскольку оно не локализовано, не слишком чувствительно к ориентационным эффектам, и торможение не играет основной роли для этих явлений. Кроме того, следует заметить, что теория электронного торможения быстрых частиц в тех случаях, когда требуются лишь качественные оценки его величины (скажем, с точностью до 30%), исключительно проста. В рамках такого описания включение ориентационных эффектов в рассмотрение может быть сделано простым и последовательным способом. При рассмотрении правил обратимости и компенсации (гл. 5) имелось в виду лишь руководство для будущих исследований. Правила формулируются в рамках классической механики не только потому, что классическая механика является правильным приближением, но также потому, что как раз в классической механике можно оценить, например, отклонения от обратимости, когда потеря энергии значительна, или отсутствие компенсации в сложном явлении. Если мы хотим включать релятивистские эффекты, то выражение для характеристического угла принимает вид $\psi_1 = (4Z_1Z_2e^2/pvd)^{1/2}$, где p — импульс частицы (см. сноску**) на стр. 249). Этот случай наиболее легко может быть исследован для электронов и позитронов. Электроны, для которых поле является притягивающим, в том случае, когда минимумы в выходе заменяются пиками, обсуждаются в моей статье лишь поверхностно. Классические ориентационные эффекты для электронов предпочтительно изучать при релятивистских энергиях, когда классические черты сильнее и явления в меньшей степени определяются дифракционными эффектами. Статья об интересных явлениях для электронов, когда приходится включать в рассмотрение многократное рассеяние, будет опубликована в соавторстве с Е. Бондерупом.

Выше приводились косвенные ссылки на эксперименты. Многочисленные примеры таких экспериментов можно найти в отчетах конференций 1967 г.*); много работ выполнено после этих конференций, значительная часть их пока еще не опубликована.

Йенс Линдхард

29 января 1969 г.

1. ВВЕДЕНИЕ

При измерениях распределений пробегов и потерь энергии в монокристаллах были обнаружены ориентационные эффекты как для медленных тяжелых ионов¹, так и совсем недавно² — для протонов. Первые указания на наличие ориентационных эффектов для медленных заряженных частиц, по-видимому, появились при изучении катодного распыления^{3 **}). Дальнейшие указания были обнаружены при расчетах на электронно-вычислительных машинах⁴ упрощенных моделей прохождения через решетки при крайне низких энергиях частиц.

Цель настоящей работы состоит в том, чтобы показать, что может быть проведен всесторонний теоретический анализ ориентационных эффектов при прохождении заряженных частиц через кристаллические решетки. На основе этого анализа можно сформулировать условия для наблюдения своеобразного эффекта, именуемого ниже эффектом атомной цепочки

*) Proceedings of the Chalk River Conference, Canad. J. Phys. 46, 449 (1968); Proceedings of the Brookhaven Conference, BNL-50083 (C-52).

**) А также ионно-электронной эмиссии (см. УФН 91 (3), 485 (1967)). (Прим. ред.)

(стринг-эффектом). Соответствующее приближение цепочки является достаточно хорошим приближенным методом, посредством которого могут быть описаны первичные и вторичные ориентационные эффекты. Оказывается, что ориентационные эффекты открывают новые возможности для исследований в области твердого тела, главным образом вследствие того, что при помощи эффекта теней удастся различать узлы решетки. В недавно опубликованной статье⁵ кратко подытожены теоретические результаты, и по этим направлениям были начаты экспериментальные исследования^{7*}).

Здесь следует упомянуть хорошо известный факт, что вследствие периодичности решетки можно наблюдать интерференционные волновые картины как для электромагнитного излучения, так и для тяжелых частиц, если длины волн не слишком малы. Однако ориентационные эффекты такого рода не являются предметом настоящего исследования, в котором рассматриваются главным образом явления затенения и отправной точкой является классическая механика. Обычно требуется, чтобы длины волн падающих частиц были весьма малыми и существовала некогерентность, так, чтобы интерференционные картины отсутствовали.

Основным условием применимости данного приближенного метода является предположение о больших импульсах частиц. При этом условие используемое в дальнейшем классическое орбитальное описание ориентационных эффектов является достаточно простым. В этой связи существенно также, что классическое приближение для ориентационных явлений оказывается тем более хорошим, чем выше кинетическая энергия частицы, в противоположность большинству проблем соударений, где при высоких энергиях необходимо применение квантовой механики.

В следующих главах автор намеревается представить только общие теоретические принципы, особо останавливаясь на некоторых основных явлениях, и привести ряд примеров, которые могли бы осветить основные проблемы. Некоторые аспекты, такие, как квантовые эффекты и тепловые колебания, рассматриваются лишь бегло и нуждаются в дальнейшем изучении. Другие проблемы — такие, как детали замедления, — совсем не рассматриваются, поскольку они имеют второстепенное значение для основных обсуждаемых здесь вопросов.

Настоящая глава содержит замечания по некоторым аспектам ориентационных эффектов. Упоминаются также некоторые данные, касающиеся замедления заряженных частиц.

1.1. Неупорядоченные системы

Хотя пространственная структура среды должна оказывать некоторое влияние на замедление и рассеяние заряженных частиц, обычно этот эффект не рассматривают. В игнорировании структуры содержатся определенные приближения. Они могут быть охарактеризованы тремя взаимно связанными допущениями: гомогенностью, изотропностью и неупорядоченностью среды. Два первых допущения часто содержатся в последнем из них. Таким образом, анизотропия, обусловленная структурой решетки, может являться результатом своего рода корреляции между соударениями.

Предположим, что падающая частица характеризуется определенным дифференциальным сечением рассеяния отдельными атомами, что соударения частиц с атомами среды индивидуальны и независимы

*) Последние экспериментальные и теоретические результаты изложены в обзоре проф. Томпсона (M. W. Thompson, *Contemp. Phys.* 9 (4), 375 (1968)). Там же дана хронология обнаружения различных ориентационных эффектов. Перевод этой статьи см. в этом же номере УФН на стр. 297. (Прим. ред.)

и, наконец, что атомы беспорядочно распределены и случайно ориентированы в пространстве. Очевидно, что тогда процесс замедления не зависит от направления; распределение вероятности энергетических потерь и углов рассеяния зависит только от массы, приходящейся на 1 см^2 среды, и может быть вычислено обычным способом из однократных соударений. Это, по сути дела, картина газа, и она может быть названа неупорядоченной системой (под этим подразумевается гомогенность, изотропность и случайный характер соударений). Однако важно понимать, что приближение неупорядоченной системы не ограничивается случаем беспорядочно расположенных атомов и молекул, но может быть также применено к среде с решеточной структурой. Например, можно а priori ожидать, что поликристалл во многих отношениях следует рассматривать как неупорядоченную систему.

1.2. Направленное и ненаправленное движение

Монокристалл является типичным примером среды, в которой благодаря негомогенности, анизотропности и отсутствию неупорядоченности могут появиться ориентационные эффекты при замедлении. Мы можем подразделить ориентационные эффекты для заряженных частиц, движущихся через монокристаллы или другие среды, на две категории: 1) ненаправленное движение и 2) направленное движение.

Под ненаправленным движением имеется в виду такое приближение, когда можно предположить, что структура вещества существенно не влияет на траекторию частицы. Термин «направленное движение» означает, что траектория частицы вследствие того, что она определяется структурой среды, резко отклоняется от траектории в неупорядоченной системе. Будет показано, что ненаправленное движение приводит только к флуктуациям физических эффектов, обусловленных корреляциями, в то время как направленное движение приводит к более фундаментальным изменениям в физических процессах.

В обеих категориях ориентационных эффектов мы можем провести дальнейшее различие между теми случаями, когда рассматриваются как направление, так и положение траектории, и теми, когда рассматривается только направление.

1.3. Направление и положение

Если можно предположить, что частица движется классически вдоль прямой линии через тонкий монокристалл, то важно направление линии движения, а также ее положение в решетке (зависимость от положения служит признаком негомогенности, от направления — анизотропности). Так, предположим, что траектория параллельна главной оси решетки. В таком случае, если она проходит между атомами, имеет место уменьшение всех тех физических эффектов, которые требуют близких соударений между частицей и атомом. Если частица подходит очень близко к атомам, эти эффекты возрастают.

Итак, с одной стороны, вряд ли можно, например, попасть пучкам только в пространство между атомами в решетке, поскольку площадь поперечного сечения пучка довольно велика и, таким образом, одна часть пучка может идти между атомами, в то время как другая часть проходит вблизи атомов. С другой стороны, падающий пучок может быть весьма хорошо коллимирован по направлению, и поэтому некоторая доля частиц, движущихся по прямым линиям, может, по-видимому, пройти в отдалении от атомов вплоть до достаточно больших глубин проникновения.

В качестве примера рассмотрим потери энергии, испытываемые пучком частиц, движущихся через тонкую кристаллическую пленку, когда потеря энергии мала по сравнению с энергией частицы. Можно предположить, что потеря энергии частицей на один атом мишени является функцией только прицельного параметра. Однако если движение частицы ненаправленное, то средняя потеря энергии (но не флуктуации ее) остается той же самой, что и в неупорядоченной системе. Этот результат очевиден, так как пучок частиц состоит из соответствующих случайно распределенных траекторий. Усреднение потерь энергии по всем беспорядочно распределенным соответствующим траекториям должно дать тот же самый результат, что и усреднение по всем случайно распределенным атомам. В случае направленного движения траектории не остаются независимыми от решетки и можно ожидать, что средняя потеря энергии отклонится от потери для неупорядоченной системы. В дальнейшем мы будем интересоваться, по возможности, случаями направленного движения в решетке, где эффекты зависят как от направления, так и от положения траектории частицы и где, например, усреднение по всем положениям траектории падающих частиц не согласуется с результатами для неупорядоченных систем.

1.4. Т о л ь к о н а п р а в л е н и е

Для сравнения мы кратко рассмотрим эффекты, связанные только с направлением, но не с положением траектории частицы в пространстве. Такие чисто ориентационные эффекты, определяемые исключительно направлением, могут быть разделены на два случая.

Первый случай может быть пояснен на следующем примере. Предположим, что средой является гомогенная плазма в постоянном внешнем магнитном поле, параллельном оси z . Диссипация энергии частицы не зависит от положения частицы в пространстве, а определяется углом между направлением ее движения и осью z . Этот ориентационный эффект является свойством среды и существует даже в том случае, если частица движется приблизительно вдоль прямой линии.

Второй случай имеет место, например, в картине интерференции волн, обусловленной периодичностью решетки. Эффекты такого рода требуют наличия достаточно протяженных волн, что находится в резком противоречии с требуемой классической механикой локализацией частицы внутри решетки.

1.5. К а н а л и р о в а н и е

Понятие каналирования было введено в недавних работах по проникновению частиц в кристаллы сначала для медленных ионов^{1, 4} и позже для быстрых протонов*). Под каналированием понимают явление, в котором траектория частицы, проходящей вблизи середины каналов вдоль главных осей кристалла, может иметь определенную стабильность. На частицы, движущиеся вдоль каналов, действуют периодические силы, главным образом фокусируя их и иногда дефокусируя. Если силы гармонического типа и преобладающей является фокусирующая сила, это приводит к обычному решению уравнений движения. Поперечное движение в канале приблизительно является длинноволновым колебанием, сочетающимся с коротковолновой вибрацией с периодом решетки. Длинноволновое движение имеет постоянную амплитуду и длину волны v/w , где w — период среднего поперечного гармонического колебания, а v —

*) Интересно отметить, что этот эффект был рассмотрен еще Штарком в 1912 г. (см. обзор: M. W. T h o m p s o n, *Contemp. Phys.* **9** (4), 375 (1968), перевод которого публикуется в этом же номере на стр. 297). (*Прим. ред.*)

скорость частицы. Если амплитуда велика, колебание уже не является гармоническим. Любой сорт колебаний внутри канала мы рассматриваем как собственно каналирование. Теоретическое рассмотрение каналирования в одном частном случае дано Леманом и Лейбфридом⁸. Исследования индивидуальных траекторий частиц при низких энергиях при помощи электронных вычислительных машин были выполнены Робинсоном и Оеном⁴ и др.

Стоит указать качественный способ возможного проявления каналирования и его отношение к другим явлениям. Предположим, что частица движется вдоль осевой линии канала с колебаниями около этой линии. Если энергия ее колебания превышает барьер, отделяющий данный канал от соседнего, то частица без труда уйдет из канала. Мы можем грубо оценить барьер для такого ухода либо из гармонической силы в центре канала, либо из прямых оценок на граничной линии канала. Введем энергию барьера для каналов E_c (предположительно порядка 5 эв для протонов), зависящую от Z_1 и среды. Пусть ψ будет угол между направлением движения частицы и направлением канала, когда частица находится на оси канала. Если энергия поперечного движения $E \sin^2 \psi$ больше, чем E_c , то ион может уйти из канала (мы не будем обсуждать вопрос о вероятности ухода). Итак, находим критический угол

$$\alpha_c = \left(\frac{E_c}{E} \right)^{1/2}, \quad (1,1)$$

где E — энергия частицы. Только в случае, если угол между направлением падающего иона и осью канала меньше α_c и ион начинает свое движение вблизи оси канала, можно не учитывать уход иона из канала и рассматривать собственно каналирование. Это соответствует телесному углу для собственно каналирования

$$\Omega_c \sim \pi \frac{E_c}{E}. \quad (1,2)$$

Внутри этого телесного угла каналирование может происходить с конечной вероятностью. В широком канале в тех случаях, когда атомы стенок сравнительно плотно расположены, можно ожидать, что энергия E_c и, следовательно, телесный угол Ω_c будут больше, чем в узком канале. Из (1,1) и (1,2) следует, что критический угол сильно зависит от энергии частицы, тогда как заряд и масса частицы не входят явно в формулу. Однако энергия E_c в некоторой степени зависит от атомных номеров Z_1 и Z_2 и изменяется при изменении направления в решетке.

Уже проведенное выше беглое рассмотрение показывает, что для частиц с высокими энергиями вероятность каналирования незначительна. При низких энергиях вероятность становится больше, хотя некоторые эффекты оказывают разрушающее влияние (ср. например, (I, 13)). Однако вероятность нахождения в одном канале физически не очень важна, за исключением особой группы явлений. В следующих главах мы придем к более полной картине явлений при высоких и низких энергиях частиц.

1.6. Электронное и ядерное торможение

Имеются два источника потерь энергии заряженными частицами¹². Электронное торможение обусловлено электронными соударениями, когда частица возбуждает или вырывает электроны атомов, теряя при этом энергию. Соответствующая передача импульса мала, поскольку электроны являются легкими частицами. Ядерное торможение возникает при почти упругих соударениях с атомами, с передачей как энергии, так

и импульса. Таким образом, отклонения частицы происходят благодаря ядерным столкновениям, когда присутствуют и большие силы, и большие массы. Этот простой факт весьма существен в проблеме ориентационных эффектов.

Можно провести различие между отдельными областями скоростей для обычного некоррелированного замедления заряженных частиц. Во-первых, при высоких скоростях частиц электронное торможение полностью преобладает, а ядерное примерно в 10^3 раз меньше. Этот предельный случай относится к протонам или к другим тяжелым частицам, когда $v > v_1 = Z_1^{2/3} v_0$ (Z_1 — атомный номер частицы, v — ее скорость, $v_0 = e^2/\hbar$). В этом случае к возбуждению атомной системы может быть применен квантовый метод возмущений (метод Бете — Блоха), торможение пропорционально Z_1^2 и уменьшается приблизительно как v в степени от -1 и -2 . Во-вторых, при скоростях $v < v_1$ электронное торможение может все еще преобладать и быть почти пропорциональным скорости^{6, 13}. В-третьих, при низких скоростях в замедлении тяжелых ионов преобладает ядерное торможение. В неупорядоченных системах ядерное торможение может доминировать над электронным, когда $\epsilon < 10$, где ϵ — безразмерная мера энергии по Томасу — Ферми⁶:

$$\epsilon = \frac{aE}{Z_1 Z_2 e^2} \frac{M_2}{M_1 + M_2} \quad (1,3)$$

В (1,3) Z_2 — атомный номер среды, $a = a_0 \cdot 0,8853 (Z_1^{2/3} + Z_2^{2/3})^{-1}$, — радиус экранирования атома и $E = M_1 v^2/2$ — энергия частицы. Параметр ϵ удобен для описания ядерных соударений. Торможение заряженных частиц указывает на необходимость делать различие между электронными и ядерными соударениями и между различными областями скоростей. В рассмотренной ситуации торможение, как будет показано в гл. 2, не играет первостепенной роли, но остается важным вторичным явлением.

2. ОСНОВЫ ТЕОРИИ

Чтобы найти соответствующий приближенный метод рассмотрения ориентационных эффектов, мы должны провести различие между первичными и вторичными явлениями. Потеря энергии частицей (например, замедление при электронных столкновениях) является вторичным явлением, поскольку она определяется траекторией частицы, но сама по себе траектории не определяет. Возможное изменение направления пути должно быть обусловлено отклонениями частицы при соударениях с атомами, и поэтому первичное явление есть отклонение⁵. Вследствие этого простого факта мы можем сразу же ввести четыре основных предположения⁵, приводящие к последовательному приближенному методу рассмотрения возможного направленного движения частиц.

Во-первых, можно предположить, что углы рассеяния частиц малы. Это предположение оправдывается не только тем, что для быстрых тяжелых частиц это фактически обычно имеет место, но и тем, что рассеяние на большие углы приводит к полной потере первоначального направления движения, так же как и корреляций, связанных с направлением. Рассеяние частицы обусловлено ядерными столкновениями, когда частица взаимодействует с распределением заряда атома как целым, причем эти соударения являются почти упругими. Если углы рассеяния в лабораторной системе φ и в системе центра инерции θ малы, мы находим для упругих соударений

$$\operatorname{tg} \varphi = \frac{M_2 \sin \theta}{M_1 + M_2 \cos \theta} \rightarrow \varphi \approx \frac{M_2}{M_1 + M_2} \theta \quad \text{для } \varphi < 1, \quad \theta < 1; \quad (2,1)$$

здесь M_1 — масса частицы, M_2 — масса атома, находившегося первоначально в состоянии покоя. Если мы интересуемся только движением частицы, то можем найти точный угол рассеяния ϕ из потенциала взаимодействия между частицей и атомом, считая атомы бесконечно тяжелыми. Действительно, классическая формула для рассеяния на малые углы имеет вид

$$M_1\phi = M_0\theta = -\frac{1}{v^2} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\partial}{\partial p} V(R = \sqrt{z^2 + p^2}) dz,$$

где p — прицельный параметр, $V(R)$ — потенциал взаимодействия между ионом и атомом на расстоянии R . Для данной цели точность потенциала Томаса — Ферми в большинстве случаев достаточна и приводит к простому исчерпывающему описанию. Если требуется потенциал на большом расстоянии от атома, могут быть использованы другие формы потенциалов.

Во-вторых, поскольку в процессе соударения частица должна приблизиться к атому на достаточно малое расстояние, сильные корреляции между соударениями имеют место лишь в том случае, если частица движется под небольшим углом к ряду атомов; если она проходит близко к одному из атомов ряда, то она должна также проходить близко к соседним атомам того же самого ряда. Это приводит нас к идее о цепочке атомов (стринге), характеризующейся только постоянным расстоянием d между атомами, расположенными на прямой линии. Мы называем это идеальной цепочкой. В первом приближении соударения имеют место сразу с цепочкой, соударения независимы и не коррелированы. Физическое значение цепочки усиливается тем, что практически все физические процессы, обусловленные частицей или влиянием ее пути, требуют, чтобы частица шла близко к цепочке. Исключением является резонансное возбуждение электронов атома, которое, если скорость частицы высока, может иметь место и на расстоянии многих постоянных решетки от частицы. Простота цепочечного приближения до некоторой степени является результатом того, что структура решетки не входит в рассмотрение и единственным параметром решетки является расстояние d между атомами в цепочке. Цепочки, принадлежащие к направлениям с низкими индексами, имеют малые d и являются наиболее резко выраженными цепочками. Более слабые корреляции, чем для цепочек, ожидаются для кристаллических плоскостей, атомных пар и т. д.

В-третьих, в большой степени может быть использовано классическое орбитальное рассмотрение. Оно может быть применено для определения положения частицы в решетке, поскольку длина волны λ мала. Менее очевидно, что классическое орбитальное рассмотрение может быть использовано для описания соударений, например с цепочками атомов. На самом деле, так как индивидуальные соударения с атомами требуют квантовых поправок, либо когда величина $\kappa = 2Z_1Z_2e^2/\hbar v$ невелика по сравнению с единицей, либо когда прицельный параметр велик, в некоторых случаях классическое приближение может оказаться сомнительным. Однако в противоположность таким прогнозам классическое описание последовательности многих соударений с атомами цепочки не становится неправомерным при высоких скоростях. Квантовые поправки обсуждаются ниже, в приложении II.

В-четвертых, идеализированный случай совершенной решетки и совершенной цепочки может быть использован в качестве первого приближения. Наиболее важными отклонениями являются колебания решетки, т. е. тепловые и нулевые колебания. С другой стороны, некоторые эффекты, связанные с колебаниями, уменьшаются в случае последова-

тельных соударений с многими атомами цепочки. На основе этих четырех предположений можно построить шаг за шагом теорию ориентационных эффектов для быстрых заряженных частиц. Обсуждение корреляций и отклонений на малые углы приводит к основной идее цепочки атомов. Эту концепцию надо рассматривать не как застывшую схему, а скорее как отправную точку для приближенного метода, применимого к ориентационным эффектам. В этом смысле здесь имеется аналогия с идеальным газом как отправной точкой для описания реальных газов или с идеальной решеткой как отправной точкой для теории твердого тела.

2.1. Поперечный непрерывный потенциал цепочки

Для того чтобы изучить влияние на движение частицы коррелированных отклонений на малые углы, мы можем сначала ввести приближение непрерывной цепочки. Основа непрерывного приближения заключается в предположении, что в отклонение траектории дают вклад много последовательных атомов. Найдя траектории частиц в непрерывном приближении, мы можем затем выяснить, действительно ли эти траектории определяются многими соударениями, т. е. мы можем найти условия применимости непрерывного рассмотрения. Обсуждение связи между непрерывной цепочкой и идеальной цепочкой дается в приложении 1, где довольно подробно рассматривается суммарный эффект последовательности классических соударений. В непрерывном приближении мы вводим средний потенциал на расстоянии r от оси цепочки, т. е.

$$U(r) = \int_{-\infty}^{\infty} V(R = \sqrt{z^2 + r^2}) \frac{dz}{d}, \quad (2,2)$$

где $V(R)$ — ионно-атомный потенциал и d — расстояние между атомами в цепочке. Хотя $U(r)$ определяется как средний потенциал, относящийся к цепочке, интересно отметить, что $U'(p)d$ определяет рассеяние уже в однократном соударении с атомами согласно (2,1).

Если R ненамного больше a , потенциал $V(R)$ является по существу потенциалом типа Томаса — Ферми и мы можем положить

$$V(R) = \frac{Z_1 Z_2 e^2}{R} \varphi_0 \left(\frac{R}{a} \right); \quad (2,3)$$

здесь a — экранирующая длина ионно-атомного взаимодействия, равная *) $a = a_0 \cdot 0,8853 (Z_1^{2/3} + Z_2^{2/3})^{-1/2}$, и $\varphi_0(R/a)$ — функция Ферми для изолированного атома ^{6, 9}. Из (2,2) видно, что в общем случае зависимость U от $1/r$ на одну степень более слабая, чем зависимость V от $1/r$. Если справедливо (2,3), то мы можем записать U в виде

$$U(r) = \frac{Z_1 Z_2 e^2}{d} \xi \left(\frac{r}{a} \right). \quad (2,4)$$

Эта формула справедлива, если применим потенциал Томаса — Ферми (2,3). Относительно точная оценка $\xi(r/a)$ для средних значений r/a дана в работе ¹⁰. Для наших целей мы используем несколько более простые оценки. Для того чтобы сделать качественно понятным поведение ξ (т. е. U), мы заметим, что $\varphi_0 \approx 1$ для $R/a \ll 1$ и, согласно (2,2) и (2,4),

*) В дальнейшем часто подразумевается, что $Z_1 \ll Z_2$, так что a можно считать равным $a_0 \cdot 0,8853 Z_2^{-1/3}$.

функция $\xi(r/a)$ при малых r должна тогда возрасти логарифмически:

$$\xi\left(\frac{r}{a}\right) \approx 2 \ln\left(\frac{Ca}{r}\right) \quad \text{для } r < Ca, \quad (2,5)$$

где $2 \ln C$ — постоянная интегрирования, определяемая экранированием. Приближение несколько лучшее, чем (2,5), и применимое для всех значений r дается выражением, именуемым в дальнейшем стандартным потенциалом:

$$\xi = \left(\frac{r}{a}\right) - \ln \left[\left(\frac{Ca}{r}\right)^2 + 1 \right]. \quad (2,6)$$

Согласно (2,6) $\xi \sim (Ca/r)^2$ для $r > Ca$. Даже если ξ в формуле (2,6) для больших r быстро уменьшается, это выражение становится менее точным, когда $r \gg a$. Обычно для C мы будем использовать значение $C = \sqrt{3}$, которое повсюду довольно хорошо применимо. При малых r/a лучшее соответствие получается при меньшем значении C , тогда как большие r/a требуют несколько большего значения C . Кроме таких оценок $U(r)$, мы иногда будем рассматривать важную атомную область, где $R \sim a$ и $r \sim a$, так что V ведет себя как $\sim R^{-2}$ и $\xi(r/a)$ становится равной $\xi \sim \pi a/2r$. Точность приведенных выше приближений указана в работе ¹⁰.

Формула (2,6) соответствует простому выражению для электронной плотности $\rho(R)$ и атомному потенциалу $V(R)$ в (2,5), т. е.

$$\rho(R) = \frac{3}{4\pi} Z_2 \frac{(Ca)^2}{[R^2 + (Ca)^2]^{5/2}}, \quad (2,6')$$

$$V(R) = Z_1 Z_2 e^2 \left[\frac{1}{R} - \frac{1}{(R^2 + Ca^2)^{1/2}} \right]. \quad (2,6'')$$

Ограниченность стандартного атомного потенциала (2,6) отчетливо видна, если мы попытаемся вычислить средний квадрат атомного радиуса \bar{R}^2 . Эта величина, согласно (2,6), логарифмически расходится. Однако это обстоятельство обычно не будет важно для наших вычислений.

2.2. Условие для непрерывного приближения и критических углов *)

Качественное условие для непрерывного приближения мы получим, если потребуем, чтобы рассеяние на расстояниях, близких к расстоянию наибольшего сближения, было обусловлено многими атомами. В этом случае время соударения Δt , умноженное на компоненту скорости, параллельную цепочке $v \cos \psi \approx v$, будет велико по сравнению с d . Время соударения имеет порядок $r_{\min}(l)/v \sin \psi$, где l — прицельный параметр цепочки, r_{\min} — соответствующее расстояние наибольшего сближения. Итак, условие имеет вид

$$\Delta t \cdot v \cos \psi \approx \frac{r_{\min}(l)}{\psi} > d. \quad (2,7)$$

Применим условие (2,7) в его наиболее ограничивающей форме, а именно потребуем его выполнения для $l = 0$, т. е. для $r_{\min}(0)$. Последняя величина является функцией ψ . Для краткости будем просто писать r_{\min} вместо $r_{\min}(l = 0, \psi)$. Расстояние наибольшего сближения определяется условием

$$U(r_{\min}) = \frac{1}{2} M_1 v^2 \sin^2 \psi. \quad (2,8)$$

*) Детальное обсуждение см. в приложении I, в частности (I,8), (I,20) и (I,21).

Видно, что r_{\min} быстро возрастает при уменьшении ψ . Согласно (2,7) критический угол получается путем подстановки в (2,8) значения $r_{\min} = d\psi$.

Если энергия $E = M_1 v^2/2$ возрастает при фиксированном значении ψ , то r_{\min} в (2,8) стремится к нулю. Поэтому можно ожидать, что при высоких энергиях применимо (2,5), и тогда условие (2,7) вместе с (2,8) приводит к требованию

$$\frac{Ca}{\psi d} \exp\left(-\frac{\psi^2 d}{2b}\right) > 1,$$

где $b = Z_1 Z_2 e^2/E$ — диаметр соударения в лабораторной системе координат.

При возрастании ψ от нуля неравенство нарушается, во-первых, за счет быстрого уменьшения экспоненты при условии, что $Ca/\psi d$ может оставаться большим. Следовательно, условие (2,7) будет выполняться, если

$$\psi < \psi_1 = \sqrt{\frac{2b}{d}} = \sqrt{\frac{E_1}{E}}, \quad E_1 = \frac{2Z_1 Z_2 e^2}{d} \quad (2,9)$$

при условии, что $Ca/\psi_1 d$ больше единицы, т. е. приблизительно

$$\psi_1 < \frac{a}{d} \quad \text{или} \quad E > E' = 2Z_1 Z_2 e^2 \frac{d}{a^2}, \quad (2,9')$$

где $a/d \sim 1/20$, так что энергия E' в несколько сотен раз больше, чем E_1 . Согласно (1,3) условие (2,9) может быть сформулировано как $\varepsilon > \varepsilon' = 2(d/a) M_2/(M_1 + M_2)$. Если $M_1 \ll M_2$, то отсюда получим $\varepsilon \gtrsim 2dZ_2^{1/3} a_0^{-2}$.

Если ψ удовлетворяет условию (2,9), то непрерывный потенциал (2,4) можно использовать и, в соответствии с этим, частица не может подойти к оси цепочки ближе чем на расстояние $\sim a$. Поскольку обычно E_1 много больше, чем E_c в (1,1), угол ψ_1 велик по сравнению с критическим углом каналирования α_c . Поэтому в определенной области высоких энергий, заданной (2,9), где преобладает электронное торможение, мы можем использовать поперечный потенциал (2,4) с критическим максимальным углом порядка ψ_1 , т. е. эффективное максимальное значение потенциала оказывается порядка $2Z_1 Z_2 e^2/d$. В некоторых отношениях этот максимальный потенциал исключительно прост. Он не зависит от полной энергии частицы и от атомного радиуса экранирования a . Он является функцией $Z_2 e/d$, т. е. величины заряда, приходящегося на единицу длины цепочки.

При низких энергиях, где (2,9') уже не применимо, мы получаем приближенное выражение для критического угла, введя (2,6) в (2,8) и (2,7). Это приводит к условию

$$\psi < \psi_2 = \left(\frac{Ca}{d\sqrt{2}} \psi_1\right)^{1/2}, \quad (2,10)$$

и так как $C/\sqrt{2} \approx \sqrt{3}/\sqrt{2} \sim 1$, критический угол ψ_2 можно найти, когда

$$\psi_1 > \frac{a}{d} \quad \text{или} \quad E < E' \quad (2,10')$$

(см. (2,9')). Интересным следствием (2,10) является то, что высота потенциального барьера, получаемая возведением в квадрат правой части (2,10) и умножением на E , уменьшается пропорционально $E^{1/2}$, а не остается постоянной, как в случае высоких энергий. В противоположность ψ_1 в (2,9), критический угол ψ_2 в (2,10) зависит от атомного радиуса a и от поведения экранированного атомного потенциала. По этой причине (2,10) является лишь грубой оценкой, и вряд ли можно ожидать, чтобы эта

оценка была справедлива при очень низких энергиях. В дальнейшем мы главным образом будем рассматривать случай высоких энергий, когда применимы (2,9) и (2,9'). Другой предел, определяемый (2,11), будет обусловлен лишь кратко, но в общем последующее описание применимо также, когда имеет место (2,10).

Уже результат, описываемый формулой (2,9), дает качественное представление о поведении пучка частиц, движущихся через решетку. Если начальный угол ψ меньше ψ_1 , то применимо представление о непрерывной цепочке, частицы испытывают отталкивательные столкновения с цепочкой и покидают цепочки под теми же самыми углами ψ , которые они имели до столкновений. Такие частицы вряд ли подходят близко к атомам, и их угол ψ не изменяется, как было бы при обычном многократном рассеянии. Такой пучок частиц можно назвать направленным пучком, причем условие направленности записывается в виде $\psi < C\psi_1$, где C' оказывается порядка 1—2. Для направленного пучка частиц приближение ненаправленного движения, упоминавшегося в гл. 1, неприменимо.

На основании выражения (2,5) для непрерывного потенциала может показаться, что при $r = 0$ барьер бесконечно высок. Однако, во-первых, из (2,9) мы видим, что непрерывное описание не вполне применимо, когда $\psi \gtrsim \psi_1$ (более подробное вычисление критических углов см. в приложении I).

Во-вторых, если мы используем непрерывное описание, уже тепловые колебания атомов будут приводить к размазыванию потенциала вблизи $r = 0$ с максимумом $\sim Z_1 Z_2 e^2 d^{-1} \ln (C^2 a^2 / \rho^2)$; где ρ — амплитуда колебания, а результирующий максимальный потенциал остается порядка E_1 . С обеих точек зрения, если $\psi > C'\psi_1$, то частица движется довольно свободно через решетку и может легко рассеяться на атомах обычным способом. Во многих отношениях в таком случае проникновение происходит, как и в неупорядоченной системе. Поэтому мы назовем эту часть пучка неупорядоченным пучком.

2.3. К л а с с и ч е с к а я р е з е р ф о р д о в с к а я т е н ь п о з а д и а т о м а

Простым и наглядным примером является тень, возникающая позади центра отталкивания, рассеивающего внешний параллельный пучок частиц. Рассеяние предполагается классическим (см. в приложении II (II, 4) и (II, 5)). Допустим, что перпендикулярно пучку имеется экран на расстоянии d позади рассеивающего центра. Этот идеализированный эксперимент может быть представлен, например, парой атомов, один из которых служит рассеивающим центром, а другой помещен на экране, и мы хотим найти вероятность попадания частиц во второй атом.

Примером почти изолированной пары атомов могут служить, например, два ближайших соседних атома в решетке алмаза, т. е. два атома, расположенные в направлении $\langle 111 \rangle$. Такие пары можно рассматривать и как неполные цепочки с двумя последовательно занятыми и незанятыми местами. Эффект этот имеет место не только в одноатомном веществе, например таком, как кремний, но и в таких веществах, как, например, ZnS, когда все атомы S экранируются атомами Zn в одном направлении и наоборот — в противоположном направлении.

Для простоты мы рассмотрим только резерфордовское рассеяние *), соответствующее прицельным параметрам $p \lesssim a$. Пусть центр рассеяния

*) Задача расчета формы тени для кулоновского потенциала с экранировкой по Фирсову была решена Ю. В. Мартыненко (ФТТ 6, 2003 (1964)). (Прим. ред.)

находится на оси z , а пучок параллелен этой оси. Частица с прицельным параметром p попадает на экран на расстоянии r от оси z , и для малых углов отклонения величина r дается выражением

$$r = p + \frac{b}{p}d, \quad (2,11)$$

где $b = Z_1 Z_2 e^2 / E$. Расстояние r имеет минимальное значение $r_{\min} = 2 \sqrt{bd}$ при $p = \sqrt{bd}$. Следовательно, область тени как функция расстояния d имеет форму параболы, так как ее край находится при $r = r_{\min} \propto d^{1/2}$.

Для того чтобы попасть в центр экрана, мы должны нацелить пучок под углом $\psi_{\min} = 2 \sqrt{b/d} = \psi_1 \sqrt{2}$, где ψ_1 дается выражением (2,9). Распределение интенсивности на экране легко получается из (2,11). Пусть $f(r)$ — интенсивность на экране, причем внешний пучок содержит одну частицу на единицу площади. Тогда для больших r $f(r)$ стремится к единице, тогда как для $r < r_{\min}$ $f(r) = 0$. Частицы, нацеленные на $r < r_{\min}$, выталкиваются при рассеянии как раз за пределы r_{\min} , где $f(r)$ имеет пик.

В самом деле,

$$f(r) = \begin{cases} 0, & r < r_{\min}, \\ \frac{1}{2} \left[\left(1 - \frac{r_{\min}^2}{r^2} \right)^{1/2} + \left(1 - \frac{r_{\min}^2}{r^2} \right)^{-1/2} \right], & r > r_{\min}. \end{cases} \quad (2,12)$$

Форма края при $r = r_{\min}$ размывается, если принимаются во внимание квантовые поправки. Размытие остается малым, только когда $\kappa = 2Z_1 Z_2 v_0 / v$ велико по сравнению с единицей (ср. (2,29)).

Число частиц, не попавших на экран внутри r_{\min} , составляет πr_{\min}^2 . Число частиц, не попавших на экран внутри окружности радиуса r ,

составляет $\pi r^2 - \int_{r_{\min}}^r 2\pi r f(r) dr = \pi r^2 \{1 - (r_{\min}^2/r^2)^{1/2}\}$. Для этого сле-

дует, что при больших r в резерфордовском рассеянии, если $p \ll d$, компенсируется только половина прошедших мимо частиц. Легко показать, что для экранированных атомных областей полная компенсация наблюдается для r , больших a . На самом деле, когда справедливо (2,6) для $r = Ca$ получается 75%-ная компенсация. Таким образом, для быстрых частиц, подчиняющихся (2,9'), компенсация разделяется на две равные части: одна наблюдается при $r \gtrsim 2(bd)^{1/2}$, или $\psi \gtrsim \psi_1 \sqrt{2}$, а другая — при $r \sim Ca$, или $\psi \sim Ca/d$.

Критический угол ψ_{\min} для пары атомов, по-видимому, очень близок к критическому углу в случае идеальной цепочки. Однако существуют различия, имеющие важное значение. Если мы наклоним пучок, например, на угол $\psi_{\min}/2$, наибольшее приближение к центру экрана будет $r_{\min}/2 = \sqrt{bd}$. Это расстояние много меньше, чем соответствующее расстояние для идеальной цепочки, примерно равное a в случае, когда (2,9) справедливо. Действительно, и для цепочки, и для двух атомов мы должны предположить справедливость (2,9) для того, чтобы за это явление было ответственно резерфордовское рассеяние. Поэтому пара атомов гораздо менее эффективно отталкивает атомы, чем цепочка. Другое различие между парами атомов и цепочками состоит в том, что пара является менее классической, поскольку происходит всего лишь одно столкновение вместо многих. Однако наиболее важное различие между парами атомов и цепочками состоит в том, что в случае цепочки, как будет показано ниже, многократное рассеяние мало.

2.4. Атомные плоскости

Другой случай, представляющий интерес, — это атомные плоскости. Рассмотрим частицу, движущуюся хотя и не в направлении какой-либо главной цепочки, но все же почти параллельно плоскости решетки. При этом должна быть некоторая корреляция между соударениями с атомами, хотя и более слабая и менее определенная, чем в цепочке. Следовательно, можно ожидать эффектов от атомных плоскостей при прохождении около них частиц. Как и в случае пары атомов, представляет интерес выяснить сравнительные достоинства плоскостей и цепочек.

Плоскость может привести к возрастанию направленности в движении частицы, если на своем пути, определяемом непрерывным потенциалом, частица испытывает много столкновений с атомами. Поэтому мы оценим прежде всего потенциал равномерно заполненной плоскости, которая получилась бы, если бы атомы распределялись по плоскости равномерно *). Непрерывный потенциал, как функция расстояния от плоскости, имеет вид

$$Y(y) = Nd_p \int_0^{\infty} 2\pi r V(R = \sqrt{y^2 + r^2}) dr, \quad (2,13)$$

где Nd_p — среднее число атомов на единицу площади плоскости, d — расстояние между плоскостями. Потенциал взаимодействия между ионом и атомом $V(R)$ определяется выражением (2,3). Потенциал $Y(y)$ аналогичен потенциалу цепочки (2,2), но меньше в $\sim 2a/d$ раз, когда $r \leq 2a$. К тому же в плоскости (x, z) , т. е. для $y = 0$, потенциал (2,13) имеет конечную величину:

$$Y(0) = Nd_p \int_0^{\infty} 2\pi R V(R) dR = \pi Z_1 Z_2 e^2 N d_p \bar{R}, \quad (2,14)$$

где \bar{R} — средний радиус атома:

$$\bar{R} = Z_2^{-1} \int_0^{\infty} 4\pi \rho(R) R^3 dR.$$

Согласно модели Ленца — Йенсена⁹ $\bar{R} = 2,68a$, в то время как, согласно (2,6), $\bar{R} = 2Ca$. При помощи стандартного атомного потенциала (2,6) получается простая оценка для потенциала $Y(y)$

$$Y(y) = 2\pi Z_1 Z_2 e^2 Nd_p [(y^2 + C^2 a^2)^{1/2} - y]. \quad (2,15)$$

Это выражение может быть сравнено с соответствующим выражением для цепочки (2,6).

Критерий применимости непрерывного потенциала для плоскости более сложный, чем для цепочки. Пусть, когда частица находится далеко от плоскости, угол между направлением ее движения и плоскостью равен θ , т. е. поперечная энергия равна $E_{\perp} = E\theta^2$. Даже если вклад в отклонение частицы дают многие атомы, существует неопределенность в расстоянии наибольшего приближения к плоскости y_{\min} . В отличие от случая цепочки, частица обычно не отклоняется атомами, лежащими непосредственно ниже ее траектории, но может случиться, что такой атом находится непосредственно вблизи траектории при максимальном сближении. Поэтому потребуем, чтобы при этих обстоятельствах отклонение в однократном столкновении было

*) Идеальная плоскость не имеет преимущественного направления. Можно считать, что атомы распределены как двумерная жидкость или — в простых оценках — как неупорядоченный газ.

меньше чем на угол φ . Согласно (2,15), т. е. для стандартного атомного потенциала, y_{\min} определяется из условия

$$\theta^2 = 2\pi b N d_p [(y_{\min}^2 + C^2 a^2)^{1/2} - y_{\min}], \quad (2,16)$$

и мы требуем, чтобы

$$\theta > \varphi = -\frac{dU'(y_{\min})}{2E} = b \frac{1}{y_{\min}} \frac{1}{1 - (y_{\min}^2/C^2 a^2)}, \quad (2,17)$$

где выражение, стоящее справа, получается из стандартного атомного потенциала (2,6). Комбинируя (2,16) и (2,17), находим, что они содержат два безразмерных параметра $\xi = y_{\min}/Ca$ и $\alpha = E_p/E$, где

$$E_p = \frac{Z_1 Z_2 e^2}{2\pi C^3 a^3 N d_p} \sim Z_1 Z_2^2 \cdot 30 \text{ эв}. \quad (2,18)$$

Тогда условие (2,17) эквивалентно требованию

$$\xi^2 (1 + \xi^2)^2 [(\xi^2 + 1)^{1/2} - \xi] > \alpha. \quad (2,19)$$

Если мы требуем, чтобы $y_{\min} \approx a$, то это приводит к $E > 3E_p$. Фактически неравенство (2,19) показывает, с одной стороны, что непрерывный потенциал почти никогда не применим на расстояниях, малых по сравнению с a , даже если энергия E очень велика. С другой стороны, даже для очень низких энергий потенциал применим на расстояниях, сравнимых с радиусом атома $\bar{R} \sim 2Ca$. Ввиду сравнительно медленного изменения $Y(y)$ с y мы можем обычно предположить, что потенциальный барьер плоскости не выше чем

$$Y_{\text{эфф}} = \frac{1}{2} Y(0) \quad (2,20)$$

и для очень низких значений E/E_p барьер становится несколько ниже. До сих пор мы обсуждали лишь одно из условий для описания непрерывных плоскостей. Восполним этот пробел, описав плоскость как «цепочку цепочек».

2.5. Описание плоскости как цепочки цепочек

Пределы применимости непрерывного описания менее очевидны для плоскостей, чем для цепочек. Некоторые аспекты свойств плоскостей иллюстрируются следующей идеализированной картиной. Атомная плоскость может рассматриваться как цепочка цепочек, если углы с основной цепочкой не очень велики по сравнению с ψ_1 . Этот случай представляет особенный интерес также и с точки зрения изучения взаимосвязи эффектов цепочек и плоскостей.

Предположим, что угол ψ с направлением, параллельным основным цепочкам, порядка характеристического угла ψ_1 , так что в широкой области прицельных параметров l для цепочек эти цепочки можно рассматривать как непрерывные. Тогда отклонение может быть описано в виде двумерного движения в плоскости, перпендикулярной цепочкам, т. е. в виде поперечного движения. Цепочки выстроены в правильную решетку, так что плоскость состоит из ряда цепочек, т. е. плоскость может быть представлена как совокупность непрерывных цепочек. Скорость поперечного движения есть $v_{\perp} = v\psi$, и отклонение цепочкой определяется величиной $U(r)$. Если угол отклонения φ_{\perp} при поперечном движении мал, он может быть легко получен путем интегрирования силы, и результат может быть выражен через ранее вычисленный потенциал плоскости Y (см. (2,13)):

$$\varphi_{\perp} = -\frac{d_s Y'(l)}{2E\psi^2}, \quad (2,21)$$

где d_s — расстояние между цепочками. Из (2,13) видно, что произведение $d_s Y$ зависит от постоянных решетки только через $d_s N d_p = d^{-1}$, где d — расстояние между атомами в цепочках.

Сначала мы можем рассмотреть затенение позади одной цепочки аналогично тому, как мы это делали в случае затенения одним атомом при резерфордовском рассеянии. Это дает возможность изучить также случай двух цепочек и применимость приближения непрерывной плоскости. Рассмотрим частицу, которая движется перпендикулярно цепочке в направлении положительной оси x с прицельным параметром l по отношению к цепочке, помещенной в начале координат $(x, y) = (0, 0)$. Согласно (2,21) частица достигает линии $x = d_s$ на расстоянии y от оси x , где

$$y = l + \frac{d_s^2 Y'(l)}{2E\psi^2}. \quad (2,22)$$

Мы можем записать $y = \Phi d_s$ и найти из (2,22) минимальный угол Φ_{\min} , при котором центр цепочки может быть достигнут в результате затенения предыдущей цепочкой:

$$\Phi_{\min} = \frac{3}{2} \left(\frac{\pi}{2} \frac{\psi_1^2}{\psi^2} \frac{C^2 a^2}{d_s^2} \right), \quad \text{если} \quad \psi^2 \ll \psi_1^2 \frac{\pi d_s}{2Ca}. \quad (2,23)$$

Если неравенство в (2,23) не выполняется, то оценки Φ_{\min} являются не вполне точными, так как для малых прицельных параметров l приближение непрерывной цепочки уже не применимо. Если неравенство (2,23) выполняется, угол $\psi\Phi_{\min}$ остается меньшим, чем угол, соответствующий потенциалу непрерывной плоскости. Действительно, эффективная потенциальная энергия, соответствующая Φ_{\min} , равна

$$Y_\psi = E\psi^2\Phi_{\min}^2 = Y(0) \cdot \frac{9}{4} \frac{1}{(4\pi)^{1/3}} \left(\frac{\psi^2}{\psi_1^2} \frac{Ca}{d_s} \right)^{1/3}. \quad (2,24)$$

Таким образом, эффект плоскости постепенно исчезает вблизи направления цепочки. Это означает, что цепочка может заметно выделяться в плоскости. Однако для цепочек с высокими индексами барьер, принадлежащий (2,9) или (2,10), может быть меньше барьера для плоскости, и такие цепочки могут быть поглощены эффектом плоскости.

2.6. Сравнение поперечных потенциалов

Для трех случаев, т. е. для каналов, цепочек и плоскостей, мы оценили непрерывные потенциалы, а также рассмотрели случай пары атомов. Для частиц высоких энергий (ср. (2,9)) потенциальные барьеры для главных цепочек (и пар атомов) порядка $4Z_1Z_2e^2/d \sim Z_1Z_2 \cdot 20 \text{ эв}$, так как $d \sim 5a_0$. Барьеры для главных плоскостей (ср. (2,20)) $5Z_1Z_2e^2Nd_p a \sim \sim 5Z_1Z_2^{2/3} \text{ эв}$ и, таким образом, меньше, чем барьеры для цепочек, на множитель $\sim 4Z_2^{1/3}$, так что критические углы меньше в $\sim 2Z_2^{1/6}$ раз. Барьер для собственно каналирования, который возможно составляет примерно 5 эв для протонов, значительно ниже, чем для двух других случаев. При сравнении эффектов цепочек и плоскостей прежде всего надо иметь в виду, что потенциал цепочки убывает с расстоянием более быстро, чем потенциал плоскости; оба потенциала сравниваются на расстояниях порядка $d/2$. Более быстрое спадание потенциала цепочки способствует тому, что движение к центру атомов цепочки более чувствительно, например, к тепловым колебаниям атомов, что будет рассмотрено ниже. Кроме того, есть разница между цепочками и плоскостями, поскольку в первом случае движение частицы двумерно, в то время как во втором случае движение одномерно. Однако и цепочки, и плоскости имеют то общее свойство, что производят разделение пучка на направленную часть, которая не прони-

кает через потенциальные барьеры, и неупорядоченную часть, которая проникает через барьеры. В обоих случаях направленный пучок остается таковым на расстояниях, больших $\sim a$. В этом отношении атомные пары отличаются от цепочек и плоскостей.

2.7. К в а н т о в а я т е н ь п о з а д и а т о м а

В дополнение к классическому рассмотрению тени позади атома мы можем, наконец, рассмотреть тень квантовомеханически, в приближении, когда к однократным столкновениям применима квантовая теория возмущений. При этом выясняется характерная особенность эффектов цепочки при волновом рассмотрении. Основным моментом в последующем рассмотрении является то, что мы имеем дело не со стандартным случаем теории рассеяния, когда рассеянная волна регистрируется на бесконечности.

Как и раньше, мы принимаем, что центр рассеяния находится в начале координат с потенциалом $V(\mathbf{R})$, где $\mathbf{R} = \mathbf{R}(x, y, z)$. На расстоянии d позади центра помещается экран с координатами $\mathbf{R}' = (x', y', z' = d)$. Волновая функция падающей частицы $\exp(ikz)$, где $k = M_1 v / \hbar$. Углы рассеяния полагаются малыми. Параметр экранирования a потенциала мал по сравнению с расстоянием между атомами d . В первом приближении теории возмущений волновая функция $\psi(\mathbf{R}')$ принимает вид

$$\psi(\mathbf{R}') = \exp(ikd) - \frac{M_1}{2\pi\hbar^2} \int \frac{\exp(ik|\mathbf{R}-\mathbf{R}'|)}{|\mathbf{R}-\mathbf{R}'|} V(\mathbf{R}) \exp(ikz) d^3R. \quad (2,25)$$

Так как все координаты в направлениях x и y малы по сравнению с d , мы находим в результате последовательного разложения $|\mathbf{R}-\mathbf{R}'|$ и интегрирования по z

$$\psi(\mathbf{R}') = \exp(ikd) \left[1 - \frac{M_1}{2\pi\hbar^2} \int dx \int dy U(r) \exp \left\{ \left(\frac{ik}{2d} \right) [(x-x')^2 + (y-y')^2] \right\} \right], \quad (2,26)$$

где $U(r)$ дается выражениями (2,2) и (2,4).

Здесь важно отметить, что экспонента в интеграле является быстро осциллирующей функцией. На самом деле, так как U содержит параметр экранирования a , экспонента изменяется быстро, если

$$\frac{a^2}{\lambda d} \gg 1. \quad (2,27)$$

Для $Z_2 \gg Z_1$ и при $d \approx 5a_0$ неравенство (2,27) эквивалентно

$$\frac{M_1}{m} \frac{v}{v_0} \frac{1}{5Z_2^{2/3}} \gg 1 \quad (2,27')$$

и, следовательно, условие (2,27) легко выполняется для тяжелых частиц. Другими словами, выражение (2,27) означает, что импульс частицы $M_1 v$ должен быть много больше среднего импульса $mv_0 Z_2^{2/3}$ электрона в атоме Томаса — Ферми. Мы приходим к выводу, что даже при рассмотрении методом возмущений имеет место значительная локализация пути (аналогичный вывод был получен и при классическом рассмотрении). Это происходит потому, что расстояние между атомами d невелико согласно выражению (2,27).

Результаты, полученные в (2,26) и (2,27), показывают, что в общем квантовомеханическом рассмотрении вклады в волновую функцию в определенной точке пространства обусловлены рассеянием атомными полями

внутри узкого конуса, противоположного направлению движения. Пренебрежение всеми атомными полями, кроме тех, которые находятся внутри конуса (или, например, цепочки) эквивалентно основным предположениям, изложенным на стр. 255.

Введем (2,4) в (2,26):

$$|\psi(\mathbf{R}')|^2 = \left| 1 - \frac{\kappa}{4\pi} \iint \frac{dx dy}{\lambda d} \xi\left(\frac{r}{a}\right) \exp \left\{ \frac{i}{2\lambda d} [(x-x')^2 + (y-y')^2] \right\} \right|, \quad (2,28)$$

где $r^2 = x^2 + y^2$. Предположим, что $x' = y' = 0$, и применим оценку (2,6) для $\xi(r/a)$. Тогда для малых значений κ в случае, когда справедливо (2,27), имеем

$$|\psi(0, d)|^2 \approx \left| 1 - \frac{\kappa}{2} \left[\frac{\pi}{2} + i \ln \left(\frac{a^2 C^2 \gamma}{2\lambda d} \right) \right] \right|^2 \sim 1 - \frac{\kappa \pi}{2}, \quad (2,29)$$

где γ — константа Эйлера. Правая часть является пределом при малых κ хорошо известного результата для чисто кулоновского поля $|\psi(0, d)|^2 = \pi \kappa [\exp(\pi \kappa) - 1]^{-1}$. Для полей притяжения мы можем рассматривать κ как отрицательную величину и получить возрастание интенсивности позади рассеивающего центра.

3. СТАТИСТИЧЕСКОЕ РАССМОТРЕНИЕ И ПОТЕРИ ЭНЕРГИИ

В предыдущей главе были рассмотрены основные проблемы изучаемой задачи, а также доступность для пучка частиц различных областей в кристаллической решетке. Чтобы изучить общее поведение пучка частиц в кристаллической решетке более обстоятельно, мы можем в качестве первого приближения использовать простое непрерывное изображение цепочек (и плоскостей). В этом приближении, естественно, подразумевается сохранение компоненты скорости, параллельной цепочке. Поэтому движение может быть изучено целиком, если рассмотреть проекции скорости на плоскость, перпендикулярную цепочке. В этом поперечном движении скорость вдали от цепочки равна $v_{\perp} = v \sin \psi \approx v\psi$ и соответствующая энергия поперечного движения есть $E_{\perp} = E \sin^2 \psi \approx E\psi^2$. Потенциал обозначаем через $U(\mathbf{r})$ и можем использовать некоторые приближенные формулы для $U(\mathbf{r})$, введенные в гл. 2.

3.1. С в о б о д н о е ф а з о в о е п р о с т р а н с т в о п р и п о п е р е ч н о м д в и ж е н и и

Применение оценок статистической механики к детальному изучению отдельных последовательных соударений с цепочкой является серьезной альтернативой подробного изучения отдельных последовательных столкновений с цепочкой атомов. Рассмотрим сначала простые конкретные статистические оценки. Используем непрерывное описание и будем рассматривать только поперечное движение в предположении, что все углы ψ являются малыми. При фиксированных значениях скорости и поперечной энергии E_{\perp} мы найдем двумерное распределение вероятности для полного потенциала $U_t = \sum U(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i)$, где U_i дается выражением (2,4) и $\mathbf{r}_i(x_i, y_i)$ — положение i -й цепочки атомов. Очевидно, мы можем, как обычно, ограничиться рассмотрением одной единичной ячейки в двумерной \mathbf{r} -плоскости, содержащей одну цепочку. Для большинства целей мы можем предположить, что единичная ячейка является кругом вокруг оси цепочки с радиусом r_0 , таким, что площадь круга равна $\pi r_0^2 = (Nd)^{-1}$. Мы часто пренебрегаем потенциалом, обусловленным соседними цепоч-

ками, так что потенциал становится просто $U_t \approx U(\mathbf{r})$; это приближение применимо, если поперечная энергия не очень мала.

Пучок частиц имеет некоторое начальное распределение вероятности, например соответствующее данному направлению в p_\perp -пространстве. Распределение $P(\mathbf{p}_\perp, \mathbf{r}, t)$ будет функцией времени t или глубины проникновения $z = vt$. Будет наблюдаться тенденция к установлению статистического равновесия в поперечном фазовом пространстве. Рассмотрим равновесное распределение внутри поперечной энергетической поверхности. Введем пространство импульсов как функцию \mathbf{r} , когда поперечная энергия имеет значение в интервале от E_\perp до $E_\perp + dE_\perp$. Так как объем в двумерном пространстве импульсов пропорционален dE_\perp , равновесное распределение вероятности принимает вид

$$P_0(E_\perp, \mathbf{r}) = \begin{cases} \frac{1}{A}, & E_\perp > U_t(\mathbf{r}), \\ 0, & E_\perp < U_t(\mathbf{r}), \end{cases} \quad (3,1)$$

где постоянная A — доступная площадь единичной ячейки, общая площадь которой равна $A_0 = N^{-1}d^{-1}$. Когда доступная часть единичной ячейки велика, или $A \approx A_0$, мы можем просто пренебречь перекрытием потенциалов цепочек. Это приводит к $P_0 = 1/A \approx 1/A_0$ и $U_t(\mathbf{r}) = U(\mathbf{r})$, где \mathbf{r} — расстояние до цепочки.

3.2. Одномерное распределение

Интересно отметить крайнюю простоту распределения вероятности в случае двумерного пространства, описываемого (3,1), по сравнению со случаем как одномерного, так и трехмерного пространства. Так, например, одномерное равновесие на энергетической поверхности, соответствующей непрерывным плоскостям, имеет вид

$$P_0(E_\perp, y) = \begin{cases} \frac{C}{d_p} \left(\frac{E_\perp}{E_\perp - Y(y)} \right)^{1/2}, & E_\perp > Y(y), \\ 0, & E_\perp < Y(y), \end{cases} \quad (3,2)$$

где d_p — расстояние между плоскостями, C — постоянная нормировки. При одномерном движении частицы находятся с максимальной вероятностью на краях запрещенных областей, где скорость наименьшая. Из формулы (3,2) вытекает несколько следствий, отличных от следствий из (3,1). Так, когда E_\perp велика, выше, чем Y_{\max} , все значения дозволены, но частица все еще «чувствует» потенциал — в противоположность (3,1) — и останавливается с возрастающей вероятностью вблизи плоскостей, где Y является наибольшим.

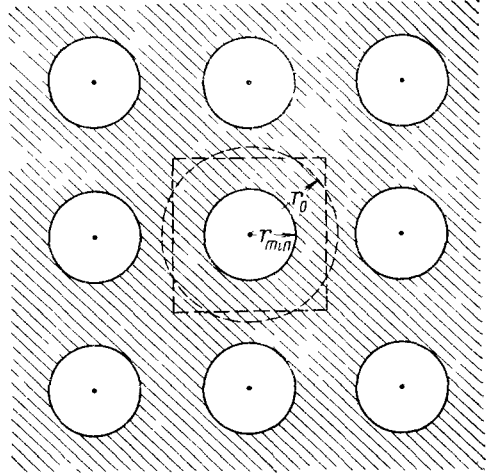


Рис. 1. Поперечная плоскость цепочек для случая простейшей кубической решетки.

Единичная ячейка представлена квадратом, заштрихованный пунктирный круг с радиусом r_0 приблизительно равен единичной ячейке. Заштрихованная площадь вне круга с радиусом r_{\min} представляет часть плоскости, доступную для заданной поперечной энергии. Согласно двумерному непрерывному приближению имеет место однородное распределение вероятности в заштрихованной области.

3.3. Тенденция к равновесию на поперечной энергетической оболочке

Изучая равновесное распределение на энергетической поверхности при поперечном движении, мы можем затем оценить, насколько быстро достигается равновесное распределение. Мерой этого является изменение среднего поперечного импульса $\langle p \rangle$. Предположим, что приближение цепочек можно считать хорошим приближением. Легко показать, что

$$\langle p_{\perp} \rangle = \langle p_{\perp} \rangle_0 \exp \left(-\frac{z}{\lambda_{\perp}} \right), \quad (3,3)$$

где $\langle \dots \rangle_0$ означает начальные средние значения для $z=0$ и где средняя длина свободного пробега частицы определяется из

$$\frac{1}{\lambda_{\perp}} = Nd \sin \psi \int_{-\infty}^{+\infty} [1 - \cos \varphi(l)] dl; \quad (3,4)$$

здесь $\varphi(l)$ — угол рассеяния при поперечном движении как функция прицельного параметра относительно цепочки. Нужно отметить, что $\lambda_{\perp} \sin \psi$ есть так называемая средняя длина свободного пробега в поперечном движении, т. е. перемещения на $\lambda_{\perp} \sin \psi$ в поперечной плоскости, в направлении $\langle p_{\perp} \rangle_0$. Если мы примем, что рассеяние максимального сближения превышает $\sim a$ и для потенциала цепочки в (2,4) используется приближение $\xi = \pi a/(2r)$, то получим путем простого расчета прямую оценку λ_{\perp} :

$$\frac{1}{\lambda_{\perp}} = \frac{\pi^2}{4} N da \frac{\psi_1^2}{\psi} \quad \text{для} \quad \xi \left(\frac{r}{a} \right) = \frac{\pi a}{2r}. \quad (3,5)$$

Следовательно, когда $\psi < \psi_1$, средняя длина свободного пробега λ_{\perp} меньше, чем величина $1/Nda\psi_1$, которая порядка 1000 атомных слоев или меньше. После того, как протон потеряет энергию, вероятно, порядка 1—10 кэв, будет достигнуто выравнивание распределения внутри поперечной энергетической поверхности.

Результаты (3,4) и (3,5) основываются на модели случайных соударений для поперечного движения в двумерной решетке цепочек. Однако, как говорилось в гл. 2 (стр. 263), эта решетка содержит цепочки цепочек, или плоскости. Когда направление p_{\perp} не сильно отличается от направления плоскости, снова имеет место уменьшение рассеяния, но теперь уже в двумерном движении. При этом ограничении применимы представления о непрерывных плоскостях и имеет место первичное выравнивание распределения при одномерном движении, приводящее к равновесию, описываемому (3,2). Средняя длина свободного пробега для одномерного равновесия должна быть порядка $\lambda_p \sim d_p/\varphi$, где φ — угол между v и плоскостью. На этом этапе нам нет нужды рассматривать дальше такие вопросы более детальным образом.

Быстрое рассеяние в азимутальном направлении показывает, что предположение о статистическом равновесии на поперечной энергетической поверхности часто является хорошим приближением. Более того, предположим, что условия эксперимента таковы, что первоначально усреднение производится фактически вокруг направления цепочки, т. е. по азимутальному углу. Далее мы исходим из выравнивания на поперечной энергетической поверхности, где распределение обладает стабильной симметрией для непрерывной картины.

3.4. Основные статистические усреднения при поперечном движении

Эти результаты оправдывают использование формулы (3,4). Как следствие (3,4), мы можем для любой функции f , зависящей от \mathbf{p}_\perp и \mathbf{r} , сначала получить ее среднее значение на энергетической оболочке

$$f(E_\perp) = \frac{1}{A} \int dx \int dy f(\mathbf{p}_\perp, \mathbf{r}), \quad (3,6)$$

или, что эквивалентно, для не слишком низких E_\perp

$$f(E_\perp) = \frac{1}{\pi(r_0^2 - r_{\min}^2)} \int_{r_{\min}}^{r_0} 2\pi r f(p_\perp, r) dr, \quad (3,6')$$

где $f(\mathbf{p}_\perp, \mathbf{r})$ — среднее от $f(\mathbf{p}_\perp, \mathbf{r})$ по углам, а r_{\min} определяется посредством соотношения $U(r_{\min}) = E_\perp$. Формула (3,6) неоднократно используется в дальнейшем. Если $r_{\min}^2 \ll r_0^2$, то нормированный множитель равен $(\pi r_0^2)^{-1} = Nd$ и верхний предел интегрирования часто может быть заменен на ∞ .

Когда поперечная энергия столь мала, что движение ограничивается небольшими, не связанными областями (собственно каналирование), интегрирование в (3,6) может быть проведено приблизительно внутри эллипса или круга вокруг минимума потенциала и с площадью, равной A .

Во-вторых, мы можем определить окончательное среднее значение f от величины $f(E_\perp)$ по распределению вероятности по ψ , т. е.

$$\langle f \rangle = \int g(E_\perp) f(E_\perp) dE_\perp, \quad (3,7)$$

где $g(E_\perp)$ есть плотность вероятности на единицу поперечной энергии.

Функция $g(E_\perp)$ будет изменяться с глубиной проникновения вследствие многократного рассеяния, т. е. из-за отсутствия сохранения поперечной энергии. Многократное рассеяние рассматривается в гл. 4. Перед этим мы выясним дальнейшие свойства частиц с заданной поперечной энергией. Действительно, до сих пор мы предполагали, что полная энергия частицы сохраняется. Следовательно, мы должны вычислить ядерное и электронное торможение для частиц с заданной поперечной энергией.

3.5. Статистическая оценка ядерного торможения

Когда частица проходит на расстоянии r от атома и испытывает отклонение на малый угол φ , этот угол выражается через потенциал $U(r)$, определяемый формулой (2,2) (ср. также (2,1)):

$$\varphi = -\frac{dU'(r)}{2E}. \quad (3,8)$$

Следовательно, энергия, переданная в этом упругом соударении, равна

$$T_n = \frac{d^2}{2M_2 v^2} [U'(r)]^2. \quad (3,9)$$

Для направленных частиц с данным значением E_\perp мы можем усреднить (3,9) по свободной части единичной ячейки согласно (3,6) и получить

$$T_n(E_\perp) = \frac{d^2}{2M_2 v^2} \frac{1}{A} \int dx \int dy \sum_j U'^2(|\mathbf{r} - \mathbf{r}_j|), \quad (3,10)$$

где \mathbf{r}_j — поперечные координаты цепочек. Так как обычно мы не рассматриваем слишком низкие поперечные энергии, мы можем ввести (3,6) в (3,10), предполагая $r_{\min}^2 \ll r_0^2$:

$$T_n(E_{\perp}) = \frac{\pi N d^3}{M_2 v^2} \int_{r_{\min}}^{\infty} r U'^2(r) dr, \quad (3,10')$$

где обычный верхний предел интегрирования r_0 более правильно заменен на ∞ . Средняя потеря энергии в (3,10) и (3,10') равна $T_n(E_{\perp}) = N d S_n(E_{\perp})$, где $S_n(E_{\perp})$ — сечение торможения для данного значения E_{\perp} . Интегрирование в (3,10) может быть проведено точно и результат выражен через E_{\perp} , если используется стандартный атомный потенциал (2,6).

Основной вклад в интеграл в (3,10) дает область вблизи нижнего предела r_{\min} . Если $U(r)$ изменяется как $r^{-\nu}$, когда $r \approx r_{\min}$, мы получаем прямо из (3,10) сечение ядерного торможения как функцию поперечной энергии

$$S_n(E_{\perp}) = \frac{\pi v}{4} d^2 \frac{E_{\perp}^2}{E} \frac{M_1}{M_2}, \quad (3,11)$$

потому что $U(r_{\min}) = E_{\perp}$. Так как ν равно примерно единице для $a < r_{\min} < 2a$ и медленно возрастает до значений ~ 2 для $r_{\min} > 2a$, величина ν в (3,11) не очень чувствительна к величине E_{\perp}^2 и (3,11) дает первую полезную оценку ядерного торможения. В то же самое время распределение значений индивидуальных энергетических потерь также дается неявно выражением (3,10). Сечение торможения (3,11) может быть сравнено с обычным ядерным торможением в беспорядочном газе (ср. (4,2)). При сравнении (3,11) с (4,2) оказывается, что $L_n(E_{\perp}) = (\nu/2)(E_{\perp}/E\psi_1^2)^2$. Эта величина много меньше, чем получаемая для обычного ядерного торможения при высоких энергиях, когда $L_n = \ln(1,29\epsilon) \sim 5 - 10$; следует заметить, что (3,11) применимо только для $E_{\perp} \ll E\psi_1^2$. Во всех случаях для высокоэнергичных частиц, сечение ядерного торможения S_n очень мало по сравнению с сечением при электронном торможении S_e .

3.6. Ядерные потери энергии при однократном столкновении с цепочкой

Вышеприведенное применение фазового пространства при поперечном движении привело к статистическим оценкам (3,10) и (3,11) среднего ядерного торможения. Однако представляет также интерес найти потерю энергии при индивидуальном столкновении между ионом и цепочкой. Пусть энергия частицы есть E , ее начальный угол ψ и l — прицельный параметр относительно цепочки.

Потеря энергии, приходящаяся на один атом, на расстоянии r дается выражением (3,9). При соударении с цепочкой r является некоторой функцией времени $r = r(t)$. Интегрируя (3,9) по траектории, мы затем получим потерю энергии относительно цепочки

$$\tau_n(l, \psi) = \frac{d}{2M_2 v} \int_{-\infty}^{\infty} U'^2[r(t)] dt. \quad (3,12)$$

Интегрирование выражения (3,12), содержащего радиальное движение $r(t)$, обычно не является простым, но может быть легко выполнено, если потенциал $U(r)$ пропорционален r^{-1} или r^{-2} . Кроме того, можно проверить, что интегрирование (3,12) по всем прицельным параметрам приводит к выражению для сечения торможения (3,10). В настоящем рассмотрении мы пренебрегаем более подробными оценками типа (3,12). Одна из причин этого состоит в том, что (за исключением случая крайне низких энергий) ядерные потери энергии пренебрежимо малы по сравнению с электронными потерями энергии.

3.7. Электронное торможение

Мы делали лишь самые приближенные оценки ядерного торможения, хотя этот случай может быть рассмотрен исчерпывающим образом и точность может быть легко улучшена. Электронное торможение является более сложным, поскольку мы должны различать несколько возможных случаев. Однако обычно можно надеяться, что для фиксированной энергии частицы, уменьшение E_{\perp} приводит к более медленному убыванию электронного торможения по сравнению с ядерным. Вследствие этого отношение электронного торможения к ядерному в направленном пучке будет выше, чем в неупорядоченном.

Прежде всего мы изучим важный случай электронного торможения при таких высоких скоростях частиц и таких низких атомных номерах Z_1 , когда применима формула Бете — Блоха. Эта формула может быть записана так:

$$\frac{dE}{dR} = S_e N Z_2 - \frac{4\pi Z_1^2 e^4}{mv^2} Z_2 N L_e, \quad (3,13)$$

где N — число атомов на единицу объема и S_e — сечение торможения, приходящееся на один электрон. Множитель L_e примерно дается выражением

$$L_e \approx \ln \left(\frac{2mv^2}{I} \right), \quad (3,14)$$

если только скорость так велика, что $x = v^2/v_0^2 Z_2 \gg 1$ ^{13,14}, $v/v_0 > Z_1^{2/3}$. Величина I — средний потенциал возбуждения, $I \approx I_0 Z_2$ и $I_0 \approx 10$ эв. Когда применимо условие (3,14), столкновения с электронами можно разделить на две группы: далекие резонансные соударения и близкие соударения с передачей электронам большого импульса (ср. у Бора¹²). Так как эти процессы являются преимущественно квантовомеханическими, применять классическое орбитальное рассмотрение ко всем деталям соударений между электроном и частицей нельзя. Четкое разграничение далеких и близких соударений производится на основании соответственно больших или малых переданных импульсов. Однако можно различать частицы, находящиеся вне электронных орбит, где происходят только резонансные столкновения, и внутри орбит, где происходят близкие столкновения, распределение вероятности которых по существу определяется Резерфордским законом рассеяния. Качественно хорошо известно из отклонений от формулы Бете^{12,15}, что для очень быстрых частиц в торможение дают одинаковый вклад как близкие, так и далекие столкновения. Оказывается, что это справедливо и количественно (правило равнораспределения¹⁶) при не слишком низких скоростях частиц. Подробное обсуждение зависимости энергетических потерь от пространственной траектории частицы произвольной скорости требует обобщения обычного описания и будет опубликовано отдельно.

На основании этих соображений кажется разумным для больших x заменить (3,13) выражением

$$\frac{dE}{dR}(\mathbf{R}) = S_e [(1 - \alpha) N Z_2 + \alpha \rho(\mathbf{R})], \quad (3,15)$$

где $\rho(\mathbf{R})$ — плотность электронов в той точке пространства, через которую движется частица, и $\alpha > 1/2$ тем ближе к $1/2$, чем выше величина $x = v^2/v_0^2 Z_2$. Этот результат непосредственно означает, что сечение торможения для быстрых частиц, проникающих через тонкую фольгу, может быть уменьшено самое большее примерно в два раза. Как мы увидим, сечение может также увеличиваться на множитель, немного больший единицы (ср. гл. 5). Возрастание квадрата флуктуации потери энергии

$d(\Delta E)^2/dR$ на длине пробега в случае, когда применимо (3,13), пропорционально $Z_2 N$. Вклад флуктуаций обусловлен только близкими соударениями. В данном случае этот вклад может быть получен заменой средней электронной плотности $Z_2 N$ на $\rho(\mathbf{r})$. Этот вклад разброса как функции \mathbf{r} становится равным (ср. у Бора¹²)

$$\left[\frac{d(\Delta E)^2}{dR} \right]_e = 4\pi Z_1^2 e^4 \rho(\mathbf{R}). \quad (3,16)$$

До некоторой степени аналогичная формула¹³ справедлива при скоростях $v < v_0 Z_2^{1/2}$. Согласно (3,16) разброс зависит от ρ более сильно, чем сечение торможения (3,15). Рассмотрим статистическое равновесие при заданной поперечной энергии E_\perp и введем эффективный заряд $Z_2^*(E_\perp)$, такой, что при $U(r_{\min}) = E_\perp$ число электронов на атом при не превышающем r_{\min} расстоянии от цепочки равно $Z_2^*(E_\perp)$. Усредняя (3,15) при помощи (3,6), находим, что рассеяние электронного торможения имеет вид

$$S_e(E_\perp) = S_e \left[1 - \alpha + \alpha \frac{Z_2^*(E_\perp)}{Z_2} \right], \quad (3,17)$$

где S_e дается (3,13). Отношение $Z_2^*(E_\perp)/Z_2$, согласно (3,22) и (3,6'),

$$\frac{Z_2^*(E_\perp)}{Z_2} = \frac{dr_{\min} U'(r_{\min})}{2Z_1 Z_2 e^2}. \quad (3,18)$$

Итак, $Z_2^*(E_\perp)/Z_2$ приблизительно равно $\gamma E_\perp / (E\psi_1^2)$, если вблизи r_{\min} $U(r) \propto r^{-\gamma}$ (ср. также (3,11)). Когда атомная модель (2,6) вводится в (3,18), получается следующая простая формула:

$$S_e(E_\perp) = S_e \left[1 - \alpha \exp \left(-\frac{2E_\perp}{E\psi_1^2} \right) \right]. \quad (3,19)$$

Формула (3,19) показывает, что уменьшение электронного торможения происходит в более узком интервале углов, чем эффекты цепочек, для которых необходимо проникновение к осям цепочек. Также ясно видна важность характеристического угла ψ_1 . Заслуживает внимания тот факт, что в (3,19) не входит радиус экранирования атома, несмотря на то, что эта формула основывается на (2,6), где радиус экранирования является важным параметром. Формула (3,19) содержит обычную погрешность, обусловленную непрерывными потенциалами, т. е. торможение не возрастает выше нормального S_e , когда $E_\perp \gg E\psi_1^2$ и компенсация уменьшения (ср. п. 2.1) не имеет места. Эта погрешность не является серьезной; однако вследствие этого превышение над нормальным сечением довольно мало.

Средний квадрат флуктуаций потерь энергии находится непосредственно из (3,16) и (3,6'):

$$\left(\frac{d(\Delta E)^2}{dR} \right)_e = 4\pi Z_1^2 e^4 N Z_2^*(E_\perp), \quad (3,20)$$

где $Z_2^*(E_\perp)$ может быть заменено оценками из (3,18) или (3,19).

3.8. Электронная потеря энергии при однократном соударении с цепочкой

Электронная потеря энергии $\tau_e(l, \psi)$ при однократном соударении с цепочкой для прицельного параметра l и начального угла ψ также может быть выведена из (3,13) и (3,15). Но мы пренебрегаем резонансным торможением, т. е. первым членом в (3,15), так как оно происходит незави-

симо от соударения с цепочкой. Потеря энергии при однократном соударении с атомом для прицельного параметра r получается тогда из второго члена в (3,15):

$$T_e(r) = \frac{S_e}{2} d\rho_s(r) = \frac{S_e}{2} \int_{-\infty}^{\infty} \rho(R = \sqrt{z^2 + r^2}) dZ, \quad (3,21)$$

где $\rho(R)$ — электронная плотность в атоме на расстоянии R от ядра и $\rho_s(r)$ — электронная плотность непрерывной цепочки:

$$\rho_s(r) = \frac{1}{4\pi Z_1 e^2} \frac{1}{r} \frac{d}{dr} [rU'(r)]. \quad (3,22)$$

В качестве примера мы снова выберем приближение $U = Z_1 Z_2 e^2 \pi a / 2dr$ и получим

$$\rho_s(r) \approx \frac{Z_2 a}{8d} \frac{1}{r^3}. \quad (3,23)$$

Затем проинтегрируем (3,12) по столкновениям с атомами вдоль цепочки, используя (3,23) и гиперболическую орбиту, соответствующую потенциалу в виде r^{-1} . Электронная потеря энергии в одном соударении с цепочкой для поперечной энергии $E_{\perp} = E\psi^2$ и прицельного параметра l принимает вид

$$\tau_e(l, \psi) = \frac{S_e Z_2 e}{8d} \frac{1}{\operatorname{tg} \psi} \frac{1}{l^2} \left[1 - \frac{b_{\perp}}{2l} \operatorname{arctg} \left(\frac{2l}{b_{\perp}} \right) \right], \quad (3,24)$$

где b_{\perp} определяется из $U(b_{\perp}) = E_{\perp}$, т. е. $b_{\perp} = \pi a \psi_1^2 / 4\psi^2$. Если мы проинтегрируем (3,24) по всем l , то получим формулу (3,18) с $\nu = 1$.

Чтобы оценить разброс энергетических потерь, можем сравнить максимальную потерю энергии при соударении с цепочкой, т. е. $\tau_e(0, \psi)$ в (3,24) с обычной максимальной переданной электрону энергией $2mv^2$. Отношение $\tau_e/2mv^2$ может быть много больше единицы. Если в (3,13) подставить выражение $L \approx 1,5 x^{1/2} = 1,5 (v^2/v_0^2 Z_2)^{1/2}$, которое применимо, когда x приблизительно порядка единицы¹³, то (3,24) приводит к

$$\tau_e < \tau_e(0, \psi) \approx \frac{a_0}{a} \left(\frac{a_0}{d} \right)^{1/2} \left(\frac{M_1}{m} \right)^{1/2} Z_1^{3/2} \cdot 70 \text{ эв}, \quad (3,25)$$

что составляет примерно 3 кэв для протонов. Поскольку это является верхним пределом для τ_e , потеря энергии обычно разделяется на порции, много меньшие (3,25), так как разброс мал.

4. РАССЕЯНИЕ НАПРАВЛЕННОГО И НЕУПОРЯДОЧЕННОГО ПУЧКОВ

Мы видим, что пучок быстрых частиц, характеризуемый некоторым распределением вероятности по направлениям, можно разделить на две части. Для углов, меньших ψ_1 (или ψ_2 при низких энергиях), мы имеем дело с направленной частью пучка, тогда как углы, большие по сравнению с ψ_1 , составляют неупорядоченную часть пучка. Часть его, заключенная в углах от ψ_1 до $2\psi_1$, образует переходную область. В большинстве случаев поведение обеих частей совсем разное. Так, оказывается, что направленная часть имеет меньшее сечение торможения $S(E_{\perp})$, чем неупорядоченная часть. Более того, в первом приближении обе части пучка вообще кажутся не связанными. Рассмотрим ион из неупорядоченной части пучка. Он может без труда сталкиваться с атомами и рассеиваться по другим направлениям внутри неупорядоченного пучка. Для того чтобы быть рассеянным в направленный пучок, необходимо довольно близкое соударение, т. е. прицельные параметры, много меньшие a . Однако когда ион уходит дальше от оси цепочки, он не может выравниваться, поскольку ионы в направленном пучке не подходят к цепочке ближе чем на расстояние порядка a . Поэтому рассеяние иона с переходом из неупорядоченного пучка в направленный, по-видимому, запрещено.

И наоборот, ион в направленном пучке будет при непрерывном приближении сохранять постоянный угол ψ вдали от цепочек, т. е. постоянную поперечную энергию E_{\perp} . При этом меняется только азимутальный угол (более или менее случайным образом). Это указывает на затруднительность рассеяния с переходом в неупорядоченный пучок. Поэтому важно обсудить те явления, которые могут быть ответственны за переходы между направленным и неупорядоченным пучками и за диффузию по углам внутри пучков, т. е. за несохранение поперечной энергии. При обсуждении мы можем провести различие между тремя группами явлений, ответственных за переходы между направленным и неупорядоченным пучками.

Первая группа имеет отношение к отклонениям от модели параллельных цепочек с потенциалом $U(\mathbf{r})$ или $U_t(\mathbf{r})$ (см. (3,4)). Отклонения могут происходить за счет тепловых колебаний, включая нулевые колебания атомов. Это означает, что сила, действующая на частицу, флуктуирует. Влияние флуктуаций положений будет изучено довольно подробно. Отклонения должны наблюдаться, когда в решетке имеются дефекты и загрязнения. Дефекты и загрязнения приводят к значительным эффектам рассеяния, величина которых, однако, является переменной, так что эти эффекты могут быть совсем малыми в чистых и совершенных кристаллах. Отклонения особого типа возникают из-за периодичности идеальной цепочки. Это вызывает флуктуации пробега относительно движения при непрерывном потенциале $U(\mathbf{r})$. Периодичность идеальных цепочек обычно приводит к возрастанию лишь небольшого эффекта рассеяния (см. приложение I).

Рассеяния второго типа происходят в результате отклонений от классического движения в консервативном поле сил. Необходимо оценить величину квантовомеханических поправок к классическому механическому движению (см. приложение II). Кроме того, однократное соударение между ионом и атомом является квазиупругим, так что поле сил не строго консервативно. В первом приближении отклонения от упругих соударений включаются в электронное торможение и тормозной эффект (см. ниже).

Обе вышеупомянутые группы явлений приводят в среднем к возрастанию E_{\perp} .

Третий эффект следует рассмотреть главным образом потому, что он приводит к уменьшению E_{\perp} . Предположим, что преобладает электронное торможение и что движение происходит в непрерывном потенциале. Если тормозящая сила направлена против движения и потеря энергии составляет δE , соответствующее среднее изменение E_{\perp} оказывается $\delta E_{\perp} \approx -\beta \delta E \cdot E_{\perp} / E$, где $\beta \sim 0,5 - 1$. Этот тормозной эффект, хотя он и мал, может в некоторых случаях конкурировать с многократным рассеянием. Мы можем сравнить тормозной эффект также с изменением поперечного потенциального барьера. При высоких энергиях E поперечный барьер постоянен, тогда как при низких энергиях он может уменьшаться как $E^{1/2}$ по мере торможения (см. (2,10)). Тогда тормозной эффект превышает уменьшение барьера.

4.1. Многократное рассеяние

При обсуждении изменений ψ или E_{\perp} вдоль траектории частицы полезно рассмотреть сначала обычный случай многократного рассеяния в неупорядоченной системе. Пусть ψ_x и ψ_y — углы с осью z проекций направления движения на плоскости $x = z$ и $y = z$ соответственно, так что $\psi = (\psi_x, \psi_y)$ и $\psi^2 = (\psi_x^2 + \psi_y^2)$. Тогда средний квадрат флуктуации угла равен $\Omega^2 = \langle (\psi - \langle \psi \rangle)^2 \rangle$. Рассмотрим изменение Ω^2 в зависимости

от глубины проникновения. Хорошо известно (см. у Бора ¹²), что увеличение среднего квадрата флуктуации угла приближенно дается выражением

$$(\delta\Omega^2)_n \approx \frac{M_2}{M_1} \frac{(\delta E)_n}{E} = \frac{(\delta E)_e}{E} \frac{Z_2^m}{M_1} \frac{L_n}{L_e}, \quad (4,1)$$

где

$$\left(\frac{dE}{dR}\right)_n = \frac{4\pi Z_1^2 Z_2^2 e^4}{M_2 v^2} N L_n, \quad L \approx \ln(1,29\varepsilon). \quad (4,2)$$

Приведенная энергия ε дается формулой (1,3). Формулы (4,2) и (4,1) применимы для ε , больших по сравнению с единицей. Когда $\varepsilon \geq 10^3$, видно, что $L_n \sim 5-10$, так что L_n не чувствительно к величине ε .

Аналогичное увеличение среднего квадрата флуктуации угла происходит и за счет электронных соударений. Его можно оценить, исходя из резерфордского рассеяния при близких столкновениях между частицей и электронами атома:

$$(d\Omega^2)_e = \frac{m}{2M_1 E} S_e \rho(R) \delta R. \quad (4,3)$$

В неупорядоченной системе, когда электронная плотность заменяется ее средним значением NZ_2 , электронный вклад меньше, чем ядерный, в $\sim 2Z_2 L_n / L_e$ раз. Формула (4,3) справедлива, только если v больше скоростей орбитальных электронов или, вернее, когда $x = v^2/v_0^2 Z_2 \gg 1$.

В случае неупорядоченного пучка, когда разрешены все ядерные столкновения, мы можем воспользоваться формулой (4,1) и пренебречь вкладом электронов (4,3). Мы можем также применять (4,1) — и для неупорядоченного, и для направленного пучков — в случае междоузлий, загрязнений, нарушающих симметрию поверхностных слоев и т. д. В таком случае N представляет плотность центров рассеяния, Z_2 — их атомный номер.

В данном контексте целесообразно рассматривать ψ_1 как стандартный угол также для неупорядоченной системы без эффектов цепочек. Мы вводим длину пробега l_{n_1, ψ_1} , для которой средний квадрат многократного рассеяния при ядерных столкновениях (4,1), применимый к неупорядоченному пучку, становится равным ψ_1^2 . Очевидно, что эта длина равна

$$l_{n_1, \psi_1} = \frac{2}{\pi N d^2 L_n \psi_1^2}, \quad (4,4)$$

и соответствующая полная потеря энергии неупорядоченного пучка или в неупорядоченной системе, согласно (3,13), дается формулой

$$\delta E_{\psi_1} = \frac{2Z_1 e^2}{d} \frac{L_e}{L_n} \frac{M_1}{m}, \quad (4,5)$$

т. е. она порядка $Z_1 A_1 \cdot 10$ кэв в случае быстрых частиц, для которых $L_e/L_n \sim 1/2$.

В связи с (4,4) и (4,5) следует также рассмотреть однократное рассеяние на углы, большие ψ_1 . Длина свободного пробега для такого однократного рассеяния больше, чем (4,4), в $2L_n \sim 10$ раз. Поэтому обычно мы можем пренебречь однократным рассеянием, но для определенных целей оно становится существенным (ср. (6,15)). Начиная с первоначально хорошо определенного направления, например соответствующего полярному углу $\Psi = 0$, распределение становится приблизительно гауссовым:

$$P(\Psi) \cdot 2\pi\Psi d\Psi \approx \exp\left(-\frac{\Psi^2}{\Omega^2}\right) \frac{2\Psi d\Psi}{\Omega^2}, \quad (4,6)$$

где Ω^2 получается интегрированием (4,1). Гауссово распределение является следствием многих небольших рассеяний. Для больших Ψ фактически существующее распределение имеет «хвост», спадающий медленнее, чем (4,6), и обусловленное однократным рассеянием на большие углы. Здесь может быть применено приближение Вильямса¹⁷ и Бора¹². Если (4,3) не пренебрежимо мало, его нужно прибавить к (4,1), и тогда (4,3) дает вклад только в гауссово распределение, но не в «хвост».

Рассмотрим затем частицы в направленном пучке. Мы можем сначала оценить вклад в многократное рассеяние от электронных столкновений. По аналогии с (4,4) мы вводим длину пробега l_{e,ψ_1} , для которой $(\delta\Omega^2)_e$ становится равной ψ_1^2 . Усредняя (4,3) согласно (3,6), получаем

$$l_{e,\psi_1} = \frac{4Z_2}{\pi N d^2 L_e \psi_1^2} \frac{Z_2}{Z_2^* (E_\perp)}. \quad (4,7)$$

Множитель $Z_2/Z_2^* (E_\perp)$ дается выражением (3,18) или (3,19) и стремится к единице для неупорядоченного пучка, тогда как для направленного пучка он становится большим, когда $\psi \rightarrow 0$. Длина пробега l_{e,ψ_1} больше $l_{n,\psi}$ в (4,4) по крайней мере в $2Z_2$ раз. Сильное многократное рассеяние (4,1) для неупорядоченной системы совершенно исчезает при соударении направленного пучка с непрерывными цепочками, т. е. когда поперечная энергия сохраняется.

В гл. 3 было установлено, что часть многократного рассеяния снова появляется как проявление сильной тенденции к однородному распределению на поперечной энергетической поверхности (см. (3,4)). Другая часть возникает вследствие отклонений от идеальности цепочек. Итак, предположим, что в одной поперечной атомной плоскости имеется отклонение $\delta\mathbf{K}(\mathbf{r})$ от обычной поперечной силы $\mathbf{K} = -\text{grad } U(\mathbf{r})$. Это приводит к изменению поперечного импульса, приближенно равному

$$\delta\mathbf{p}_\perp = \frac{d}{v} \delta\mathbf{K}(\mathbf{r}). \quad (4,8)$$

Если просуммировать квадраты этих величин по всем атомам вдоль цепочки (или по последовательности поперечных атомных плоскостей), то мы получим изменение средней поперечной энергии за счет несовершенств цепочки на длине пробега δR в виде

$$\delta \langle E_\perp \rangle = \sum \frac{(\delta p_\perp)^2}{2M_1} = \frac{d}{4E} \langle \delta\mathbf{K}(\mathbf{r})^2 \rangle \delta R, \quad (4,9)$$

где $\langle \dots \rangle$ означает среднее по положениям в поперечном движении частицы. Следовательно, можно применять формулу (3,6).

Если средний квадрат амплитуды ρ^2 тепловых колебаний (см. (6,5)) можно считать малым, то соответствующая флуктуация силы равна

$$\langle \delta\mathbf{K}(\mathbf{r})^2 \rangle = \frac{1}{2} \rho^2 \langle K^2(\mathbf{r}) r^{-2} + K'^2(\mathbf{r}) \rangle \quad (4,10)$$

в случае аксиальной симметрии. Полная диффузия может быть выражена через (4,1) для неупорядоченной системы:

$$\delta \langle E_\perp \rangle = (\delta\Omega^2)_n E\gamma, \quad (4,11)$$

где коэффициент ослабления $\gamma = \gamma_n(E_\perp, \rho) + \gamma_e(E_\perp)$ является суммой вкладов ядерных и электронных столкновений. Согласно (4,9) и (4,10)

величина γ_n приближенно равна

$$\gamma_n(E_{\perp}, \rho) \approx \frac{1}{L_n} \frac{\rho^2}{C^2 a^2} \exp\left(\frac{2E_{\perp}}{E\psi_1^2}\right) \left[1 - \exp\left(-\frac{2E_{\perp}}{E\psi_1^2}\right)\right]^3, \quad (4,12)$$

если используется стандартный атомный потенциал (2,6).

Для сравнения мы перепишем выражение для вклада электронного рассеяния (4,7), введя стандартный потенциал атома при помощи (3,19):

$$\gamma_e(E_{\perp}) = \frac{1}{L_n} \frac{L_e}{2Z_2} \left[1 - \exp\left(-\frac{2E_{\perp}}{E\psi_1^2}\right)\right]. \quad (4,12')$$

Хотя (4,12) и (4,12') являются всего лишь оценочными, очевидно, что в противоположность неупорядоченным системам электронный вклад γ_e может превышать γ_n , если $2E_{\perp}/E\psi_1^2$ мало при небольших Z_2 . Заметим, однако, что тормозной эффект (см. стр. 274) может преобладать над (4,12'), когда $M_1\psi_1^2 > 2m$.

Когда известно увеличение среднего квадратичного угла, диффузионное уравнение имеет вид

$$\frac{\partial}{\partial z} g(\mathbf{p}_{\perp}, z) = \operatorname{div}_{\mathbf{p}_{\perp}} D(\mathbf{p}_{\perp}) \operatorname{grad}_{\mathbf{p}_{\perp}} g(\mathbf{p}_{\perp}, z), \quad (4,13)$$

где $g \, dp_{\perp x} dp_{\perp y}$ — дифференциальная вероятность, измеренная, например, для потенциала $U = 0$. Далее, $z = vt$ есть глубина проникновения. Диффузионная постоянная D определяется через $\delta \langle E_{\perp} \rangle$, и в случае аксиальной симметрии она находится из условия

$$2D(p_{\perp}) + p_{\perp} D'(p_{\perp}) = M_1 \frac{\delta \langle E_{\perp} \rangle}{\delta R}, \quad (4,14)$$

где правая часть определяется выражением (4,11).

Когда диффузионная постоянная известна, можно вычислить приращение квадрата флуктуации, например, величины p_{\perp} . Для того чтобы сравнить с приращением E_{\perp} , мы рассмотрим величину $\langle (p_{\perp} - \langle p_{\perp} \rangle)^2 \rangle / 2M_1$ и получим из (4,13) для первоначально заданной E_{\perp}

$$\frac{\delta \langle (p_{\perp} - \langle p_{\perp} \rangle)^2 \rangle}{2M_1 \delta R} = \frac{D(p_{\perp})}{M_1}. \quad (4,15)$$

Если γ в (4,11) быстро возрастает с E_{\perp} , то величина (4,15) много меньше, чем $\delta \langle E_{\perp} \rangle / \delta R$. Тогда можно пренебречь размытием распределения за счет диффузии, и поперечная энергия остается определенной, равномерно возрастая согласно (4,9) или (4,11). Представляет интерес решить уравнения в предположении строго заданной поперечной энергии. Если электронным вкладом (4,12) можно пренебречь, то мы получим из (4,11), (4,12) и (4,14) следующее изменение E_{\perp} на конечной длине пути δR :

$$\delta R \frac{4\rho^2}{C^2 a^2 L_n} \frac{1}{l_{n, \psi_1}} = -\delta \left[1 - \exp\left(-\frac{2E_{\perp}}{E\psi_1^2}\right)\right]^{-2} \approx -\delta \left(\frac{E\psi_1^2}{2E_{\perp}}\right)^2, \quad (4,16)$$

где l_{n, ψ_1} дается выражением (4,4) и δ означает приращение рассматриваемой величины. Одно интересное свойство уравнения (4,16) связано только с этим уравнением, но проявляется и в более общем случае диффузии, описываемом уравнением (4,12). Именно длины свободного пробега для рассеяния увеличиваются примерно в $L_n a^2 / \rho^2$ раз по сравнению со случаем неупорядоченной среды (см. (4,4)). Этот результат существенно основывается на справедливости (4,10).

4.2. Однократное рассеяние

Коэффициент ослабления γ_n в (4,12) может стать совсем малым. Однако если диффузия достаточно мала, то может преобладать однократное рассеяние. В результате однократного рассеяния частица может после всего лишь одного столкновения перейти в неупорядоченный пучок либо в его край. Для однократного рассеяния требуется, чтобы частица подошла близко к ядру, и поэтому вероятность однократного рассеяния пропорциональна той части общего числа ядер, с которыми может столкнуться частица, обладающая поперечной энергией E_{\perp} . Оказывается, что эта часть равна $\Pi_{\text{in}}(E_{\perp}) \approx P(r_{\text{min}}(E_{\perp}))$, где $r_{\text{min}}(E_{\perp})$ — расстояние наибольшего приближения к цепочке, и $P(r)$ — вероятность нахождения ядра на расстоянии от цепочки, большем, чем r (см. гл. 6). Таким образом, эффективное сечение однократного рассеяния

$$d\sigma_{\text{эфф}}(E_{\perp}) = d\sigma \Pi_{\text{in}}(E_{\perp}). \quad (4,17)$$

При данной глубине проникновения (4,17) можно применять для углов отклонения, больших, чем углы, соответствующие пику гауссова распределения при многократном рассеянии.

5. ПРАВИЛА УГЛОВЫХ УСРЕДНЕНИЙ И КОМПЕНСАЦИЯ

Предположим, что мы интересуемся определенным физическим явлением, например таким, как потеря энергии на один сантиметр, число возбуждений K -оболочки или число (p, γ) -реакций. Для неупорядоченных систем это явление происходит с определенной скоростью независимо от направления. В кристалле за счет, например, эффектов цепочек скорость может резко изменяться даже в пределах малых телесных углов. В гл. 3 мы оценили некоторые изменения такого рода в приближении поперечных потенциалов. Однако может оказаться затруднительным выполнить оценки с достаточно высокой степенью точности для всех углов. Поэтому целесообразно найти определенные правила, которые справедливы независимо от использования, например, поперечных непрерывных потенциалов. В частности, интересно знать, в какой мере усреднение эффекта по всем направлениям падения в кристалле эквивалентно эффекту в неупорядоченной системе. Если эта эквивалентность имеет место, мы говорим, что в рассматриваемом случае происходит компенсация ориентационного эффекта.

Сначала мы можем пренебречь замедлением частиц, т. е. предполагаем, что полная энергия сохраняется. Затем мы рассматриваем частицы, движущиеся при заданном потенциале в трехмерном пространстве. При этом мы можем использовать два положения статистической механики, а именно обратимость и микроканоническое распределение. Далее представляет интерес рассмотреть идеализированный эксперимент: имеется внешний пучок частиц, создаваемых, например, точечным источником A , и отыскивается вероятность попадания в определенную точку пространства B около какого-либо атома. Эту вероятность следует сравнить с аналогичной вероятностью, когда, например, все атомы кристалла, исключая один, рассматриваемый, смещаются (устраняются) или разупорядочиваются.

5.1. Правило обратимости

Первым полезным результатом является обратимость. Мы не будем входить в детали рассмотрения и поэтому пренебрежем магнитными полями. Согласно механике должно быть обратимым не только движение частицы по ее траектории от точки A вне кристалла до точки B в кристалле, но также и вероятности переходов для прямого и обратного процессов $P_{AB} = P_{BA}$, если потенциалы в A и B равны (см. ниже). Более определенно, предположим, что в точке A эмиттируется ν частиц в секунду

в единичном телесном угле в направлении к точке B и что сечение в B равно σ . Скорость P_{AB} прямых процессов равна скорости P_{AB} обратных процессов, для которых эмиссия из B составляет ν частиц в единичный телесный угол и сечение в A равно σ . Этот результат можно рассматривать как следствие теоремы Лиувилля. Найдя угловое распределение вне кристалла частиц, эмиттированных атомными ядрами цепочек в кристалле, мы тем самым получаем также вероятность попадания в эти ядра внешнего пучка частиц. Эти результаты не изменяются и при многократном рассеянии, где процессы также обратимы. Обратимость может быть нарушена в некоторых случаях. Действительно, если торможение на пути между A и B так велико, чтобы вызвать отклонение от пути, то может оказаться невозможным обратить путь ни для потенциального движения, ни для эффектов многократного рассеяния.

5.2. Правила угловых усреднений

Чтобы получить второе правило, т. е. правило простых угловых усреднений, мы вводим вероятность P для нахождения частицы с энергией E в точке \mathbf{R} пространства внутри кристалла. Вероятность измеряется относительно вероятности при отсутствии кристаллической структуры среды. Пусть в начальном состоянии имеется пучок частиц заданной однородной интенсивности и направление пучка определяется углами θ, φ . Тогда вероятность является функцией θ и φ , $P' = P(\theta, \varphi, \mathbf{R})$. Следует заметить, что P зависит также от других параметров, особенно от энергии E , так же как и от сорта частицы (Z_1, A_1) и среды (Z_2 , структура решетки). Если мы усредним $P(\theta, \varphi, \mathbf{R})$ по всем направлениям и обозначим среднее как $P(\mathbf{R})$, то получим

$$P(\mathbf{R}) = \frac{1}{4\pi} \int P(\theta, \varphi, \mathbf{R}) \sin \theta d\theta d\varphi. \quad (5,1)$$

Усреднение по внешним углам эквивалентно наложению на систему внешнего статистического равновесия. Поэтому среднее может быть вычислено из статистического равновесия, например микроканонического ансамбля для одной частицы. Для этой цели мы введем потенциал частица — решетка $V_e(\mathbf{R})$ в точке \mathbf{R} пространства. Если V_e находится вблизи какого-то атома, то $V_e(\mathbf{R})$ должен включать потенциал только от других атомов, потому что мы производим сравнение, например, с соответствующей вероятностью прохождения вблизи атома в пустом пространстве (или в неупорядоченном веществе). Не вдаваясь в подробности, мы можем утверждать, что $V_e(R)$ должен быть совсем малым, возможно, порядка нескольких эв для протонов, подобно E_c в (1,1), и, таким образом, обычно $V_e(R)$ много меньше, чем непрерывный потенциал $U(r)$. Так как имеющийся объем в пространстве импульсов пропорционален $p dE = V \{2M_1 [E - V_e(\mathbf{R})]\} dE$, среднее значение вероятности $P(\theta, \varphi, \mathbf{R})$ (примерно) равно

$$P(\mathbf{R}) \approx \left[\frac{E - V_e(\mathbf{R})}{E} \right]^{1/2} \approx 1, \quad (5,2)$$

где отклонением P от единицы можно пренебречь, поскольку оно примерно равно $V_e/2E$. Итак, вероятности, интенсивности либо потоки могут различаться на величину $[E - V_e(\mathbf{R})]/E$ в степени, вероятно, между -1 и $+1$. Но такие множители очень близки к единице, так что даже без подробных вычислений мы можем утверждать, что средние значения типа (5,1) равны единице. Это приводит к правилу угловых усреднений при сохранении энергии. Любая величина Q , линейно зависящая от

$P(\theta, \varphi, \mathbf{R})$, обладает таким же средним угловым значением, как и в неупорядоченной системе. Под неупорядоченной системой подразумевается система с той же самой плотностью, но без ориентационных эффектов (например из-за отсутствия структуры). Примерами величин, подчиняющихся этому простому правилу, являются электронное торможение, например (3,15), и ядерное торможение (3,10) при данной энергии E . Мы можем сформулировать правило угловых усреднений следующим образом. Если Q дается выражением

$$Q(\theta, \varphi) = a + \int b(\mathbf{R}) P(\theta, \varphi, \mathbf{R}) d^3R, \quad (5,3)$$

то среднее значение Q имеет вид согласно (5,1) и (5,2), (5,3)

$$\langle Q(\theta, \varphi) \rangle = \frac{1}{4\pi} \int Q(\theta, \varphi) d\Omega = a + \int b(\mathbf{R}) d^3R.$$

Как в (5,3), так и в (5,4) часто возможно ограничиться усреднением по телесным углам Ω , малым по сравнению с 4π . Действительно, предположим, что частицы, находящиеся на границах телесного угла Ω , при взаимодействии с цепочками либо плоскостями не отклоняются ни внутрь, ни наружу этого телесного угла. Тогда должно быть также выполнено отдельное усреднение (5,3) по Ω .

Если мы применим следствие принципа обратимости, то правило угловых усреднений может также быть использовано для частиц, входящих из какой-либо точки пространства \mathbf{R} в решетку и достигающих точки вне решетки. В этом случае правило полностью очевидно даже без применения обратимости и формулы (5,3). Действительно, представим себе, что ядра атомов в решетке испускают α -частицы, причем этот процесс происходит с определенной скоростью, отнесенной к единице телесного угла. α -частицы отклоняются от направлений цепочек и при выходе из кристалла характеризуются определенным угловым распределением. Но, очевидно, что независимо от возможных направлений частиц внутри кристалла все частицы пройдут через большую сферу, окружающую кристалл. Более того, если регистрировать частицы внутри относительно небольшого телесного угла вокруг направления цепочки и если при этом угловая ширина еще велика по сравнению с величиной отклонения, даваемого цепочкой, то число собранных частиц будет тем же самым, как если бы цепочки не было. Таким образом, угловое распределение имеет полную компенсацию уменьшения, типичную для величин, линейных относительно $P(\theta, \varphi, \mathbf{R})$. Аналогичная проблема обсуждалась в гл. 2 в связи с классической тенью позади атома.

5.3. Ограничения правила угловых усреднений

Когда мы имеем дело с конкретными физическими наблюдениями, такими, как упомянутые в начале этой главы, указанное простое правило не всегда применимо, потому что в действительности при замедлении энергия не сохраняется и измеряемые величины могут сильно зависеть от энергии. Вообще говоря, физические эффекты, зависящие от торможения, не должны подчиняться правилу угловых усреднений. Полезно рассмотреть несколько примеров.

Во-первых, основным параметром является пробег частицы. Сечение торможения $S(E_{\perp}, E)$ при заданной энергии E линейно относительно P и следует правилу усреднений. Однако пробег имеет вид $\int dR = \int [NS(E_{\perp}, E)]^{-1} dE$. Поэтому пробег не является линейным

относительно P и не подчиняется сформулированному правилу. В действительности отклонения могут быть очень велики. Отклонения становятся малыми в двух случаях. Если $S(E_{\perp}) \approx S$, где S — сечение при неупорядоченном торможении, то мы имеем выражение $S(E_{\perp})^{-1} \approx \approx S^{-1} [2 - S(E_{\perp}) S^{-1}]$, которое линейно относительно P . Кроме того, в поликристаллах, где размер δR каждого кристалла соответствует $\delta E = \delta R [S(E_{\perp}) N] \ll E$, пробег будет таким же, как в неупорядоченной системе.

Во-вторых, поучительным примером являются (p, γ) -реакции при прохождении протонов через кристалл. Реакция происходит при определенной энергии E_0 и имеет ширину Γ , очень малую по сравнению с E_0 . Предположим, что Γ тем не менее остается настолько большой, что потеря энергии $\sim \Gamma$ происходит только после прохождения многих атомных слоев. Количество реакций ν пропорционально $\nu \propto P(\psi_1, R_n)/S_e(\psi)$, где $P(\psi_1, R_n)$ — вероятность попадания в ядро. Так как отношение P/S_e не линейно относительно P , его среднее по всем направлениям не будет соответствовать отношению в случае неупорядоченной системы, и (5,3) неприменимо. Однако вероятность попадания в ядро атома может быть в основном нулевой, кроме случая, когда E_{\perp} велико. Так как $S_e(E_{\perp})$ имеет довольно узкий провал (см. (3,19)), может оказаться, что $S_e(E_{\perp}) \approx S_e = \text{const}$ в области, где P отлична от нуля. В этом случае примерно получается компенсация, соответствующая (5,3).

Как показывают эти примеры, имеется большое число комбинаций эффектов, которые могут влиять на угловые усреднения, когда вступает в действие торможение. Поэтому тонкая монокристаллическая фольга, в которой потеря энергии мала, является одним из примеров системы, где физические эффекты могут описываться непосредственно (5,3). При измерениях угловых зависимостей эффектов вблизи цепочек и плоскостей компенсация в (5,3) обычно представляет лишь качественный интерес. В других случаях, например если необходимо измерять с высокой точностью в твердых телах сечения ядерных взаимодействий, может иметь непосредственное значение применение (5,3).

5.4. Правило пространственных усреднений

Предыдущие усреднения относились к углам. Интересные правила обуславливаются также и пространственными усреднениями. Пусть внешний пучок имеет заданное направление, определяемое углами (θ, φ) , например, вблизи направления цепочки. Рассмотрим какой-либо ядерный процесс с постоянным, не зависящим от энергии сечением. Скорость процесса зависит от положения ядра в решетке. Теперь, если плотность распределения вероятности ядер постоянна в поперечной плоскости, процесс происходит для этих ядер с той же скоростью, как в неупорядоченном веществе, просто потому, что каждая частица должна пройти через некую точку поперечной плоскости. Итак, для фиксированного значения z , меньшего, чем глубина проникновения каждой частицы,

$$\langle P(\theta, \varphi, \mathbf{R}) \rangle_{x,y} = \frac{1}{A_0} \int \int_{A_0} P(\theta, \varphi, \mathbf{R}) dx dy = 1, \quad (5,4)$$

где P — упоминавшаяся выше вероятность, нормированная к единице для неупорядоченной системы. Любая линейная функция $Q = a + bP(\theta, \varphi, \mathbf{R})$ имеет среднее значение $\langle Q \rangle_{x,y} = a + b$. Поэтому для фиксированного внешнего направления θ, φ наблюдается уменьшение скорости реакции и должен получиться аномально высокий выход

процесса, когда атом расположен между цепочками. Однако площадь вне цепочек много больше эффективной площади цепочки. В таком случае возрастание скорости очень мало, порядка $Nd\lambda a^2$. Несколько больший эффект будет наблюдаться для плоскостей. Однако из-за малости этих изменений на скорости реакций могут влиять вторичные явления, также связанные с цепочкой, такие, как электронное торможение (см. гл. 6).

6. ИДЕАЛИЗИРОВАННЫЕ ЭКСПЕРИМЕНТЫ И ЗАМЕЧАНИЯ ПО ПОВОДУ ИЗМЕРЕНИЙ

При обсуждении экспериментов, как идеализированных, так и реальных, прежде всего следует иметь в виду, что при малых углах падения частицы не могут подойти к оси цепочек (или плоскостей) ближе чем на расстояние $\sim a$. Это определяет, во-первых, методы эксперимента, которые могут быть выбраны. Действительно, имеется возможность использования любого физического процесса, требующего, чтобы частица находилась на расстоянии от ядра атома, меньшем a (ядерные реакции, кулоновское возбуждение, возбуждение внутренних оболочек, резерфордовское рассеяние на большие углы, эмиссия заряженных частиц из радиоактивных ядер). Во-вторых, эксперименты такого рода дают прямую информацию о траекториях частиц в решетке и о рассеянии частиц и, следовательно, дают возможность изучать важные первичные явления, управляющие движением частицы (см. стр. 255). В-третьих, вследствие экранирования вблизи оси цепочки на расстояниях вплоть примерно до $\sim a$ имеется возможность обнаруживать положения атомов с точностью до $< a$ в окрестности узлов решетки. Таким образом, появляется, например, метод наблюдения дефектов и положений атомов загрязнений.

Легко представить себе многие дальнейшие применения, но сначала кажется разумным продемонстрировать способ, при помощи которого теория и эксперимент могут справиться с очерченной вкратце первоначальной задачей. После того, как это сделано, появляется количественная основа для того, чтобы оценить, в какой мере могут быть реализованы наиболее сложные применения. В данной работе, однако, мы просто бегло обсудим некоторые аспекты главной задачи.

6.1. Три стадии в движении частицы

Судьба частиц на их пути от внешнего источника до, например, ядра атома в кристалле может быть разделена на три последовательные стадии. Эти три стадии проявляются в обратном порядке для процесса, идущего в обратную сторону, когда частица выходит из ядра и достигает детектора, расположенного вне кристалла. Вычисление вероятности прямого процесса часто эквивалентно вычислению вероятности обратного процесса (см. гл. 5). Частицы в пучке перед прохождением через поверхность кристалла обладают начальным разбросом по углам. Пусть начальное распределение будет $P(E\psi_e^2)d(E\psi_e^2)$, где ψ_e — внешний угол относительно цепочек. Может оказаться удобным включить в этот разброс многократное рассеяние, обусловленное слоями загрязнений на поверхности кристалла. Напомним, что угловое распределение при рассеянии тонкими слоями содержит узкий гауссов пик и «хвост», обусловленный однократным рассеянием. Рассмотрим частицы, достигающие поверхности кристалла при определенном угле ψ_e с цепочкой (или плоскостью). Тогда первая стадия представляет переход из области, расположенной непосредственно перед поверхностью кристалла, в область, находящуюся

непосредственно внутри кристалла. Введем коэффициент перехода

$$T = T(E_{\perp}, E\psi_e^2),$$

такой, что $T dE_{\perp}$ есть дифференциальная вероятность того, что поперечная энергия имеет значение в интервале между E_{\perp} и $E_{\perp} + dE_{\perp}$, когда внешний угол равен ψ_e . В приближении непрерывного рассмотрения мы получаем, если $U_t(\mathbf{r}) \approx U(\mathbf{r})$, то

$$T(E_{\perp}, E\psi_e^2) = \int_0^{r_0} \delta[E_{\perp} - E\psi_e^2 - U(\mathbf{r})] \frac{2r dr}{r_0^2}, \quad (6,1)$$

поскольку в точке \mathbf{r} поперечная энергия становится равной $E\psi_e^2 + U(\mathbf{r})$.

Таким способом может быть получено начальное распределение

$$g(E_{\perp}, 0) = \int P(E\psi_e^2) T(E_{\perp}, E\psi_e^2) d(E\psi_e^2), \quad (6,2)$$

где E — энергия частицы.

В (6,1) предполагается наличие аксиальной симметрии; общая формула, соответствующая (6,1), представляет собой интеграл, нормированный к единичной ячейке. Поэтому при соответствующем вычислении для плоскостей правая часть (6,1) должна быть заменена на

$$\int_0^{d_p/2} \delta[E_{\perp} - E\psi_e^2 - Y(y)] \frac{2dy}{d_p},$$

где d_p — расстояние между плоскостями, ψ_e — угол с плоскостью, и $Y(y)$ — непрерывный потенциал плоскости. В (6,1) не учитывается направление поперечного движения, и, кроме того, мы будем пренебрегать учетом таких членов, как, например, $g(\mathbf{p}_{\perp}, \mathbf{r}, z = 0)$.

Вторая стадия заключается в прохождении через кристалл от его поверхности до глубины z . На этой стадии имеет место многократное рассеяние, т. е. перераспределение поперечной энергии способом, отчасти похожим на диффузию. Перераспределение сильно зависит от величины $E_{\perp}/E\psi_1^2$ (см. гл. 4). В то же время частицы испытывают торможение, так что энергия E уменьшается. Торможение также зависит от $E_{\perp}/E\psi_1^2$ (см. гл. 3). В соответствии с этим получается множитель перераспределения R , дающий вероятность того, что на глубине z энергия равна E' , а поперечная энергия E'_{\perp} , если их значения на поверхности E и E_{\perp} , т. е.

$$R = R(E', E'_{\perp}, z; E, E_{\perp}, 0),$$

где $R = R(E', E'_{\perp}, 0; E, E_{\perp}, 0) = \delta(E' - E) \delta(E'_{\perp} - E_{\perp})$. Обычно можно либо пренебречь потерями энергии по сравнению с диффузией, либо пренебречь диффузией и учитывать только потери энергии. Это приводит к значительному упрощению R . В некоторых случаях мы можем предположить, что и E и E_{\perp} изменяются в зависимости от глубины плавно, без флуктуаций, так что R является δ -функцией в отношении как E' , так и E'_{\perp} .

Когда R известно, мы можем вычислить вероятность $g(E', E'_{\perp}, z) \propto dE' dE'_{\perp}$ того, что энергия находится в интервале dE' , а поперечная энергия — в интервале dE'_{\perp} :

$$g(E', E'_{\perp}, z) = \int g(E_{\perp}, 0) R(E', E'_{\perp}, z; E, E_{\perp}, 0) dE_{\perp}. \quad (6,3)$$

Третья стадия заключается в появлении реального физического процесса, например ядерной реакции. В процессах такого рода частица должна фактически подходить к центру атома, и вероятность этого $\Pi_{\text{in}}(E_{\perp})$ будет рассматриваться довольно подробно. Если $\Pi_{\text{in}}(E_{\perp})$ известно и сечение процесса, о котором идет речь, равно σ , то эффективное сечение $\sigma_{\text{эфф}}$ на глубине z становится равным

$$\sigma_{\text{эфф}}(z) = \int dE' \int dE' \int dE'_{\perp} g(E', E'_{\perp}, z) \Pi_{\text{in}}(E'_{\perp}) \sigma(E'). \quad (6,4)$$

Сечение $\sigma(E')$ для ядерных реакций может быть резонансного типа относительно энергии E' .

Воздержимся в дальнейшем от обсуждения общего случая, когда имеет место наложение трех упомянутых стадий. Вместо этого после вычисления $\Pi(E_{\perp})$ будет рассмотрено несколько типичных примеров.

6.2. Эмиссия частиц из атомов цепочки и $\Pi(E_{\perp})$

Некоторые характеристики основных явлений в эффекте цепочки иллюстрируются следующим идеализированным экспериментом. Быстрые положительно заряженные частицы покидают ядро при процессе, не зависящем от свойств решетки, например α -распаде. Ядра характеризуются некоторым распределением вероятности их положения в пространстве. Первый вопрос, который будет решен, — это вычисление вероятности $\Pi_{\text{out}}(E_{\perp}) dE_{\perp}$ нахождения частицы с поперечной энергией в интервале между E_{\perp} и $E_{\perp} + dE_{\perp}$.

Заметим, что $\Pi_{\text{in}}(E_{\perp}) = \xi \Pi_{\text{out}}(E_{\perp})$ есть вероятность процесса, обратного описываемому (6,4), где ξ — постоянная, вычисленная для свободного или фазового пространства в двух противоположных процессах. Действительно, в приближении непрерывного рассмотрения ξ^{-1} есть часть площади поперечной плоскости, доступной частице, т. е. $\xi^{-1} = 1 - [r_{\text{min}}^2(E_{\perp})/r_0^2]$, и, таким образом, ξ обычно близко к единице. Последующее поведение частицы, определяемое многократным рассеянием и выходом через поверхность, может быть рассмотрено отдельно, предыдущее определяется (6,3) и соотношением, обратным (6,2).

Предположим, что атомное ядро находится по соседству с положением атома в идеальной решетке и характеризуется распределением вероятности $dP(r)$, где r — расстояние от оси цепочки. Распределением в направлении z можно пренебречь. Для простоты будем использовать далее в качестве примера распределение гауссова типа, т. е.

$$dP = \exp\left(-\frac{r^2}{\rho^2}\right) \cdot 2r dr \frac{\alpha}{\rho^2}, \quad (6,5)$$

где r — расстояние от идеальной цепочки, α — постоянная нормировки, $\alpha = [1 - \exp(-r_0^2/\rho^2)]^{-1}$, т. е. $\alpha \approx 1$, если ρ^2 мало по сравнению с $r_0^2 = 1/\pi Nd$. Распределение (6,5) может приблизительно представлять нулевые и тепловые колебания атома по отношению к соседним атомам. Если ρ велико, то формула (6,5) соответствует однородному распределению внутри единичной ячейки. Поэтому она может описывать и другие случаи, кроме колебаний. Расчеты отдельных эффектов (см. (4,10) и (6,13)) включают в себя лишь средний квадрат колебания атома ρ^2 и не включают распределения вероятности как такового. При низких температурах ρ^2 определяется нулевыми колебаниями атомов решетки, тогда как при высоких температурах ρ^2 возрастает пропорционально температуре.

Мы будем искать начальное распределение частиц $\Pi_{\text{out}}(E_{\perp})$ по поперечной энергии. Частицы испускаются в решетку из атома, расположенного близко к узлу решетки. Примем те же предположения, что и в при-

ложении I, когда может быть использован поперечный потенциал $U(r)$ и E_{\perp} регистрируется на плоскостях, расположенных на полпути между атомами. Частица первоначально находится на расстоянии r от цепочки и движется под углом φ относительно нее, с азимутальным углом, равным θ . Когда частица достигнет плоскости, расположенной на половине пути, она будет находиться от цепочки на расстоянии r^* ($r^{*2} = r^2 + (\varphi d/2)^2 + r\varphi d \cos \theta$). Поэтому

$$P_{\text{out}}(E_{\perp}) = \int_{r=0}^{r_0} dP(r) \int d(E\varphi^2) \int_0^{2\pi} \frac{d\theta}{2\pi} \delta[E_{\perp} - U(r^*) - E\varphi^2]. \quad (6,6)$$

Аналогичная формула справедлива и для плоскостей. Если $\varphi d/2$ мало по сравнению с амплитудой ρ распределения, то мы можем положить $r^* = r$, и (6,6) приобретает вид

$$P_{\text{out}}(E_{\perp}) = \int_0^r dP(r) |_{U(r) < E_{\perp}}. \quad (6,7)$$

Хотя из формулы (6,7) следует минимум, очень похожий на минимум в (6,6) для низких значений E_{\perp} , величина (6,7), по-видимому, не превышает единицы, в противоположность (6,6). Поэтому выступ распределения при $E_{\perp} \sim E\varphi_1^2$ в приближении, даваемом формулой (6,7), отсутствует. При помощи (6,7) и (6,5) и стандартного потенциала (2,6) получается выражение для P_{out} :

$$P_{\text{out}}(E_{\perp}) = \exp \left\{ -\frac{C^2 a^2}{\rho^2} \left[\exp \left(\frac{2E_{\perp}}{E\varphi_1^2} \right) - 1 \right]^{-1} \right\} - \exp \left(-\frac{r_0^2}{\rho^2} \right), \quad (6,8)$$

где предполагается, что $\rho \ll r_0$, т. е. $\alpha \approx 1$. Когда $E_{\perp} \rightarrow U(r_0)$, выражение в (6,8) стремится к нулю. Однако величина $P_{\text{out}}(E_{\perp} \approx 0)$ чувствительна к атомному потенциалу и к поведению распределения вероятности (6,5). Поэтому на число частиц, выходящих с поверхности кристалла при близких к нулю углах относительно цепочки, может сильно влиять многократное рассеяние и т. д.

Принимая во внимание переменность максимальной глубины провала $P_{\text{out}}(E_{\perp})$, представляется интересным поискать величины, менее чувствительные к многократному рассеянию. Из (6,7) и (6,8) могут быть легко получены приближенные оценки ширины провала $\Pi(E_{\perp})$, но точное определение этих ширины является довольно сложным. Однако интегральное значение уменьшения величины $\Pi(E_{\perp})$ определяется значительно лучше. Поскольку разность между глубиной провала и единицей есть $1 - P_{\text{out}}(E_{\perp})$, мы можем выполнить интегрирование по положительным значениям этой величины. Подставляя выражение (6,7), получаем интегральную оценку

$$\begin{aligned} \Omega(\rho) &= \int [1 - P_{\text{out}}(E_{\perp})] \cdot 2\pi \sin \psi \, d\psi = \frac{\pi}{E} \int_0^r [1 - P_{\text{out}}(E_{\perp})] \, dE_{\perp} = \\ &= \frac{\pi\alpha}{E} \int_0^{r_0} \exp \left(-\frac{r^2}{\rho^2} \right) U(r) \frac{d(r^2)}{\rho^2}. \end{aligned} \quad (6,9)$$

Когда ρ велико по сравнению с a , но мало по сравнению с r_0 , находим в результате интегрирования

$$\Omega(r_0 \gg \rho \gg a) = \frac{1}{\rho^2 E d} \int 4\pi R^2 V(R) \, dR = \frac{Z_1 Z_2 e^2}{\rho^2 E d} \pi \cdot \frac{2}{3} \bar{R}^2, \quad (6,10)$$

где

$$\bar{R}^2 = Z_2^{-1} \int_0^{\infty} 4\pi R^4 \rho(R) \, dR$$

— средний квадрат радиуса атома, приходящийся на один электрон. Согласно Ленцу и Йенсену (см. ⁸⁾) средний квадрат радиуса равен $\bar{R}^2 \approx 15a^2$. Этот результат хорошо соответствует измерениям, так же как и рассмотрению Хартри.

Для ρ , больших по сравнению с a , получим

$$\Omega(\rho) \approx \pi \frac{\Psi_1^2}{2} \cdot 10a^2/\rho^2. \quad (6,11)$$

Для другого предела, когда ρ мало по сравнению с a , легко получаем из (2,5)

$$\Omega(\rho < a) = \pi \frac{\Psi_1^2}{2} \ln \left(\frac{C^2 a^2}{\rho^2} \gamma \right), \quad (6,11')$$

где $\gamma = 1,78$ — постоянная Эйлера. Следовательно, качественная оценка, пригодная для любых значений ρ , имеет вид

$$\Omega \approx \pi \frac{\Psi_1^2}{2} \ln \left(\frac{\gamma C^2 a^2 + \rho^2}{\rho^2} \right). \quad (6,12)$$

Формула (6,12), определяющая провал как функцию поперечной энергии при $\rho \ll r_0$, должна в этом случае приближенно определять также и уменьшение вне кристалла, если можно пренебречь многократным рассеянием. Однако когда ρ в (6,9) становится большим по сравнению с r_0 , имеет место однородное распределение вероятности $dP(r)$ в единичной ячейке, $r < r_0$. Тогда эффекты выхода с поверхности более важны и, согласно рассмотрению в гл. 5, уменьшения вне кристалла нет. Оказалось, что формула (6,12) имеет нулевое значение для этого предела, и в этом смысле внешнее угловое распределение она представляет лучше, чем внутреннее. Однако формулы (6,7) — (6,12) имеют серьезный недостаток. Использовался непрерывный потенциал, и поэтому пренебрегали компенсирующими выступами. Было бы более правильным использовать (6,6) и применять формулы приложения I, согласно которым энергия должна быть измерена на плоскостях на половине расстояния между атомами.

Уравнение (6,12) может быть использовано двумя способами. Зная ρ , можно приближенно найти значение Ω ; из измерений Ω может быть качественно оценено значение ρ^2 . Независимо от таких оценок видно, что Ω пропорционально $\Psi_1^2 = 2Z_1 Z_2 e^2 / Ed$.

6.3. Наивысший минимальный выход

Минимальный выход (например, ядерных реакций) при данной глубине соответствует внешнему углу $\psi_e = 0$. Самое низкое значение χ минимума имеет место на небольшой глубине, когда мало многократное рассеяние. Если мы пренебрежем многократным рассеянием, то из формул (6,1) и (6,4) найдем, что из-за тепловых колебаний всегда имеется некоторый выход. Если применяется непрерывное описание, получаем из (6,7) и (6,1) первый вклад χ_1 в общий χ :

$$\chi_1 = N d \rho^2, \quad (6,13)$$

где ρ^2 — средний квадрат амплитуды колебаний атомов относительно цепочки. Заслуживает внимания, что (6,13) не зависит от распределения вероятности, т. е. нет нужды в применении (6,5). Величина χ_1 обычно составляет $\chi_1 \lesssim 10^{-2}$, когда $d \sim 3\text{\AA}$.

По ряду причин эффективный наивысший минимум может быть больше, чем вышеприведенная величина. Частицы во внешнем пучке, которые проходят примерно в пределах расстояния $\sim a$ от оси цепочки, приобретают поперечную энергию $\sim E \psi_1^2$. Эти частицы, испытав очень небольшое многократное рассеяние, могут оказаться в состоянии попасть в центр атомов. Длина пробега в рассматриваемом случае $\lesssim l_{n, \psi_1}$ в (4,4). Это приводит к следующему, менее хорошо определяемому вкладу в χ :

$$\chi_2 \approx N d a^2. \quad (6,14)$$

Для главных цепочек, т. е. для $d \sim 3 \cdot 10^{-8}$ см, величина χ_2 изменяется между $\sim 0,03$ для легких веществ и $\sim 0,005$ для тяжелых веществ. Для плоскостей мы приближенно находим $\chi_2 \sim 2a/d_p$.

Результат (6,14) соответствует случаю высоких энергий (2,9). При низких энергиях или при больших значениях d имеется вполне определенный рост той части площади χ_2 , которая соответствует поперечной энергии выше барьера. Согласно (2,10) или (1,24), когда ψ_1 велико по сравнению с a/d , получается $\chi_2 \approx \pi N d^2 \alpha \psi_1$.

Следует отметить, что атомы на поверхности могут взаимодействовать с частицей и непосредственно. Эффективное число слоев, толщина которых d , дающих полный вклад, есть $\xi > 1$. Поэтому измерения, включающие в себя первые 10—50 слоев, не могут давать очень сильные провалы и в измерения всегда дает определенный вклад многократное рассеяние.

Хотя классическая орбита в идеальной цепочке остается вне центра атомов, имеет место квантовое проникновение. Частицы с одинаковыми значениями Z_1/E имеют одинаковый характеристический угол ψ_1 , однако их длина волны уменьшается пропорционально $(M_1 E)^{-1/2} \propto (M_1 Z_1)^{-1/2}$. В этом смысле вероятность квантового проникновения является независимой величиной, которая может быть сделана весьма малой.

Наличие аморфных слоев загрязнений на поверхности кристалла не должно вызывать большое многократное рассеяние. Однако в данном случае эффектами однократного рассеяния нельзя пренебрегать. Пусть число атомов i -го типа, приходящихся на 1 см^2 , будет v_i , а их диаметр столкновений с частицей b_i . Тогда доля частиц, отклоненных в однократном рассеянии на угол, больший θ , есть $\sum_i v_i \pi b_i^2 \theta^2$, где предположено, что θ так велик, что имеет место резерфордское рассеяние. Если первоначально угол частицы по отношению к цепочке есть нуль градусов, мы можем непосредственно получить «хвост» распределения по поперечной энергии, и вклад χ_3 в χ получается равным

$$\chi_3 = \sum_i v_i \pi b_i^2 E \int_0^\infty \Pi(E_\perp) \frac{dE_\perp}{E_\perp^2}. \quad (6,15)$$

Интеграл в (6,15) может быть вычислен при помощи (6,6) или (6,7). При высоких энергиях частиц и для $\rho < a$ мы можем предположить грубо, что $\Pi \sim 0$ для $E_\perp < E\psi_1^2$ и $\Pi \sim 1$ для $E_\perp > E\psi_1^2$, и это приводит к $\chi_3 \sim \psi_1^{-2} \sum v_i \pi b_i^2$. Этот результат интересен в нескольких отношениях. Величина χ_3 может превышать χ_1 или χ_2 , если имеется значительный слой поверхностных атомов с не слишком малым атомным номером. Видно также, что при высоких энергиях частиц χ_1 , χ_2 и χ_3 могут быть пропорциональны расстоянию d между атомами цепочки. Поэтому можно ожидать, что минимальный выход, когда он еще является малым, при увеличении d возрастает. В любом случае, если измеренные величины провалов близки к приведенным оценкам величин минимумов, по-видимому, имеется возможность детально изучать многократное рассеяние и т. д., как уже обсуждалось в начале этой главы.

6.4. З а м е ч а н и я о т н о с и т е л ь н о э к с п е р и м е н т о в *)

Хотя подробное сравнение с экспериментами здесь не должно приводиться, может быть, следует кратко прокомментировать некоторые эксперименты, непосредственно связанные с теорией. Мы сделаем это в духе вводных замечаний этой главы (см. стр. 282), выбрав первичные ориентационные эффекты.

*) Большое количество экспериментальных работ содержится в трудах международных конференций (см. Nucl. Instrum. and Meth. 38 (1965) и Canad. J. Phys. 46 (3) (1968)). (Прим. ред.)

При проведении экспериментов по (p, γ) -реакциям в Al и Si при энергиях ~ 400 кэв Бох, Дэвис и Нильсен⁷ наблюдали ожидавшееся уменьшение выхода в направлениях цепочек. Выход пропорционален $\Pi(E_{\perp})/S_e(E_{\perp})$, т. е. распределению вероятности по E_{\perp} , зависящему от внешнего угла. Наблюдавшееся уменьшение примерно в 5 раз было достаточным для того, чтобы вызвать ряд надежд⁵, как потому, что возмущающим влиянием электронного торможения в этих условиях можно пренебречь, так и потому, что, по-видимому, можно сравнительно легко развить дальше этот метод изучения твердого тела. Эти измерения как по цели, так и по результату отличаются от измерений Томпсона¹⁹.

В предыдущих экспериментах четко проявились и эффекты плоскостей. При этом использовались протоны более высоких энергий²⁰. В связи с (p, γ) -реакциями, скорость которых пропорциональна $S_e^{-1}(E_{\perp})$, можно упомянуть, что они могут также быть использованы для идентификации междоузлий, когда для атомов, находящихся вне цепочки, при $\psi_e < \psi_1$ (см. стр. 282 и (3,19)) вместо провалов должны появляться пики в выходе частиц.

Измерения Домея и Бьёрквиста¹⁸ являются особенно простыми и содержат богатую информацию. Угловые распределения α -частиц, эмитированных тяжелыми ионами, застрявшими в W, обнаруживают уменьшение примерно в 4 раза, и угловые ширины этих провалов соответствуют формуле (2,9). Можно сделать вывод, что большинство ионов (если не все) оканчивает свой путь в узлах решетки. При более детальных измерениях, включающих изменение температуры, было бы возможно проверять положение ионов в решетке и даже контролировать колебания (ср. также (6,9)).

Наблюдения, использующие резерфордовское рассеяние на большие углы, должны, по-видимому, обеспечить обещающий и многосторонний метод исследования вследствие больших сечений и свободного выбора Z_1 и Z_2 ⁵. Выполненные Бохом и Уггерхоем²² измерения резерфордовского рассеяния протонов с энергией 400 кэв в Ta с энергетическим анализом выходящих протонов дают наиболее определенную и подробную информацию, полученную до сих пор. Ясно видны как низко-, так и высокоиндифицированные цепочки. Угловые ширины в зависимости от d и E находятся в соответствии с формулами (2,9) и (2,10) и провалы приближаются к нижним пределам (см. стр. 286 и работу⁵). Эффект плоскостей виден как фон для преобладающих провалов, обусловленных цепочками*). Можно добавить в качестве примера, что резерфордовское рассеяние может быть использовано для определения положений атомов загрязнений в узлах решетки или в междоузлиях.

В качестве примера других процессов, требующих, чтобы частица проходила вблизи ядер, упомянем, что Брандтом и др.²¹ были выполнены предварительные измерения возбуждения внутренних оболочек атома протонами с энергией ~ 100 кэв, но при интерпретации не принималось во внимание отталкивание цепочками атомов.

Что касается вторичных ориентационных эффектов (ср. стр. 255), то наиболее заметным является торможение. Для быстрых протонов наиболее точные измерения были выполнены Эргинсом, Вегнером и Гибсоном¹¹. Эти измерения ясно обнаруживают эффекты плоскостей и цепочек. Обнаружено, что потеря энергии уменьшается самое большее в 2 раза, что грубо соответствует формуле (3,15). Широкое распределение энергии

*) См. работы А. Ф. Тулинова, В. С. Куликаускаса, М. М. Малова (Phys. Lett. 18, 304 (1965)) и D. S. Gemmel'я R. E. Holland'a (Phys. Rev. Lett. 14, 945 (1965)). (Прим. ред.)

ческих потерь не может быть обусловлено обычным разбросом, который становится совсем малым согласно формуле (3,12), но происходит за счет статистики первых двух стадий движения частицы, о которых упоминалось выше.

Многочисленные тщательные эксперименты по изучению проникновения тяжелых ионов в килоэлектрон-вольтной области энергий проведены главным образом Дэвисом и коллегами (например, ¹ и ²³) и Лютцем и Зицманном ²⁴.

Я особенно признателен Вибекке Нильсен за сотрудничество и советы, ей и Филиппу Лервигу за полную энтузиазма критику и Сузанне Толди за неутомимую помощь в подготовке этой рукописи.

Для меня было большим удовольствием сотрудничать с Карлом Ове Нильсеном, который, кроме того, любезно способствовал публикации этой работы, с Э. Бохом, Дж. А. Дэвисом и Э. Эйлертсеном и Дж. У. Андерсеном и Э. Уггерхоом, а также с другими сотрудниками института.

Я весьма обязан Н. Бергштрёму, Б. Домею, К. Эргинсоу, У. М. Гибсону и О. С. Оену за обсуждения и за сообщение результатов экспериментов до их публикации.

ПРИЛОЖЕНИЯ

1. КЛАССИЧЕСКОЕ РАССЕЯНИЕ ИДЕАЛЬНОЙ ЦЕПОЧКОЙ И НЕПРЕРЫВНЫЙ ПОТЕНЦИАЛ

Точность приближения непрерывной цепочки может быть приближенно оценена в рамках классической механики. Кроме классической механики, в данном приложении вычисления основываются на представлении об идеальной цепочке, где атомы расположены на прямой линии с постоянным расстоянием d между ними. Эти представления легко распространяются на идеальную решетку.

Первое обстоятельство, которое следует отметить, заключается в строгом сохранении момента количества движения относительно цепочки. Сначала мы обсудим только случай нулевого момента. Это наименее благоприятный случай для сохранения поперечной энергии, потому что частица проходит ближе всего к цепочке.

Пусть атомы размещены на оси z при $z = 0, \pm d, \pm 2d, \dots$. Удобно ввести плоскости на половине расстояния между атомами $z = \pm d/2, \pm 3d/2, \dots$ и измерять поперечные координаты (x, y) в этих плоскостях. Расстояние от цепочки равняется $r = (x^2 + y^2)^{1/2}$, и предполагается, что движение происходит в плоскости, содержащей цепочку (см. выше). Мы хотим найти, с какой точностью сохраняется поперечная энергия между двумя плоскостями: a -плоскостью, где $z_a = -d/2$, b -плоскостью, где $z_b = +d/2$. В a -плоскости расстояние от оси z равно r_a и угол с осью z есть ψ_a , в b -плоскости расстояние и угол равны r_b и ψ_b . При $z = 0$, где происходит отклонение, расстояние от оси равно r_0 . Тогда $r_b = r_0 \psi_b d/2$ и $r_a = r_0 \psi_a d/2$. Отклонение при r_0 равно (см. (2,1))

$$\varphi = \psi_b - \psi_a = -\frac{dU'(r_0)}{2E}, \quad (1,1)$$

r_0 и $r_b - r_a$ даются выражениями

$$r_0 = \frac{r_a + r_b}{2} - \varphi \frac{d}{4}, \quad r_b - r_a = \frac{d}{2} (\psi_a + \psi_b). \quad (1,2)$$

Мы здесь пренебрегаем теми членами в r_0 , порядок величины которых $(\psi_a + \psi_b)^2/2$, и теми членами в $r_b - r_a$, порядок величины которых $\varphi r_0/d$.

Из этих соотношений мы можем найти степень сохранения поперечной энергии, содержащую степени ψ только меньшие, чем четвертые; последнее ограничение неявно содержится в приближении малых углов для ψ .

Введем временно поперечные энергии $E_{\perp}(r_a)$ и $E_{\perp}(r_b)$:

$$E_{\perp}(r_a) = E\psi_a^2 + W(r_a), \quad E_{\perp}(r_b) = E\psi_b^2 + W(r), \quad (1,3)$$

и зададимся вопросом, может ли приближенно сохраняться энергия такого вида, т. е.

$$E_{\perp}(r_a) = E_{\perp}(r_b). \quad (1,4)$$

Если (I,4) имеет место, то легко вычислить угол отхода от цепочки ψ , так как $E\psi^2 = E_{\perp}$. Полная обоснованность приближения непрерывности должна означать, что сохранение в (I,3) имеет силу не только на плоскости, расположенной на половине расстояния между атомами, но также выполняется при других значениях z .

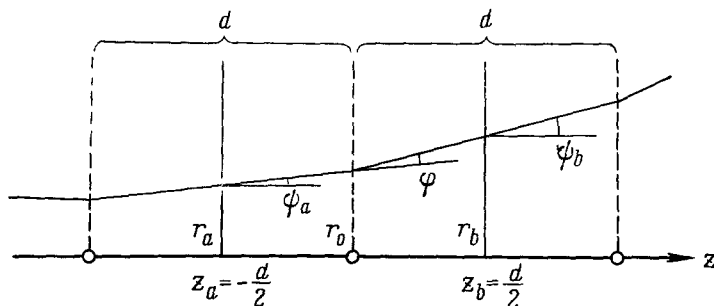


Рис. 2. Классические отклонения частицы идеальной цепочкой с координатами, отмеченными на плоскостях, расположенных на половине расстояния между атомами (см. текст).

Рассмотрим разность между $E_{\perp}(r_a)$ и $E_{\perp}(r_b)$ в (I,3) и исключим ψ_a и ψ_b посредством (I,4):

$$E_{\perp}(r_b) - E_{\perp}(r_a) = W(r_b) - W(r_a) - (r_b - r_a) U'(r_0). \quad (I,5)$$

Так как (I,2) является неявным уравнением для r_0 , т. е. для

$$r_0 = \frac{r_a + r_b}{2} + \frac{d^2}{8E} U'(r_0), \quad (I,6)$$

r_0 и $U'(r_0)$ являются в данном приближении функциями только суммы $r_a + r_b$. Среднее расстояние $(r_a + r_b)/2$ обозначается для краткости как r ; мы можем отыскать связь между дифференциалами r и r_0 . Из (I,6) получается

$$dr = dr_0 \left[1 - \frac{d^2}{8E} U''(r_0) \right]. \quad (I,7)$$

Если r_0 первоначально велико и затем убывает, оба члена dr и dr_0 останутся примерно одинаковыми до тех пор, пока выражение в скобках в (I,7) не станет равным нулю. После этого r быстро возрастает по мере того, как r_0 стремится к нулю. Поэтому целесообразно потребовать

$$E > \frac{d^2}{8} U''(r_{\min}), \quad (I,8)$$

для того, чтобы поперечное движение могло быть описано непрерывным потенциалом. В (I,8) расстояние наибольшего приближения к цепочке равно $r_{\min} = r_{\min}(E_{\perp})$ для поперечной энергии E_{\perp} . Критерий (I,8) почти эквивалентен критериям в (2,9), (2,10) или (2,7). Для того чтобы найти W , мы разложим в ряд в (I,5):

$$W(r_b) - W(r_a) = (r_b - r_a) W'(r) + \frac{1}{24} (r_b - r_a)^3 W'''(r) + \dots \quad (I,9)$$

Полагая $r - r_0$ малым, найдем

$$U'(r_0) = U''(r) + U''(r) \frac{d^2}{8E} U'(r) + \dots \quad (I,10)$$

В результате этого находим, что если пренебречь последним членом в (I,9), то (I,5) становится равным нулю, когда потенциал $W(r)$ дается выражением

$$W(r) = U(r) + \frac{d^2}{16E} [U'(r)]^2 + \dots \quad (I,11)$$

Однако легко проверить, что условие (I,8) требует, чтобы второй член в (I,11) оставался малым по сравнению с первым. Поэтому мы можем отождествлять $W(r)$ с непрерывным потенциалом $U(r)$. Тем не менее второму члену в (I,11) может быть дана

простая физическая интерпретация, а именно он отвечает за однократное рассеяние (хотя и неполностью, см. ниже).

Мы пренебрегли последним членом в (I,9). Так как нам требуется лишь грубая оценка, мы можем при помощи этого члена найти верхний предел нарушения сохранения поперечной энергии при соударении с цепочкой. Действительно, предположим, что этот член представляет удвоенную неопределенность в сохранении энергии при переходе от z_a к z_b . Предположим даже, что неопределенности складываются. Полная неопределенность в поперечной энергии после столкновения должна быть меньше, чем эта сумма. Мы напишем сумму как интеграл, где можем положить $(r_b - r_a)^2 = d^2\psi_r^2 = d^2[E_\perp - U(r)]E$, а также и $W(r) = U(r)$:

$$\delta E_\perp \rightarrow \int_{r_{\min}}^{\infty} \frac{d^2}{24E} [E_\perp - U(r)] U''(r) dr = \frac{d^2 U'(r_{\min})^2}{48E} = \frac{d^2}{48E} E_\perp \frac{v^2}{r_{\min}^2}, \quad (\text{I},12)$$

где v — эффективная степень $U(r)$, $v = -d \ln U(r) / d \ln r$. Правая часть становится сравнимой с E_\perp , только если $E_\perp > E\psi_r^2$, как и можно было ожидать. Кроме того, правая часть уменьшается как E_\perp в степени между 3 и 4, так как $v \sim 1-2$. Поэтому видно, что сохранение поперечной энергии должно осуществляться точно, если E_\perp невелико. Итак, мы делаем вывод, что сохранение поперечной энергии, выражаемой равенством (I,4), является хорошим приближением и что отклонения от этого должны происходить за счет, например, колебаний атомов.

В связи с (I,3), (I,4) и (I,11) можно также отметить особый случай потенциала гармонического осциллятора. Тогда высшие производные U стремятся к нулю и получается точное решение. Действительно, предположим, что $U_t(r) = Cr^2/2$. Общий случай двумерного движения удовлетворяет уравнениям (I,5) и (I,6), которые дают

$$E\psi_a^2 + \frac{1}{2} Cr_a^2 \frac{1}{1 - (d^2C/8E)} = E\psi_b^2 + \frac{1}{2} Cr_b^2 \frac{1}{1 - (d^2C/8E)}. \quad (\text{I},13)$$

Поэтому надо потребовать, чтобы $E > d^2C/8$ для того, чтобы движение не расходилось. Этот критерий совпадает с (I,8). Если потенциал не ограничивается поперечной плоскостью атомов, критическая энергия несколько уменьшается.

Выше было показано, что поперечная энергия E_\perp будет сохраняться. Однако энергия частицы в лабораторной системе не изменялась во время столкновения, т. е. мы пренебрегали энергией атома отдачи. Покажем кратко, что даже с учетом этого эффекта можно обычно считать, что E_\perp будет сохраняться при столкновении. С этой целью рассмотрим упругое столкновение, когда энергия частицы после соударения равна $E - T_n$, где T_n дается выражением (3,9). Изменение энергии означает само по себе уменьшение поперечной энергии $\delta E_{\perp,1} = -T_n\psi_r^2$. Кроме того, когда имеет место передача энергии и момента импульса, траектория уходящей частицы смещается наружу на δr (см. работу ¹⁰): $\delta r \approx \frac{T_n}{E} \left[\frac{U(r)}{rU'(r)} + \frac{1}{2} \right] r$. Соответствующее изменение E_\perp при столкновении равно $\delta E_{\perp,2} = \delta r U(r)$. Тогда полное изменение равно $\delta E_{\perp,1} + \delta E_{\perp,2}$. Затем предположим, что $U \propto r^{-v}$, и найдем статистическое среднее δE_\perp для цепочек согласно (3,6). Простое вычисление показывает, что для $r_{\min} \ll r_0$

$$\frac{\langle \delta E_\perp \rangle}{E_\perp} = \frac{v-1}{3} \frac{\langle T_n \rangle}{E}. \quad (\text{I},14)$$

Следовательно, E_\perp сохраняется очень точно, если $0 < v < 2$ (см. стандартный потенциал (2,6)). По этой причине, а также поскольку электронное торможение обычно преобладает над ядерным, особенно когда E_\perp мало, обычно мы можем пренебрегать изменением в E_\perp за счет упругих ядерных столкновений в идеальной цепочке. Изменение E_\perp при столкновении обычно обусловлено электронным торможением, а также другими эффектами, упоминавшимися в гл. 4.

а) Общие уравнения движения

В качестве альтернативы приведенных выше оценок мы рассмотрим несколько иное приближение, связанное с вариационными принципами динамики и полезное для численных оценок. Для этой цели мы запишем расстояние r_j при $z = jd$, где j — целое число. Так как основное уравнение для отклонения имеет вид

$$\frac{r_{j+1} - 2r_j + r_{j-1}}{d} = \frac{dU'(r_j)}{2E}, \quad (\text{I},15)$$

мы можем образовать сумму

$$\sum L_j = \sum_{j=n+1}^m \left\{ E \frac{(r_j - r_{j-1})^2}{d^2} - U(r_j) \right\}, \quad (I,16)$$

и орбита для заданных значений координат r_n и r_m определится изменением всех r_j , $j = n+1, \dots, (m-1)$, со стационарным значением (I,16).

До сих пор предполагалось, что отклонение происходит в плоскости $z = z_j$, а сила является приблизительно δ -функцией. На больших расстояниях от цепочки это не совсем правильно. Легко ввести плавно меняющуюся силу в настоящее рассмотрение. Действительно, пусть $U_t(r, z)$ будет полный потенциал в решетке. Тогда траектория из (r_1, z_1) в (r_2, z_2) определяется вариационным принципом:

$$\delta \int_{z_1}^{z_2} \alpha [w(z), r(z), z] dz = 0, \quad r(z_1) = r_1, \quad r(z_2) = r_2, \quad (I,17)$$

где

$$\alpha [w(z), r(z), z] = \frac{1}{2} M_1 w^2(r) - U_t[r(z), z], \quad w(z) = v \frac{d}{dz} r(z)$$

и все углы предполагаются малыми, т. е. $w \ll v$. Уравнения Лагранжа (I,16) и (I,17) могут быть превращены в уравнения Гамильтона, но вследствие явной зависимости α от z , т. е. от временной переменной, обычное простое сохранение энергии не получается.

б) Эмиссия частиц из атома в идеальной цепочке

На основе приблизительного сохранения поперечной энергии E_{\perp} в (I,4) мы можем рассмотреть эмиссию частиц из центра атома в цепочке. Представляет интерес найти как минимальный угол, так и угловое распределение. Напомним, что это не слишком хорошо отражает действительную эмиссию из атома в решетке, потому что мы пренебрегаем колебаниями атомов и в некоторых случаях необходимо вводить и квантовые поправки. Однако все же мы получим альтернативную оценку применимости непрерывного изображения цепочки.

Частица эмиттируется из точки $r = 0$, $z = 0$ под углом Φ . Ее полная энергия $E_{\perp} = E\psi^2$ тогда дается выражением (I,3) и (I,11), где энергия записывается при значении $z = d/2$, т. е. $r_b = d\Phi/2$, $\psi_b = \Phi$, и когда мы предполагаем

$$E\psi^2 = E\Phi^2 + U\left(\frac{\Phi d}{2}\right). \quad (I,18)$$

Поскольку вероятность эмиссии пропорциональна дифференциалу телесного угла $\approx 2\pi\Phi d\Phi$, распределение вероятности по углу ψ также содержится в (I,18). Если второй член в (I,11) учитывается, мы должны еще добавить $W_2 = EU'^2 d^2 (\Phi d/2)(4E)^{-2}$ в правую часть уравнения (I,18).

Для того чтобы получить количественные оценки, мы вводим стандартный потенциал (2,6), и (I,18) принимает вид

$$\psi^2 = \Phi^2 + \frac{\psi_1^2}{2} \ln \left(\frac{4C^2 a^2}{d^2 \Phi^2} + 1 \right). \quad (I,19)$$

Добавочный член будет $W_2 = \psi_1^4 (2\Phi)^{-2} [1 + (\Phi^2 d^2 / \psi C^2 a^2)]^{-2}$.

Интересно сравнить члены в (I,18) и (I,19) с соответствующими членами при рассеянии одним атомом. Для рассеяния одним атомом, с теми же обозначениями, что и в (I,18), получается

$$\psi^2 = \left[\Phi - \frac{d}{2E} U'(\Phi d) \right]^2 = \Phi^2 - \frac{\Phi d}{E} U'(\Phi d) + \frac{d^2}{4E^2} U'^2(\Phi d),$$

где первый член равен соответствующему члену в (I,19), тогда как второй стремится к ψ^2 при низких значениях Φ . Третий член преобладает, когда Φ мал, и становится подобным W_2 при $\Phi \rightarrow 0$. Однако если $\psi_1 > a/d$, третий член может стать $\sim W_2/16$. Это указывает на неопределенность в W_2 . В дальнейшем мы пренебрегаем W_2 главным образом потому, что вклад этого члена не очень сильно влияет на оценки критических углов.

Возвращаясь к (I,19), мы можем вычислить минимум ψ_{\min} угла эмиссии ψ . Минимум получается для

$$\Phi^2 = -\frac{2C^2a^2}{d^2} + \left[\left(\frac{2C^2a^2}{d^2} \right)^2 + \psi_1^2 \frac{2C^2a^2}{d^2} \right]^{1/2}.$$

Принято различать два предельных случая. Предположим, что ψ_1 мал по сравнению с $a/2$. Тогда

$$\psi_{\min} = \psi_1 \left[\ln \left(\frac{\alpha C a}{\psi_1 a} \right) \right]^{1/2} \quad \text{для } \psi_1 < \frac{a}{d}, \quad (\text{I,20})$$

где $\alpha = 2^3 \cdot 2$. Коэффициент ψ_1 порядка 1,5–2 и почти не зависит от E и ψ_1 , если ψ_1 мал.

При низких энергиях, когда $\psi_1 > a/d$, мы находим из (I,19) минимальный угол

$$\psi_{\min} = 2 \left(\frac{\psi_1}{\sqrt{2}} \frac{C a}{d} \right)^{1/2} = 2\psi_2 \quad \text{для } \psi_1 > \frac{C}{d}. \quad (\text{I,21})$$

Имеется плавный переход между предельными случаями (I,20) и (I,21). Эти две формулы хорошо согласуются с качественными рассмотрениями в гл. 2 (см. (2,9) и (2,10)). Следует добавить, что в области низких энергий, где становятся важными все возрастающие прицельные параметры, стандартный потенциал (2,6), так же как и (I,21), нельзя считать правильными приближениями. В формуле (I,21), когда углы большие, только первый атом дает основной вклад в отклонение вблизи критического угла. Заслуживает внимания и тот факт, что, несмотря на использование упрощенного приближения поперечных потенциалов, критический угол, вычисленный по (I,21), на 14% больше соответствующего точного значения этого угла, получающегося при рассмотрении рассеяния только одним атомом, находящимся на расстоянии d . Это дает оправдание использованию поперечных непрерывных потенциалов в одном предельном случае.

II. КВАНТОВЫЕ ПОПРАВКИ К КЛАССИЧЕСКОМУ ОПИСАНИЮ

Последующее обсуждение разделяется на три раздела, из которых два первых являются преамбулой третьего раздела. Первый раздел «Однократные столкновения» касается обычного случая рассеяния, когда классическое описание является тем более точным, чем ниже скорости. Второй раздел «Непрерывная цепочка» показывает, что когда непрерывное описание полностью обосновано, поперечное движение частиц является существенно классическим. Целью третьего раздела «Идеальная цепочка» является оценка квантовой поправки к классическому отклонению реальной цепочкой. Показывается, что, в противоположность другим проблемам столкновений, классическое описание тем лучше, чем выше скорость частицы.

а) Однократные столкновения

При однократном столкновении условие классического рассмотрения определяется по существу двумя величинами: длиной волны λ относительного движения и $L = [\theta'(p)]^{-1}$, т. е. фокусным расстоянием классического рассеяния; $\theta(p)$ — отклонение при прицельном параметре p . Полная неопределенность $\delta\theta$ в угле рассеяния может быть получена способом, аналогичным использованному Бором¹². Предположим, что угол $\theta(p)$ мал и, следовательно, определяется (2,1). При волновом пакете шириною δr имеют место два вклада в $\delta\theta$: один из-за дифракции и другой из-за классической неопределенности положения, т. е.

$$(\delta\theta)^2 = \frac{\lambda^2}{4(\delta r)^2} + (\delta r)^2 [\theta'(p)]^2. \quad (\text{II,1})$$

Минимальное значение (II,1) получается при $(\delta r)^2 = \lambda/2\theta'(p)$ и равно

$$(\delta\theta)^2 = \lambda \theta'(p). \quad (\text{II,2})$$

Для того чтобы получить вполне определенную орбиту, мы можем потребовать, чтобы $(\delta\theta)^2 < \theta^2$ или

$$\lambda \frac{d}{dp} \left[\frac{1}{\theta(p)} \right] < 1. \quad (\text{II,3})$$

Эта формула в случае резерфордского рассеяния, когда $\theta = b/p$, приводит к неравенству Бора¹²

$$\kappa = \frac{2Z_1 Z_2 e^2}{\hbar v} > 1. \quad (\text{II,4})$$

Для экранированного поля стандартного атомного потенциала (2,6) условие (II,3) и формула рассеяния (2,1) дают несколько более сильное условие

$$\kappa > 1 + \frac{3\rho^2}{C^2 a^2} \sim 1 + \frac{\rho^2}{a^2}. \quad (\text{II},5)$$

Приведенные выше формулы применимы для относительного движения, когда $\lambda = \hbar/M_0 v$ и $\theta(p)$ — отклонение в системе центра инерции. Однако можно показать, что эти результаты применимы также в лабораторной системе, если выполняется условие (2,1), т. е. для $\lambda = \hbar/M_1 v$; $\theta(p)$ — отклонение в лабораторной системе.

Это приводит к небольшому изменению в (II,1) и (II,2), поскольку M_0 заменяется на M_1 . Однако (II,3), (II,4), (II,5) не изменяются, поскольку массы частиц не входят в эти формулы (ср. (2,1)).

Следует особенно подчеркнуть, что (II,3) и подобные условия применимости классической механики являются относительными, а отнюдь не абсолютными формулировками ограничений классических вычислений. Так, (II,3) входит в игру только в тех случаях, если требуется точно определенный угол отклонения на больших расстояниях от центра рассеяния при рассеянии либо одним, либо двумя центрами.

б) Непрерывная цепочка

Предположим, что непрерывное приближение справедливо. Тогда мы можем отыскать квантовые поправки к классическому поперечному движению. Это очень простая задача, поскольку и в классической, и в квантовой механике поперечная энергия сохраняется. В качестве простого примера рассмотрим потенциал цепочки $U(r) = Z_1 Z_2 e^2 \pi a / 2r$ и частицу с поперечной энергией E_{\perp} . Условие Бора (II,4), примененное к поперечному движению с начальной скоростью $v_{\perp} = v\psi$ и начальной энергией $E_{\perp} = E\psi^2$, дает

$$\kappa_{\perp} = \kappa \frac{\pi a}{2d} \frac{1}{\psi} > 1. \quad (\text{II},6)$$

Так как $\psi < \psi_1$, находим, что κ_1 всегда больше, чем (мы принимаем $a \sim a_0 Z_2^{-1/3}$)

$$\kappa_{\perp} \geq \frac{\pi}{2} \left(\frac{M_1}{m} \right)^{1/2} \left(Z_1 Z_2^{1/3} \frac{a_0}{d} \right)^{1/2}. \quad (\text{II},7)$$

Правая часть (II,7) не зависит от энергии и, конечно, велика по сравнению с единицей, если M_1 велика по сравнению с массой электрона m . В общем случае отклонения цепочки формулы (2,21), (2,15) и (II,3) показывают, что классическое описание применимо, если $\lambda_{\perp} \ll a$. Важным является то обстоятельство, что не происходит квантового туннельного эффекта к центру непрерывной цепочки. Такое рассмотрение может быть распространено, например, на непрерывные плоскости, но для наших целей это едва ли необходимо.

Иллюстрацией может служить следующий любопытный переход от идеальной цепочки к непрерывной. Начнем с идеальной цепочки атомов, с расстоянием между атомами, равным d . Представим себе, что каждый атом разделен на две равные части разрезом, перпендикулярным цепочке, с сохранением расстояний между электронами и цепочкой. Половинки размещаются на постоянном $(d/2)$ расстоянии друг от друга. Затем разрезаем каждую половинку еще на две части и делаем расстояние между ними $d/4$. Этот процесс может быть продолжен, и получаемые цепочки все более и более приближаются к настоящей непрерывной цепочке. С одной стороны, рассмотрим изолированное столкновение между движущейся частицей и долей атома, оставшейся на n -й стадии. Применим приближение Борна. Оно будет тем точнее, чем выше стадия разделения. Орбитальное описание отклонения здесь уже совершенно не годится (ср. предыдущий раздел). С другой стороны, непрерывное описание движения частиц дает все большую и большую точность по мере описанного выше процесса деления атомов, и вычисления данного раздела становятся оправданными. Фактически движение становится более классическим. Но в любом случае использование непрерывного описания не определяется изолированным рассеянием в смысле однократного; решающим параметром является величина интервала времени d/v между последовательными столкновениями, как выявится из следующего раздела и из (2,27).

в) Идеальная цепочка

При рассмотрении квантовых поправок к классическому описанию ряда последовательных столкновений мы должны сравнить соотношение ряда величин. Можно ввести пять основных величин такого сорта, а именно

$$\lambda, L_f = [\theta'(r)]^{-1}, a, d, L_{\text{ст}}, \quad (\text{II},8)$$

где первые три параметра могут быть отнесены также и к однократным столкновениям, тогда как d есть расстояние между последовательными столкновениями, и $L_{CT} = vd$ (см. (2,7)) — эффективная длина столкновения с цепочкой, складывающаяся из многих отдельных атомных столкновений. Очевидно, что $L_{CT} > d \gg a$ и для рассматриваемого здесь типа столкновений мы тоже имеем $\lambda \ll d$.

Кроме вышеприведенных величин, мы будем иметь дело и с другими, частично составленными из первых пяти в (II,8). Итак, если волновой пакет шириною δr образуется при поперечном движении, то он не расплывается существенно на длине пробега $L_w = (\delta r)^2 / \lambda$. Мы хотим выбрать размер $(\delta r)^2$ волновых пакетов, т. е. L_w оптимальным образом. Решающий вопрос состоит в том, является ли L_w большой или малой по сравнению с d , т. е. с расстоянием между последовательными столкновениями. Предположим в виде пробы, что d велико по сравнению с L_w : мы будем тогда иметь набор случайно добавляющихся флуктуаций. В i -м столкновении угловая флуктуация аналогична (II,1):

$$\delta \theta_i^2 = \frac{\lambda^2}{4(\delta r)_i^2} + (\delta r_i)^2 \theta'^2(r_i), \quad (\text{II,9})$$

т. е., когда она минимальна, имеют место соотношения

$$(\delta r)_i^2 = \frac{\lambda}{2\theta'(r_i)}, \quad (\delta \theta_i)^2 = \lambda \theta'(r_i), \quad (\text{II,10})$$

и полностью угловая флуктуация имеет вид

$$(\delta \theta)^2 = \lambda \sum_i \theta'(r_i). \quad (\text{II,11})$$

Однако при этом выводе мы предполагали, что $d > L_{w,i}$, где $L_{w,i} = 1/2\theta'(r_i)$, согласно (II,10). Так как $\theta(r_i) \approx \theta(r_i)/r_i$, это означает, что $d > r_i/\theta_i$. Это прямо противоречит основному условию (2,7), требующему, чтобы отталкивание частицы происходило за счет нескольких столкновений, т. е. чтобы было $L_{CT} > d$. Поэтому мы должны предположить, что $L_w \gg d$, и можем заключить, что (II,11) неприменимо. Вывод о том, что волновые пакеты в последовательных столкновениях не являются независимыми, находится в соответствии с неравенствами (2,27), (2,27').

Пренебрегая предположениями, приводящими к (II,11), мы должны в таком случае рассмотреть волновой пакет, который примерно сохраняет свою ширину в течение всей последовательности столкновений. Если его ширина равна δr , полный вклад в угловую дисперсию за счет дифракции равен $(\delta \theta)^2_{\text{диф}} = \lambda^2/4 (\delta r)^2$, что может быть сопоставлено с соответствующим членом $\sum \lambda^2/4 (\delta r)_i^2$ в (II,9), (II,10). Что же касается полной неопределенности в отклонении частицы последовательными силовыми полями, мы предполагаем, что имеет место отсутствие когерентности между последовательными столкновениями. Если бы эти столкновения были полностью когерентными, неопределенность в полном отклонении исчезла бы, когда сохраняется поперечная энергия. Для того чтобы получить слегка завышенную оценку неопределенности, предположим, что последовательные члены некогерентны, т. е. в итоге имеем равенство

$$(\delta \theta)^2 = \frac{\lambda^2}{4(\delta r)^2} + (\delta r)^2 \sum_i \theta'^2(r_i), \quad (\text{II,12})$$

приводящее к

$$(\delta \theta)^2 = \lambda \left[\sum_i \theta'^2(r_i) \right]^{1/2} \quad (\text{II,13})$$

и

$$(\delta r)^2 = \frac{\lambda}{2} \left[\sum_i \theta'^2(r_i) \right]^{-1/2}. \quad (\text{II,14})$$

Согласно (II,13) и (II,14) как $(\delta \theta)^2$, так и $(\delta r)^2$ становятся меньше, чем соответствующие выражения (II,11) и (II,10), относящиеся к полностью независимым волновым пакетам. Так как при уменьшении r_i величина $\theta'^2(r_i)$ сильно уменьшается, может оказаться правомерным для больших E_{\perp} включить в (II,14) только лишь эффект самых близких столкновений.

Если мы заменим суммирование в (II,13) интегрированием, т. е. перейдем к непрерывному приближению, то найдем

$$(\delta \theta)^2 = \lambda \frac{d^{1/2}}{2E} \left\{ \int_{-\infty}^{+\infty} U''^2[r(z)] dz \right\}^{1/2}, \quad (\text{II,15})$$

где $r(z)$ — расстояние от цепочки как функция от координаты z , измеренной вдоль цепочки. Интеграл в скобках зависит только от E_{\perp} и от прицельного параметра l в поперечном движении, но не зависит от d . Поэтому выражение (II,15) стремится к нулю при $d \rightarrow 0$, как это имеет место и для непрерывных цепочек, в противоположность (II,11).

Если (II,15) умножить на E , оно будет представлять собой изменение поперечной энергии в одном столкновении. Рассмотрим частицы при различных энергиях E , но в каждом случае с одними и теми же поперечными энергиями E_{\perp} . Согласно (II,15) рост их поперечной энергии из-за флуктуаций за счет кантовых поправок будет в таком случае пропорционален длине волны λ поступательного движения частицы. Поэтому квантовые поправки к классическому описанию при увеличении скорости v уменьшаются.

Более подробный анализ квантовых эффектов опубликован в соавторстве с Ф. Лервигом и В. Нильсен ²⁵.

Институт физики
при Университете Орхуса, Дания

ЦИТИРОВАННАЯ ЛИТЕРАТУРА

1. G. R. Piercy, F. Brown, J. A. Davis, M. McCargo, Phys. Rev. Lett. **10**, 399 (1963).
2. G. Dearnley, IEEE Trans. Nucl. Sci. NS-11, No. 3, 249 (1964); R. S. Melson, M. W. Thompson, Phil. Mag. **8**, 1677 (1963).
3. G. K. Wehner, Advances in Electronics **7**, 239 (1955); см. также: P. K. Rol, J. M. Fluit, F. P. Viehloek, M. de Jong, Proc. 4th Conf. on Ionization Phenomena in Gases, Uppsala, North-Holland Publ. Co., 1959, стр. 277.
4. M. T. Robinson, O. S. Oen, Appl. Phys. Lett. **2**, 30 (1963); Phys. Rev. **132**, 2385 (1963).
5. J. Lindhard, Phys. Lett. **12**, 126 (1964).
6. J. Lindhard, M. Scharff, H. E. Schiøtt, Mat.-Fys. Medd. Dan. Vid. Selsk. **33**, No. 14 (1963).
7. E. Bøgh, J. A. Davies, K. O. Nielsen, Phys. Lett. **12**, 129 (1964).
8. C. Lehmann, G. Leibfried, J. Appl. Phys. **34**, 2821 (1963).
9. P. Gombas, Die Statistische Theorie des Atoms, Springer Verlag, Wien, 1949.
10. J. Lindhard, V. Nielsen, M. Scharff, Mat.-Fys. Medd. Dan. Vid. Selsk. **36**, No. 10 (1968).
11. C. Erginsøy, H. Wegner, W. Gibson, Phys. Rev. Lett. **13**, 530 (1964).
12. N. Bohr, Mat.-Fys. Medd. Dan. Vid. Selsk. **18**, No. 8 (1948).
13. J. Lindhard, M. Scharff, Mat.-Fys. Medd. Dan. Vid. Selsk. **27**, No. 15 (1953).
14. V. Fano, Ann. Rev. Nucl. Sci. **13**, 1 (1963); см. также: Studies in Penetration of Charged Particles in Matter, NAS-NRC, Publ. No. 1133 (1964), стр. 1 и 287.
15. H. A. Bethe, Ann. d. Phys. **5**, 325 (1930).
16. J. Lindhard, Aa. Winther, Mat.-Fys. Medd. Dan. Vid. Selsk. **34**, No. 4 (1964).
17. E. J. Williams, Proc. Roy. Soc. **A125**, 420 (1929).
18. B. Domeij, K. Björkevis, Phys. Lett. **14**, 127 (1965).
19. M. W. Thompson, Phys. Rev. Lett. **13**, 756 (1964).
20. J. U. Anderson, J. A. Davies, K. O. Nielsen, S. Andersen, Nucl. Instrum. and Meth. **38**, 240 (1965).
21. W. Brandt, J. M. Kham, D. L. Potter, R. D. Worley, H. P. Smith, Phys. Rev. Lett. **14**, 42 (1964).
22. E. Bøgh, E. Uggerhøj, Phys. Lett. **17**, 116 (1965).
23. J. A. Davies, L. Eriksson, P. Jespersgaard, Nucl. Instrum. and Meth. **38**, 245 (1965).
24. H. Lutz, R. Sizmann, Phys. Lett. **5**, 113 (1963).
25. Ph. Lervig, J. Lindhard, V. Nielsen, Nucl. Phys. **A96**, 481 (1967)