

ОБЗОРЫ АКТУАЛЬНЫХ ПРОБЛЕМ

Межатомные потенциалы взаимодействия в радиационной физике

Г.В. Дедков

Рассмотрены современные методы вычисления парных межатомных и усредненных потенциалов взаимодействия ионов с атомами твердых тел. Наряду с традиционно известными статическими приближениями обсуждаются нестационарные и квазистационарные модели. В последнем случае рассмотрена модификация приближения электронного газа с учетом скорости относительного движения атомов v_1 . Кроме того, учитывается эффект ионизации и динамическое экранирование потенциалов электронным газом. Проводится сравнение теоретических моделей между собой и с экспериментальными данными. Рассматриваются энергетические потери и пробеги ионов в твердых телах, угловые распределения при многократном рассеянии, тормозные потери тяжелых ионов при плоскостном каналировании, спектральные линии излучения релятивистских электронов и позитронов и другие эффекты.

PACS numbers: 34.20.-b

Содержание

1. Введение (919).
 2. Теоретическое рассмотрение (920).
 - 2.1. Стационарные квантовомеханические модели. 2.2. Приближения Томаса–Ферми и Томаса–Ферми–Дирака. 2.3. Приближение электронного газа. 2.4. Правила комбинирования потенциалов. 2.5. Аналитические аппроксимации. 2.6. Нестационарные теории. 2.7. Зависящие от скорости (энергии) межатомные потенциалы взаимодействия.
 3. Взаимодействие заряженных частиц с твердыми телами (931).
 - 3.1. Дифференциальные сечения ион-атомного рассеяния. 3.2. Упругие и неупругие энергетические потери и пробеги ионов в твердых телах. 3.3. Многократное рассеяние. 3.4. Динамическое экранирование потенциалов. 3.5. Непрерывные потенциалы атомных цепочек и плоскостей при каналировании. 3.6. Поверхностные эффекты. 3.7. Особенности взаимодействий при высоких энергиях.
 4. Экспериментальные результаты (941).
 - 4.1. Энергетические потери и пробеги ионов низких энергий. 4.2. Многократное рассеяние. 4.3. Критические углы каналирования. 4.4. Измерение траекторий и потенциалов при плоскостном каналировании тяжелых частиц. 4.5. Зависимость энергетических потерь тяжелых ионов от частоты осцилляций при плоскостном каналировании. 4.6. Характеристическое излучение каналированных электронов и позитронов.
 5. Заключение (949).
- Список литературы (950).

Г.В. Дедков, Кабардино-Балкарский государственный университет,
360004 Нальчик, Россия
Факс (095) 337-95-55, E-mail: dedkov@cs.kbgu.nalchik.ru

Статья поступила 4 апреля 1994 г.,
после доработки 25 января 1995 г.

1. Введение

Применение атом-атомных (ион-атомных) потенциалов взаимодействия (ПВ) независимо от конкретной задачи позволяет в первом приближении исключить из рассмотрения детали электронной структуры вещества, поэтому трактовка основных явлений, связанных с прохождением частиц через среду, прямо или косвенно опирается на понятие ПВ. В целом межатомные силы принято разделять на коротко- и дальнедействующие. Предметом этой работы, главным образом, являются короткодействующие силы, поскольку в радиационной физике твердого тела прицельные параметры частицы по отношению к атомам мишени малы. В некоторых случаях, однако, дальнедействующая часть потенциала тоже может оказаться существенной, как, например, при скользящем взаимодействии частицы с поверхностью.

Основные теоретические предпосылки, на которых базируется расчет статических ПВ изолированных нейтральных частиц, хорошо разработаны (см., например, [1–4]), однако проблема остается актуальной при переходе к ПВ ион–атом при произвольной степени ионизации и энергии налетающих ионов, с одной стороны, и при различных комбинациях партнеров — с другой. Очевидно также, что часто применяемое допущение об аддитивности взаимодействий частицы с отдельными атомами мишени имеет условный характер, точность которого не всегда легко оценить, поэтому желательно, сохраняя концепцию ПВ, иметь в виду необходимость учета динамических и многочастичных эффектов, а также специфических свойств мишени.

Хорошим примером является каналирование [5, 6], в теоретическом описании которого большую роль сыграло введение понятия непрерывного потенциала атомной цепочки (плоскости) [7].

В последнее время наряду с применением ПВ в традиционных задачах твердотельной и радиационной физики интерес к ним стимулировался предсказанием и открытием излучения релятивистских каналирующих частиц [8–10, 305–309, 319], диагностическими применениями этого излучения [10, 11, 306], а также растущими потребностями атомного материаловедения [12]. Кроме того, информация о потенциалах отталкивания традиционно важна для задач физической кинетики [13, 14] и лазерного возбуждения электронов [15, 16]. В последнем случае необходимо иметь потенциальные кривые в области минимума энергии, т.е. в переходной области между потенциалом отталкивания и дальнедействующим потенциалом.

В связи с интенсивным развитием указанных направлений представляет интерес анализ достижений в теоретических методах расчета ПВ, сделанных в последнее время, а также их применений для объяснения различных эффектов, возникающих при прохождении заряженных частиц в веществе. Большинство рассматриваемых вопросов в этом контексте в литературе освещено недостаточно полно (или не рассматривалось совсем), поэтому написание данного обзора представляется актуальной задачей.

Выбор материала определяется, с одной стороны, интересами автора, а с другой — ограниченностью объема статьи. Поэтому, в частности, в нее не вошли или мало отражены результаты, связанные с деканалированием и ориентационными эффектами при высоких энергиях, распылением твердых тел ионной бомбардировкой, фазовыми превращениями при облучении и многие другие. Для ознакомления с ними можно обратиться к обзорным статьям и монографиям [10, 12, 111, 145, 201, 306–309].

Раздел 2 включает обзор наиболее важных теоретических методов, применяемых при вычислениях парных потенциалов в молекулярных и ион-атомных системах. Сюда относятся, в первую очередь, стационарные квантовомеханические модели, приближения Томаса–Ферми и Томаса–Ферми–Дирака, а также метод электронного газа. Рассмотрено также большое количество аналитических моделей. Разделы 2.6 и 2.7 посвящены нестационарному приближению и квазистатическому обобщению теории электронного газа. В последнем случае потенциал ион-атомного взаимодействия зависит от энергии (скорости) вследствие потери электронной оболочки и изменения эффективности перекрытия ферми-сфер электронов в импульсном пространстве.

В разделе 3 анализируются классические эффекты взаимодействия ионов и легких частиц с твердыми телами, описание которых опирается на межатомные ПВ или усредненные потенциалы при каналировании (одно- и многократное рассеяние, торможение и пробеги). В разделах 3.1–3.3 обсуждаются проблемы расчета ион-атомных (ион-ионных) ПВ в твердых телах с учетом эффекта динамического экранирования электронным газом. В разделе 3.5 подробно рассмотрен вопрос о связи между различными приближениями для непрерывных потенциалов атомных цепочек (плоскостей) с учетом и без учета внешних периодических полей, в разделе 3.6 кратко описаны некоторые поверхностные эффекты, а в разделе 3.7 — особенности взаимодействий частиц с твердыми телами при высоких энергиях.

Раздел 4 содержит сопоставление теоретических моделей с некоторыми экспериментальными данными. Заостряется внимание на проблеме описания эффектов Z_1 -, Z_2 -осцилляций сечений рассеяния, торможения и пробегов ионов в полупроводниковых, металлических и газовых мишенях (раздел 4.1), на эффектах корреляции энергетических потерь с углом вылета из тонкой пленки и особенностях многократного рассеяния частично "ободранных" ионов (раздел 4.2); обсуждается вопрос о зависимости величины $\psi_{1/2}\sqrt{E}$ (где $\psi_{1/2}$ — угловая полуширина обратного рассеяния при каналировании, E — энергия иона) от энергии (раздел 4.3); в разделах 4.4 и 4.5 анализируются результаты измерения траекторий и потенциалов, а также зависимостей тормозных потерь тяжелых ионов от частоты осцилляций в условиях плоскостного каналирования; в разделе 4.6 сопоставляются теоретические и экспериментальные данные, относящиеся к характеристическому излучению каналированных электронов и позитронов (в плоскостном режиме), обсуждаются проблемы, связанные с диагностическими применениями этого излучения.

В заключении отмечаются некоторые важные, по мнению автора, нерешенные задачи и направления развития теории потенциалов взаимодействия и радиационных эффектов.

Список литературы, хотя и достаточно обширный, разумеется, не претендует на исчерпывающую полноту (особенно в отношении последних двух лет).

2. Теоретическое рассмотрение

Среди наиболее часто применяемых в радиационной физике приближений для расчета парных и средних потенциалов, атомных электронных плотностей и факторов и т.д. особое место принадлежит стационарным моделям Томаса–Ферми, Томаса–Ферми–Дирака и родственным им методам электронного газа и функционала электронной плотности [22, 176, 40, 86]. Более строгие теоретические схемы, базирующиеся на уравнении Шрёдингера [16, 21, 324], в силу своей сложности применялись для более ограниченного круга задач и остаются "верхней планкой" для целей радиационной физики. Тем не менее непрерывный прогресс в этой области вызывает необходимость постоянного совершенствования теории для более детального описания взаимодействия ионов с атомами вещества. Тем самым создается перспектива для развития и применений нестационарных и квазистационарных приближений теории межатомных потенциалов. Вместе с тем, сохраняют свое значение и многочисленные модельные аналитические аппроксимации. Объединение и анализ указанных приближений в одном разделе позволяет использовать его материалы автономно от других, непосредственно посвященных взаимодействиям в твердых телах.

2.1. Стационарные квантовомеханические модели

В основе квантовомеханических расчетов потенциальной энергии двухатомной системы лежит адиабатическое приближение к уравнению Шрёдингера, позволяющее отделить движение электронов от движения ядер, в результате применения которого имеем [17]

$$[\hat{H} - U(\mathbf{R})] \Phi(\mathbf{R}, \mathbf{r}) = 0, \quad (2.1)$$

где \mathbf{r} обозначает координаты электронов, \mathbf{R} — координата относительного движения ядер, гамильтониан \hat{H} включает кинетическую энергию электронов и потенциальные энергии взаимодействия ядер и электронов между собой и ядрами. Функция $U(\mathbf{R})$, являющаяся собственным значением оператора \hat{H} , определяет энергию системы при фиксированном расстоянии R . При $R \rightarrow \infty$ имеем $U(R) \rightarrow E_1 + E_2$, где $E_{1,2}$ — энергия изолированных атомов. Потенциал взаимодействия в общепринятой трактовке определяется выражением

$$V(\mathbf{R}) = U(\mathbf{R}) - U(\infty). \quad (2.2)$$

Решение уравнения (2.1) для целей радиационной физики до сих пор является далекой перспективой, поэтому представляют интерес более простые расчетные схемы, в частности метод разделения вкладов взаимодействия ионных остовов и валентных электронов [16]:

$$\begin{aligned} \hat{H} &= \hat{H}_1 + \hat{H}_2 + \hat{H}_v + \hat{H}_{12}, \\ V(\mathbf{R}) &= V_c(\mathbf{R}) + V_v(\mathbf{R}), \\ \Phi(\mathbf{R}, \mathbf{r}) &= \Phi_1(\mathbf{R}, \mathbf{r}) \Phi_2(\mathbf{R}, \mathbf{r}) \Phi_v(\mathbf{R}, \mathbf{r}), \end{aligned} \quad (2.3)$$

где $\hat{H}_{1,2}$ — гамильтонианы остовов, \hat{H}_v — гамильтониан валентных электронов, \hat{H}_{12} — взаимодействие остовов, $\Phi_{1,2}(\mathbf{R}, \mathbf{r})$ и $\Phi_v(\mathbf{R}, \mathbf{r})$ — волновые функции остовов и валентных электронов. Полагая $U(\infty) = E_1 + E_2 + E_v$, после подстановки (2.3) в (2.1) и разделения переменных получим (для простоты обозначения переменных \mathbf{R} и \mathbf{r} опущены)

$$\begin{aligned} (\hat{H}_1 + \hat{H}_2) \Phi_1 \Phi_2 - V_c \Phi_1 \Phi_2 &= (E_1 + E_2) \Phi_1 \Phi_2, \\ H_v \Phi_v - V_v \Phi_v &= E_v \Phi_v. \end{aligned} \quad (2.4)$$

Функции Φ_1 , Φ_2 и Φ_v должны, кроме того, удовлетворять соотношениям ортогональности

$$\langle \Phi_i | \Phi_v \rangle = 0, \quad i = 1, 2. \quad (2.5)$$

При малом перекрытии ионных остовов потенциал $V_c(R)$ вычисляется в первом порядке теории возмущений (при известных волновых функциях $\Phi_{1,2}$ ионных остовов)

$$V_c(R) = \langle \Phi_1 \Phi_2 | \hat{H}_{12} | \Phi_1 \Phi_2 \rangle. \quad (2.6)$$

Таким образом, проблема отыскания ПВ сводится к вычислению интеграла (2.6) и решению более простого (второго) из уравнений (2.4), в котором \hat{H}_v содержит лишь операторы кинетических энергий валентных электронов и их взаимодействий между собой и с остовами. Однако даже в этом случае задача остается достаточно сложной, поэтому на практике широкое распространение получил метод модельных потенциалов [18–21], в основе которого лежит представление гамильтониана в виде суммы $\hat{H}_v = \hat{T} + v_m$, в которой \hat{T} — оператор кинетической энергии электронов, а v_m — модельный потенциал. Различные формы таких потенциалов можно найти в обзоре [16]. Точность расчета ПВ, получаемых этим методом, обеспечивает согласие с экспериментальными данными по рассеянию молекулярных пучков и спектроскопии на уровне 5–10% (в области минимума потенциальных кривых). Примерно такую же точность обеспечивает метод функционала электронной плотности [86].

2.2. Приближения Томаса–Ферми и Томаса–Ферми–Дирака

В случае применения теории Томаса–Ферми (ТФ) и Томаса–Ферми–Дирака (ТФД) энергия двухцентровой системы записывается в виде [22] (здесь и далее используются атомные единицы: $e = \hbar = m_e = 1$)

$$\begin{aligned} U(R) &= \frac{Z_1 Z_2}{R} - \int \left(\frac{Z_1}{r_1} + \frac{Z_2}{r_2} \right) \rho(\mathbf{r}) d^3 r + \\ &+ \frac{1}{2} \iint \frac{\rho(\mathbf{r}) \rho(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} d^3 r d^3 r' + \frac{3}{10} (3\pi^2)^{2/3} \int \rho(\mathbf{r})^{5/3} d^3 r - \\ &- \frac{3}{4} \left(\frac{3}{\pi} \right)^{1/3} \int \rho(\mathbf{r})^{4/3} d^3 r, \end{aligned} \quad (2.7)$$

где $\rho(\mathbf{r})$ — плотность электронов в точке \mathbf{r} координатного пространства, $Z_{1,2}$ — заряды ядер, $r_{1,2}$ — расстояния от точки \mathbf{r} до ядер, R — межъядерное расстояние. Формула (2.7) отвечает теории ТФД, а без последнего (обменного) члена — ТФ. Доказательство того, что экстремум функционала $U(R)$ по $\rho(\mathbf{r})$ обеспечивает минимум энергии системы для приближения ТФ получено в [23], а для ТФД — в [24]. В этих двух случаях, минимизируя $U(R)$ по отношению к $\rho(\mathbf{r})$, получаем известные соотношения между плотностью и электрическим потенциалом $V_c(\mathbf{r})$ системы [22]:

$$\rho_{\text{ТФ}} = \frac{2^{3/2}}{3\pi^2} (V_c - V_0)^{3/2}, \quad (2.8)$$

$$\rho_{\text{ТФД}} = \frac{2^{3/2}}{3\pi^2} [(V_c - V_0 + \tau_0^2)^{1/2} + \tau_0]^3, \quad (2.9)$$

где V_0 — химический потенциал, $\tau_0 = 1/\sqrt{2\pi}$. Потенциал $V_c(R)$ удовлетворяет уравнению Пуассона для плотностей заряда (2.8), (2.9):

$$\Delta V_c = 4\pi\rho - 4\pi[Z_1\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_1) + Z_2\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_2)]. \quad (2.10)$$

Подставляя (2.8) и (2.9) в (2.10), получим стандартные уравнения ТФ и ТФД для молекул. При подстановке в (2.7) приближенных значений плотности ρ , очевидно, получаемое значение $U(R)$ является верхней границей энергии. В случае нейтральной двухатомной системы в приближении ТФ Фирсовым [23] получен также максимизирующий функционал $U_1(R)$, используя который, для улучшенной оценки энергии системы с приближенной плотностью ρ можно брать полусумму $[U(R) + U_1(R)]/2$. В теории ТФД, насколько известно, корректной формы максимизирующего функционала до сих пор не найдено, а для ион-атомных систем — даже и в теории ТФ.

Авторы [325] рассмотрели модификацию уравнения ТФ, заменяя $\rho^{5/3}$ в (2.7) на $\alpha(N)\rho^{4/3}/r$, где N — число электронов. Фирсовым [25] показано, что в пределах точности модели ТФД можно разложить плотность (2.9) по малому параметру τ_0^2 , ограничившись двумя членами. Тогда с учетом (2.9), (2.10) модифицированное уравнение ТФД запишется в виде

$$\begin{aligned} \Delta V_c &= 0,81 V_c + 1,2 V_c^{3/2} - \\ &- 4\pi[Z_1\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_1) + Z_2\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_2)]. \end{aligned} \quad (2.11)$$

Заметим, что хотя уравнение (2.11) в случае нейтральных систем более удобно для расчетов, чем стандартное уравнение ТФД (поскольку не приводит к конечному

радиусу молекулы), при переходе к системе ион–атом это преимущество утрачивается.

Попытки численного интегрирования общих уравнений ТФ и ТФД для молекул до сих пор немногочисленны. Для гомоядерных пар известны классические работы [26–28], в которых решалось уравнение ТФ. Системы Ne–Ne, He–Ag и Mg–O рассматривались в [29], а в [30] решалось уравнение ТФД. Расчет ПВ гомоатомной пары с применением максимального и минимального принципов модели ТФ в рамках вариационного метода был сделан в работе [31].

Из (2.7) видно, что если $Z_1 = Z_2$, а плотности ρ получены из решения уравнения ТФ, то энергия системы может быть записана в универсальной форме

$$U(Z, R) = Z^{7/3} \left[\frac{1}{RZ^{1/3}} + f_1(RZ^{1/3}) + Z^{-2/3} f_2(RZ^{1/3}) \right], \quad (2.12)$$

где последнее слагаемое представляет вклад обменной энергии, вычисленной при $\rho = \rho_{\text{ТФ}}$ как малое возмущение, $f_1(x)$ и $f_2(x)$ — известные функции.

В работе [32] показано, что добавление к функционалу (2.7) поправки на неоднородность Киржница [33]

$$\Delta U_K = \frac{1}{72} \int \frac{(\nabla \rho)^2}{\rho} d^3 \mathbf{r} \quad (2.13)$$

приводит к увеличению обменной энергии в (2.12) на 2/9 прежнего значения (при этом ΔU_K тоже рассматривается как малая поправка). Действительно, полагая в (2.8) $V_0 = 0$ (для нейтральной системы одинаковых атомов), с учетом (2.8), (2.10) и формулы Грина можно преобразовать (2.13) следующим образом:

$$\begin{aligned} \Delta U_K &= \frac{\sqrt{2}}{24\pi^2} \int (\nabla V_e^{1/2}) \nabla V_e d^3 \mathbf{r} = -\frac{2}{9\pi^3} \int V_e^2 d^3 \mathbf{r} = \\ &= -\frac{2}{9} \frac{3}{4} \left(\frac{3}{\pi} \right)^{1/3} \int \rho^{4/3} d^3 \mathbf{r}, \end{aligned} \quad (2.14)$$

что и доказывает данное утверждение. Таким образом, учет неоднородности электронного газа уменьшает энергию двухатомной системы, в то время как для одного атома ситуация противоположная. Этот вывод следует и непосредственно из анализа (2.13), если учесть, что в области между ядрами градиент плотности электронов становится меньше.

В [32] получена также поправка к энергии, аналогичная известной поправке Скотта [34] для атома, учитывающая вклад сильносвязанных электронов:

$$\Delta U_q(R, Z) = Z^2 f_3(RZ). \quad (2.15)$$

Функция $f_3(x)$ изменяется в пределах 1–2 и табулирована в [32]. В табл. 1 дается сравнение ПВ системы N–N, вычисленного на основе работы [32], с результатом расчета методом ССП [35], а также с результатом вариационного расчета [31] для полусуммы верхней и нижней оценок энергии по теории ТФ. В последнем случае использовано масштабное соотношение модели ТФ и интерполяция результатов [31] для необходимых значений R . Результаты, представленные в табл. 1, показывают, что учет поправок (2.14), (2.15), вычисленных несамосогласованным образом [32], приводит к

Таблица 1. Потенциал взаимодействия N–N

R , ат. ед.	Z^2/R	$V(R)$, ат. ед.		
		[31]	[32]	[35]
0,2	245	140	129,2	132,6
0,5	98	28	21,4	24,8
1,0	49	6,8	–0,8	4,1
1,5	32,7	2,25	–4,8	0,2
2,0	24,5	1,0	–6,0	–0,4
3,0	16,35	0,29	–6,65	–0,05

сильно заниженным значениям ПВ при $R > 1$. Потенциал [31], отвечающий теории ТФ, напротив, слишком медленно убывает с ростом R . Вероятно, эти выводы останутся в силе и при рассмотрении ПВ пары одинаковых положительных ионов, для которого получена универсальная функция от N и N/Z (N — число электронов) в [36]. В целом можно сказать, что теория ТФД в классической трактовке к осязательным результатам в вычислении потенциалов взаимодействия пока не пришла.

2.3. Приближение электронного газа

Существенное улучшение результатов вычисления ПВ достигнуто путем замены электронной плотности в (2.7) на сумму плотностей электронов изолированных атомов, которые, однако, берутся из расчета методом ССП [37–40, 51, 282]. Несколько ранее такие же расчеты проводились с плотностями ТФД [41, 42]. Кроме того, в работах [38–40, 51] в функционал энергии добавлен вклад корреляционной энергии электронного газа. На единицу объема соответствующая величина аппроксимирована выражением $r_s = (3/4\pi\rho)^{1/3}$ [38]

$$\begin{aligned} g_{\text{кор}}(\rho) &= \\ &= \begin{cases} (-0,048 - 0,01r_s + \ln r_s(0,0311 + 0,009r_s))\rho, & r_s < 0,7, \\ (0,07064 + 0,00633 \ln \rho)\rho, & 0,7 \leq r_s \leq 10, \\ (-0,438r_s^{-1} + 1,325r_s^{-3/2} - 1,47r_s^{-2} - 0,4r_s^{-5/2})\rho, & r_s > 10. \end{cases} \end{aligned} \quad (2.16)$$

Кроме предположения об аддитивности атомные плотности электронов считаются сферически-симметричными, что позволяет провести интегрирование по всем угловым переменным в (2.7). Результирующий ПВ удобно разбить на несколько членов:

$$V(R) = V_K(R) + V_{\text{кин}}(R) + V_{\text{об}}(R) + V_{\text{кор}}(R), \quad (2.17)$$

где отдельные слагаемые соответствуют вкладам кулоновской, кинетической, обменной и корреляционной энергий. Формулу для $V_K(R)$ целесообразно записать в виде, учитывающем произвольные степени ионизации взаимодействующих частиц [22, 43] ($q_i = 1 - N_i/Z_i$, $i = 1, 2$):

$$\begin{aligned} V_K(R) &= \frac{q_1 q_2 Z_1 Z_2}{R} + \frac{1}{2} Z_1 (1 + q_1) G_2(R) + \\ &+ \frac{1}{2} Z_2 (1 + q_2) G_1(R) - \frac{1}{2} \int [G_1(r_1) \rho_2(r_2) + \\ &+ G_2(r_2) \rho_1(r_1)] d^3 \mathbf{r}, \end{aligned} \quad (2.18)$$

где функция $G_i(r_i)$ связана с электрическим потенциалом электронов $V_{ei}(r_i)$ соотношением

$$G_i(r) = \frac{N_i}{r} + V_{ei}(r). \quad (2.19)$$

В случае сферической симметрии $\rho_i(r)$ потенциалы $V_{ei}(r)$ приводятся к однократным интегралам:

$$\begin{aligned} V_{ei}(r) &= - \int \frac{\rho_i(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} d^3r' = \\ &= - \frac{4\pi}{r} \int_0^r r'^2 \rho_i(r') dr' - 4\pi \int_r^\infty r' \rho_i(r') dr'. \end{aligned} \quad (2.20)$$

Формулы (2.18)–(2.20) особенно удобны тогда, когда интегрирование в (2.20) можно выполнить аналитически. При численном задании плотностей для $V_K(R)$ целесообразно применять формулу, объединяющую все вклады в один двойной интеграл [38]:

$$V_K(R) = (4\pi)^2 \int_0^\infty r_1^2 dr_1 \int_0^\infty r_2^2 dr_2 \rho_1(r_1) \rho_2(r_2) I(R, r_1, r_2), \quad (2.21)$$

где функция $I(R, r_1, r_2)$ вычислена отдельно для гомо-, гетероатомных и ионных пар. В гетероатомном случае, в частности, получено [38]

$$\begin{aligned} I(R, r_1, r_2) &= \frac{1}{R} - \frac{2}{|R - r_1| + R + r_1} - \\ &- \frac{2}{|R - r_2| + R + r_2} + F(R, r_1, r_2), \end{aligned} \quad (2.22)$$

$$\begin{aligned} F(R, r_1, r_2) &= \\ &= \begin{cases} \frac{2}{|R - r_1| + R + r_1}, & r_2 < |R - r_1|, \\ \frac{1}{2} \left(\frac{1}{r_1} + \frac{1}{r_2} \right) - \frac{R}{4r_1 r_2} - \frac{(r_1 - r_2)^2}{4Rr_1 r_2}, & |R - r_1| < r_2 < R + r_1, \\ \frac{1}{r_2}, & r_2 > R + r_1. \end{cases} \end{aligned} \quad (2.23)$$

В аналитическом виде интеграл (2.21) вычисляется на классе гауссовых или слейтеровских орбиталей, остальные же слагаемые (2.17) находятся численно. Все они представляются в однотипном виде

$$J = \int [g_t(\rho_1 + \rho_2) - g_t(\rho_1) - g_t(\rho_2)] d^3\mathbf{r} \quad (2.24)$$

и вычисляются с использованием эллипсоидальной системы координат, $g_t(\rho)$ — плотность соответствующей энергии электронного газа. В работе [43] показано, что для степенной формы $g_t(\rho)$ все вклады в потенциал вычисляются в элементарных функциях, если плотность электронов аппроксимируется в кусочно экспоненциальном виде [44]:

$$\rho(r) = \sum_{i=1}^N A_i \exp(-a_i r) [\theta(r - r_{i-1}) - \theta(r - r_i)], \quad (2.25)$$

где A_i и a_i — параметры, r_{i-1} , r_i — радиусы "подоболочек", $\theta(x)$ — единичная ступенчатая функция, N — число

"подоболочек". В работе [44] установлено, что логарифм атомной плотности электронов, отвечающей методу ССП, в пределах оболочек изменяется почти линейным образом, поэтому в самой простой форме сумма (2.25) может состоять всего из нескольких слагаемых. Такая модель разрабатывалась в [45, 46], а в [47] приведены таблицы параметров для атомов и ионов с $2 < Z \leq 54$. В расчетах учтены значения чисел заполнения и радиусов "подоболочек" атомов, рассчитанные методом ССП. На рис. 1 показана радиальная плотность электронов атома Ar, отвечающая (2.25) при $N = 3$ [47], а также распределения ТФД и Хартри–Фока. Как видно на рисунке, даже при малых N удается достаточно хорошо аппроксимировать оболочечную структуру. При необходимости можно улучшить точность, согласуя (2.25) с узлами таблично заданных плотностей. В твердых телах целесообразно учитывать влияние химических связей на электронные распределения. По этому поводу см., например, [326].

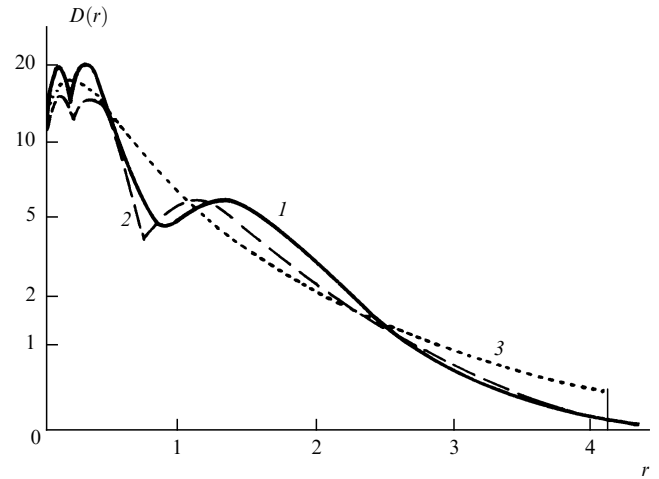


Рис. 1. Радиальное распределение плотности электронов атома Ar $D(r) = 4\pi r^2 \rho(r)$: 1 — Хартри–Фока, 2 — формула (2.25), 3 — ТФД

Вычисление интеграла (2.24) в [43] проводится разбиением пространства на области $\rho_1 > \rho_2$ и $\rho_2 > \rho_1$ с последующим разложением подынтегральных функций в ряд. Полученные формулы для ПВ приведены в [43, 46] и имеют достаточно компактный для вычислений вид. Это позволяет значительно сократить время расчета потенциала и устраняет необходимость интерполяции таблично заданных плотностей. Кроме того, приведенные в [47] таблицы можно применять для расчета потенциалов в системе ион–атом, для которых нет квантовомеханических плотностей электронов.

В работе [48] ПВ выражен через производную функции экранирования:

$$\frac{d\Phi}{dr} = \frac{1}{Z_1 Z_2} \frac{d}{dr} [rV(r)]. \quad (2.26)$$

С учетом (2.18), (2.24) функция $\Phi'(r)$ приведена к однократному интегралу [48], а ПВ находится по формуле

$$V(R) = \frac{Z_1 Z_2}{R} \left(1 + \int_0^R \Phi'(r) dr \right). \quad (2.27)$$

Расчеты потенциалов по методу [38] для большого числа атом-атомных пар проводились в работах [49, 50]. Для удобства последующих применений эти результаты аппроксимированы универсальной функцией экранирования, полученной усреднением всех рассчитанных потенциалов [49]:

$$\Phi\left(\frac{R}{a}\right) = \sum_{i=1}^3 c_i \exp\left(-b_i \frac{R}{a}\right), \quad (2.28)$$

$$a = 0,8853(Z_1^{1/2} + Z_2^{1/2})^{-2/3}. \quad (2.29)$$

В работах [50] получена аппроксимация $\Phi(x)$ четырьмя экспонентами, а параметр экранирования модифицирован в виде

$$a = 0,8853(Z_1^{0,23} + Z_2^{0,23}). \quad (2.30)$$

Вклад обменно-корреляционной энергии в [50a] вычислен отдельно и представлен формулой $Z = \max(Z_1, Z_2)$

$$\Phi_{\text{об-кор}}(x) = -0,07Z^{-2/3} \exp(-0,235x^{-2} - 0,0738x + 0,0178x^2). \quad (2.31)$$

В табл. 2 проводится сравнение потенциалов Ag–Ag, вычисленных по формулам (2.28)–(2.31), с соответствующими результатами расчетов в [38, 44]. Как и следовало ожидать, потенциалы [38, 44] хорошо согласуются между собой, однако заметно отличаются от "средних" ПВ [49, 50], имеющих большой разброс. Еще большие расхождения получаются для систем ион–атом (см. рис. 2 для потенциала $\text{Li}^+ - \text{Ne}$). Заметим, что учет обменной энергии с помощью функции экранирования (2.31) для потенциала Ag–Ag приводит к совсем плохим результатам, и уже при $R = 3$ потенциал становится отрицательным. Модель электронного газа успешно предсказывает также ход потенциальных кривых вблизи минимума. Это подтверждается данными табл. 3.

Таблица 2. Потенциал взаимодействия Ag–Ag

R , ат. ед.	$V(R)$, ат. ед.				
	[38]	[43]	[50a]*	[49]*	[50b]*
1	24,6	24,7	25,5	17,5	20,1
2	2,30	2,35	2,91	1,85	1,84
3	0,395	0,39	0,69	0,351	0,345
4	0,0758	0,076	0,206	0,088	0,0638

* Данные в этих столбцах не учитывают вклад обменной энергии (2.31).

В работе [52] сделан учет релятивистских поправок, связанных с изменением атомных электронных плотностей и модификацией выражения для кинетической энергии (в случае системы Hg–Hg). Соответствующие данные приведены в табл. 3. Эти результаты показывают, что для тяжелых атомов учет релятивистских поправок становится необходимым. В связи с этим заметим, что расчеты потенциала, сделанные в работе [50b] без учета этих факторов, не являются корректными. В этом случае не ясно также, какими волновыми функциями электронов атома U пользовались авторы, применяя метод [38]. Ссылка на расчет потенциала из работы [38] некорректна, поскольку в ней он не проводился.

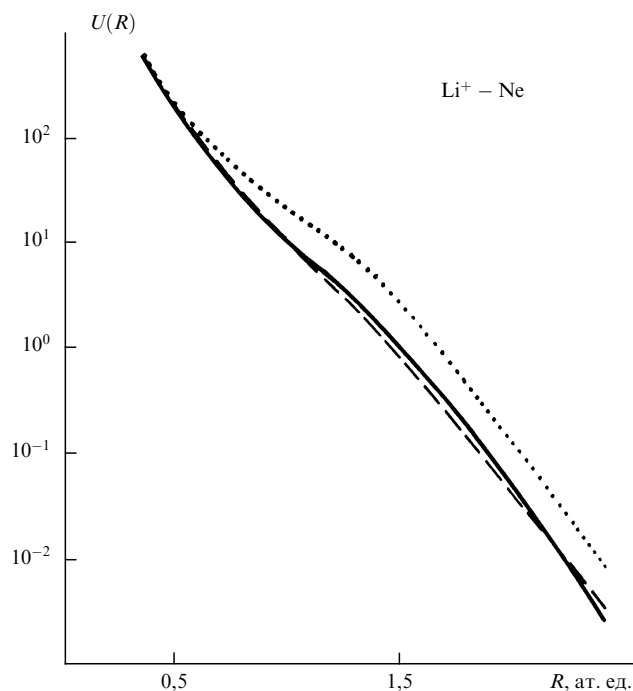


Рис. 2. Потенциал взаимодействия $\text{Li}^+ - \text{Ne}$: сплошная линия — [38], штриховая — [43], пунктирная — [49]

Таблица 3. Параметры двухатомных молекул

Молекула	Энергия связи, 10^{-14} эрг		Равновесное расстояние, Å	
	1	2	1	2
Ne–Ne	0,56	0,63	2,99	3,03
Ar–Ar	1,75	1,95	3,63	3,70
Kr–Kr	2,48	2,73	3,89	3,95
Ne–Ar	0,785	0,93	3,42	3,51
Ar–Kr	2,03	2,37	3,78	3,80
$\text{Na}^+ - \text{Cl}^-$	852	896	2,34	2,36
$\text{K}^+ - \text{Cl}^-$	798	800	2,56	2,66
Hg–Hg	5,58	12,2	4,12	4,19

Примечание: 1 — расчет [38]; 2 — экспериментальные данные, приведенные в [38]; для Hg–Hg (последняя строка) данные взяты из [52] (в этом случае 1 и 2 — расчеты в нерелятивистском и релятивистском приближениях)

Как следует из данных табл. 3, для легких систем энергия связи молекул инертных газов по сравнению с экспериментом занижена на 10–15%. В связи с этим возникает мысль о возможности "улучшения" результатов расчета ПВ введением в функционал (2.7) поправки Киржница (2.13). Однако учет ее вызывает драматическое ухудшение потенциалов, поскольку, как вытекает из раздела 2.2, поправка на неоднородность составит примерно $2/9U_{\text{об}}$, а по величине и знаку близка к $U_{\text{кор}}$. Учет аналогичной поправки четвертого порядка тоже дает отрицательный вклад, в результате чего значения энергии связи возрастут в 1,5–3 раза и значительно превысят экспериментальные. Некоторое качественное оправдание этому результату следует из уменьшения степени неоднородности электронного газа в молекулярной системе, следовательно, соответствующие поправки не столь необходимы, как в случае атомов, когда их учет

приводил к согласию вычисленных энергий с методом ССП на уровне долей процента [53, 54].

2.4. Правила комбинирования потенциалов

Отыскание комбинационных соотношений для потенциалов мотивируется тем, что их установление избавило бы от необходимости расчета потенциалов в гетероатомных парах, резко уменьшая таким образом вычислительную работу. В связи с этим комбинационные соотношения рассматривались уже в ранних работах, посвященных систематическому изучению потенциалов [55]. Наиболее просты правила арифметического и геометрического усреднения:

$$V_{AB}(R) = \frac{1}{2} [V_{AA}(R) + V_{BB}(R)], \quad (2.32)$$

$$V_{AB}(R) = \sqrt{V_{AA}(R)V_{BB}(R)}, \quad (2.33)$$

где $V_{AA}(R)$, $V_{BB}(R)$, $V_{AB}(R)$ — соответствующие ПВ гомо- и гетероатомных комбинаций. Проверка соотношений (2.32), (2.33) с использованием известных теоретических и эмпирических потенциалов проводилась в [56, 57]. Правила комбинирования дальнедействующих потенциалов обсуждались в [58, 59, 76, 77], а в [60–62] — для суммы коротко- и дальнедействующих потенциалов. В работе [57] формула (2.32) модернизирована с учетом различия размеров взаимодействующих частиц:

$$V_{AB}(R) = \frac{1}{2} [V_{AA}(2r_A) + V_{BB}(2(R - r_A))], \quad (2.34)$$

где радиус атома А определяется из условия экстремальности

$$\frac{\partial V_{AB}(r_A, R)}{\partial r_A} = 0. \quad (2.35)$$

Вычисления, проведенные в [57] по формуле (2.34) с применением потенциала Хартри–Фока для инертных газов, показали, что она лучше согласуется с точными значениями ПВ, чем соотношения (2.32), (2.33). Более детальный анализ этих зависимостей проведен в [63], где предложено еще одно комбинационное правило:

$$V_{AB}(R) = \frac{1}{2} \left[V_{AA} \left(\frac{2r_A R}{r_A + r_B} \right) + V_{BB} \left(\frac{2r_B R}{r_A + r_B} \right) \right], \quad (2.36)$$

причем $r_{A,B}$ — радиусы атомов по Полингу [64]. Сопоставление комбинационных формул (2.32)–(2.36) сделано с использованием ПВ, вычисленных методом электронного газа [63]. На рис. 3 приведены результаты такого расчета для системы $\text{Na}^+ - \text{Cl}^-$, из которого следует, что формула (2.36) более предпочтительна. Примерно такие же результаты получены и для других пар ионов с большими различиями радиусов [63]. При $r_A \approx r_B$, напротив, все комбинационные соотношения приводят к близким результатам.

Вероятно, заслуживает внимания метод отдельного комбинирования отдельных знакопостоянных членов потенциала (2.17), поскольку даже в существующей форме комбинационные правила оказываются применимы не только в области отталкивания, но и (и даже в большей степени) в области притяжения. Тогда, очевидно, первое слагаемое (см. (2.18)) комбинирования не требует, а следующие за ним, а также потенциалы $V_{\text{кин}}(R)$, $V_{\text{об}}(R)$, $V_{\text{кор}}(R)$ в (2.17) можно рассмотреть порознь, как имеющие разные знаки. Среди работ

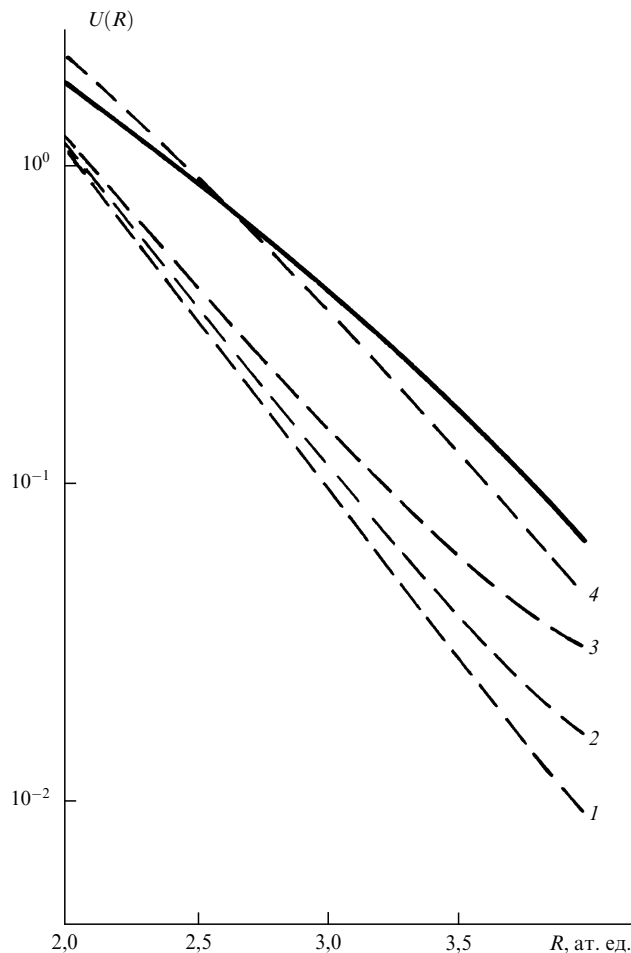


Рис. 3. Потенциал взаимодействия $\text{Na}^+ - \text{Cl}^-$, вычисленный с применением комбинационных правил: сплошная линия — точный расчет (модель электронного газа), 1 — (2.33), 2 — (2.34), 3 — (2.32), 4 — (2.36)

последнего времени следует отметить в первую очередь [77, 103], в которых предложены новые эвристические соотношения, связывающие ПВ с электронными плотностями взаимодействующих атомов [77] и с силами отталкивания [103]. В [334] для части ПВ, соответствующей отталкиванию, предложено универсальное соотношение вида $V(R) = r_0 V^*(R/\rho)$, где $V^*(x)$ — универсальная функция, r_0 и ρ — параметры, соответствующие данной атомной паре. В [334] использована обширная информация о ПВ, полученная из измерений подвижностей атомов и ионов в газах (см. также [297] и соответствующую литературу). В целом, несмотря на устойчивый интерес, проблема обоснования правил комбинирования, пригодных для широкого интервала межъядерных расстояний и произвольных сочетаний атомов, еще далека от решения.

2.5. Аналитические аппроксимации

В практических расчетах по радиационной физике наиболее часто применяются отталкивательные потенциалы в виде, предложенном впервые Фирсовым [65]:

$$V(R) = \frac{Z_1 Z_2}{R} \Phi \left(\frac{R}{a} \right), \quad (2.37)$$

где $\Phi(x)$ — функция экранирования, а параметр (длина экранирования) a определяется формулой (2.29). Осно-

вываясь на двухсторонних вариационных принципах теории ТФ (см. раздел 2.2), Фирсов показал, что в пределах точности модели ТФ функция $\Phi(x)$ совпадает с решением уравнения ТФ для изолированного атома. В силу медленного убывания $\Phi(x)$ для больших R потенциал (2.37) пригоден лишь при $R < 2$ ат. ед. Уточнение хода потенциальной кривой при $R > 2$ достигается применением экспоненциальной аппроксимации типа (2.28). Впервые коэффициенты этой аппроксимации рассчитывались в работе Мольер [66], а соответствующий потенциал (2.37) получил название потенциала Фирсова–Мольер. В расчетах часто применяется также другое выражение для параметра экранирования, предложенное Линдхардом [67]:

$$a = 0,8853(Z_1^{2/3} + Z_2^{2/3})^{-0,5}. \quad (2.38)$$

Аналогичные (2.28) аппроксимации на основе вариационного решения уравнения ТФ получены в работах [68,69], в которых функция $\Phi(x)$ представлена в виде

$$\Phi(x) = (a \exp(-\alpha x) + b \exp(-\beta x) + c \exp(-\gamma x))^2. \quad (2.39)$$

Формула (2.39) удобна в тех случаях, когда приходится вычислять полуполые степени $\Phi^{n+1/2}$. Параметры формул (2.28), (2.39), соответствующие результатам разных авторов [49, 50, 68–70], приведены в табл. 4.

Параметры двухэкспоненциальной аппроксимации [72], как отмечается авторами, пригодны для легких атомов с $Z < 18$. Расчеты ПВ атомов инертных газов по формулам (2.37), (2.39) показали [69], что аппроксимация (2.39) при $c = 0$ лучше согласуется с экспериментальными значениями потенциалов при $Z < 18$, тогда как полная формула (2.39) предпочтительнее для $Z > 18$. Этот результат, а также аналогичные выводы работы [72] показывают, что средние функции экранирования [49, 50], хотя и получены на основе большого количества ПВ хорошего класса, не обеспечивают высокой точности вычисления потенциалов для произвольных атомных пар (см. также табл. 2).

Среди других часто применяемых аппроксимаций можно отметить формулы Ленца–Йенсена [22]:

$$\Phi(x) = (1 + 3,11x^{1/2} + 3,24x + 1,46x^{3/2} + 0,248x^2) \exp(-3,11\sqrt{x}), \quad (2.40)$$

Линдхарда [70]:

$$\Phi(x) = 1 - \left(1 + \frac{3}{x^2}\right)^{-1/2}, \quad (2.41)$$

Тайтца [71]:

$$\Phi(x) = \frac{1}{(1 + 0,5365x)^2}, \quad (2.42)$$

Фирсова [25]:

$$\Phi(x) = \frac{\sinh^2(\beta c)}{\sinh^2[\beta(c+x)]}, \quad c = 1,76(1 - 1,5\beta^2),$$

$$\beta^2 = 0,16Z^{-2/3}. \quad (2.43)$$

Формула (2.43) соответствует приближенному решению уравнения ТФД (2.11) для нейтрального атома. В работе [73] на основе формулы (2.37) и атомных потенциалов Хартри–Фока–Слейтера получена функция экранирования ПВ для гомоатомных пар в виде

$$\Phi(r) = \left\{ H \left[\exp\left(\alpha \frac{r}{r_s}\right) - 1 \right] + 1 \right\}^{-1}, \quad (2.44)$$

где $H = (4Z - 1)^{0,4} r_s$, $\alpha = 1$ при $Z \leq 10$ и $\alpha = 1,13$ при $Z > 10$, параметры r_s табулированы в зависимости от Z . Для гетероатомных пар в [74] предложена модификация параметров H, r_s следующего вида:

$$H = \left[\left(\sqrt{Z_1} + \sqrt{Z_2} \right)^2 - 1 \right]^{0,4} r'_s, \quad (2.45)$$

$$r'_s = \frac{r_s(Z_1) + r_s(Z_2)}{2},$$

где параметры $r_s(Z_{1,2})$ соответствуют отдельным атомам. Формулы (2.44), по сути дела, постулируют новые комбинационные правила, правомерность которых требует обоснования, поэтому, хотя аппроксимация (2.45) приближенно учитывает оболочечные эффекты, она вряд ли может обеспечить универсальное описание потенциалов и, в частности, эффектов Z_1 -осцилляций тормозных способностей (см. раздел 3.2 и [75]). Заметим также, что модельные потенциалы [73] подвергались критике в связи с некорректным асимптотическим ходом при $r \rightarrow \infty$ [29].

Полезные выражения для функции экранирования и плотности электронов иона с произвольной степенью ионизации получены путем сохранения коэффициентов экспоненциальной аппроксимации функции (2.28) при модификации параметра экранирования [107]:

$$a_* = 0,8853 N^{-1/3} \left(\frac{N}{Z} \right)^s, \quad (2.46)$$

Таблица 4. Параметры аппроксимаций функции экранирования

	[66]	[68]*	[69]*	[72]	[49]	[50a]	[50b]	[216]
c_1	0,1	0,72183	0,52495	1/3	0,0069	0,09	0,18175	0,4841
c_2	0,55	0,27817	0,43505	2/3	0,1669	0,61	0,50986	0,2829
c_3	0,35	—	0,04	—	0,8262	0,30	0,2802	0,1589
c	—	—	—	—	—	—	0,02817	0,0741
b_1	6,0	0,17826	0,12062	0,854	0,1318	0,19	3,20	0,6573
b_2	1,2	1,75934	0,84795	0,492	0,3079	0,57	0,942	1,6224
b_3	0,30	—	6,7469	—	0,9168	2,0	0,429	0,2994
b	—	—	—	—	—	—	0,2016	4,4049

* Параметры c_i и b_i ($i = 1, 2, 3$) соответствуют a, b, c и α, β, γ в (2.39).

где s — неизвестный вариационный параметр, N — число электронов. Функция экранирования иона с учетом (2.46) записывается в виде

$$\Phi_{\text{и}}(r) = q + (1 - q) \Phi\left(\frac{r}{a_*}\right), \quad (2.47)$$

где $q = 1 - N/Z$ — степень ионизации, а $\Phi(x)$ определена формулой (2.28). Плотность электронов с учетом (2.47) и уравнения Пуассона равна

$$\rho_{\text{и}}(r) = \frac{N}{4\pi r a_*^2} \sum_{i=1}^3 c_i b_i^2 \exp\left(-\frac{b_i r}{a_*}\right). \quad (2.48)$$

Подставляя (2.48) в функционал (2.7) (без учета обменного члена) для энергии иона получим (в данном случае коэффициенты b_i, c_i соответствовали работе [68])

$$E_s(s) = -1,13\sqrt{\pi} N^{4/3} \left[0,911 \left(Z - \frac{N}{2} \right) \left(\frac{N}{Z} \right)^{-s} + 0,345 N \left(\frac{N}{Z} \right)^{-2s} - 0,325 N \left(\frac{N}{Z} \right)^{-s} \right].$$

Минимизируя $E_s(s)$ по параметру s , находим

$$s = \frac{\ln(1,167Z/N - 0,167)}{\ln(Z/N)}, \quad Z = N. \quad (2.49)$$

Зависимость $s(N/Z)$ показана на рис. 4.

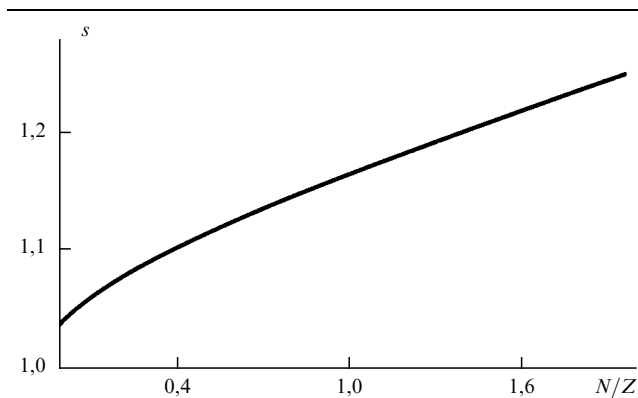


Рис. 4. Функция $s(N/Z)$, см. (2.49)

Ряд других аналитических аппроксимаций ПВ и функций экранирования нейтральных атомов можно найти в работах [321, 328–332]. Среди них, в первую очередь, следует отметить редко цитируемую в последнее время работу [321], содержащую достаточно простые аппроксимации Хартри–Фока электронных плотностей атомов при $1 < Z \leq 36$. Весьма полезным для приложений является ПВ [98]

$$V(R) = 0,45 Z_1 Z_2 \frac{a}{R^2},$$

используя который, авторы работ [316, 317] успешно описали характеристическое излучение Хе (M), индуцированное при каналировании ионов Хе в меди, а также вызванное этим дефектообразование.

2.6. Нестационарные теории

В последние годы развитие компьютерной техники позволило перейти к решению многочастичных задач физики атомных столкновений, основанных на решении

нестационарных уравнений Шрёдингера и Хартри–Фока [76–82, 279, 289]. Рассматриваемые системы, в основном, содержали малое число электронов (один–два), причем все расчеты основывались на приближении прямолинейных траекторий движущихся частиц. При такой постановке задачи проблема расчета ПВ остается в стороне и речь идет об описании временной эволюции электронной подсистемы. Системы с большим числом электронов изучались в рамках временной теории Томаса–Ферми (ВТФ), гидродинамический вариант которой известен уже давно [83, 84]. Так, в работах [85] получено численное решение уравнений ВТФ при рассеянии протонов на атомах аргона (для энергий протонов от 27,5 до 2500 кэВ). В этих случаях тоже использовалось приближение прямолинейных траекторий. Последнее обстоятельство, однако, принципиальной роли не играет. Согласно [86, 87], полную энергию системы можно записать в виде

$$E = \frac{1}{2} \int (\nabla \varphi)^2 \rho(\mathbf{r}, t) d^3 \mathbf{r} + \frac{1}{2} \iint \frac{\rho(\mathbf{r}, t) \rho(\mathbf{r}', t)}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} d^3 \mathbf{r} d^3 \mathbf{r}' + \int V(\mathbf{r}, t) \rho(\mathbf{r}, t) d^3 \mathbf{r} + \int G[\rho(\mathbf{r}, t)] d^3 \mathbf{r}, \quad (2.50)$$

где $V(\mathbf{r}, t)$ — потенциал ядер и внешних полей, функционал $G(\rho)$ включает сумму кинетической, обменной и корреляционной энергий электронного газа, а $\varphi(\mathbf{r}, t)$ — гидродинамический потенциал скоростей электронов. Гидродинамические уравнения получаются из (2.50) стандартным образом и имеют вид [86]

$$\frac{\partial \varphi}{\partial t} = \frac{1}{2} (\nabla \varphi)^2 + V(\mathbf{r}, t) + \int \frac{\rho(\mathbf{r}', t)}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} d^3 \mathbf{r}' + \frac{\delta G}{\delta \rho}, \quad (2.51)$$

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = -\nabla(\rho \nabla \varphi) \quad (2.52)$$

с дополнительным ограничением $\partial \varphi / \partial \mathbf{n} = 0$, где \mathbf{n} — нормаль к поверхности, ограничивающей объем системы. Если применить (2.50) к случаю атом-атомного рассеяния, то, очевидно, при известных $\rho(\mathbf{r}, t)$ и $\varphi(\mathbf{r}, t)$ за вычетом энергии изолированных частиц эта формула может рассматриваться как определение динамического межатомного потенциала. Практическое решение системы уравнений (2.51), (2.52) можно разбить на малые интервалы времени, в пределах которых траектории частиц являются прямолинейными, а затем, вычисляя $U(R, t)$ и решая уравнение динамики для ядер (на этих же временных промежутках), корректировать их положения и скорости для перехода к следующему временному шагу. Хотя в этом случае потенциал не может быть задан вне траектории, его вычисление остается важным этапом решения динамической задачи и, кроме того, несет информацию об энергетических потерях взаимодействующих частиц.

2.7. Зависящие от скорости (энергии) потенциалы взаимодействия

При скоростях ионов $v_1 \leq Z^{2/3}$, характеризующих средние скорости электронов в атоме ТФ, основная часть их все еще достаточно сильно связана с ядром. С другой стороны, исходя из формулы (2.50) нетрудно показать, что при малых изменениях плотности электронов (в отсутствие внешних полей) поправка к энергии появится лишь во втором порядке теории возмущений. Это

подтверждается, например, расчетами временной эволюции функции $\rho(\mathbf{r}, t)$ в системе Н–Аг [85, 86]. Сказанное позволяет предположить, что основной вклад в ПВ в динамическом режиме может быть вычислен в квазистатическом приближении электронного газа. Впервые на такую возможность развития теории было указано в работе [48], в которой сделаны соответствующие оценки ПВ для системы Н–Н. Основная идея заключается в выделении в потенциале (и модификации) вклада кинетической энергии (третий член в (2.7)). Очевидно, что при движении атомов с относительной скоростью v_1 сферы Ферми электронов сдвигаются на величину $p_0 = m_e v_1 = v_1$ (рис. 5), тогда как в статическом случае они были бы концентричными. В связи с этим изменение кинетической энергии произойдет лишь у тех электронов, которые оказались в перекрывающейся части ферми-распределений и в силу принципа запрета должны увеличить энергию, переместившись в свободные ячейки импульсного пространства. В качестве нового квазиравновесного распределения электронов в [48] принята сфера Ферми с центром, находящимся в центре масс системы, а приближенная оценка вклада кинетической энергии в ПВ имеет вид

$$V_{\text{кин}}(R, E_1) \approx V_{\text{кин}}(R) \exp(-0,004\varepsilon), \quad (2.53)$$

где $V_{\text{кин}}(R)$ — статическое значение, а ε — приведенная энергия, определяемая соотношением

$$\varepsilon = \frac{E_1 a M_2}{Z_1 Z_2 (M_1 + M_2)}. \quad (2.54)$$

В этой формуле E_1 — энергия налетающего атома с массой M_1 и атомным номером Z_1 (M_2 и Z_2 относятся к атому-мишени), a — параметр экранирования (2.29) или (2.38). В работах [88–92] эта модель была разработана более детально. В частности, было отмечено, что для атомов с большим числом электронов лишь малая их часть участвует в образовании квазимолекулярных орбиталей, локализованных на центре масс системы, остальные же остаются связанными со своими ядрами. Поэтому расчет изменения кинетической энергии нужно проводить иначе, совмещая центр нового квазиравновесного распределения с центрами исходных. Рассмотрим, следуя [89, 91], этот вопрос более детально.

Предположим, что каждый атом характеризуется однородным распределением плотности электронов

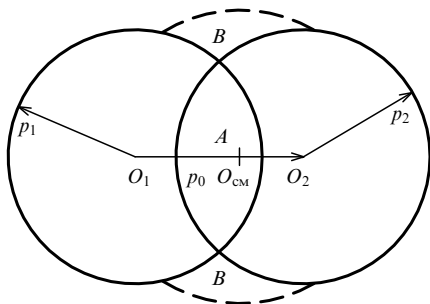


Рис. 5. Распределение электронов из элемента объема $d^3\mathbf{R}$ в импульсном пространстве (по работе [48]). При установлении квазиравновесного распределения с центром $O_{\text{см}}$ в центре масс половина электронов, занимавших область A , переходит в область B

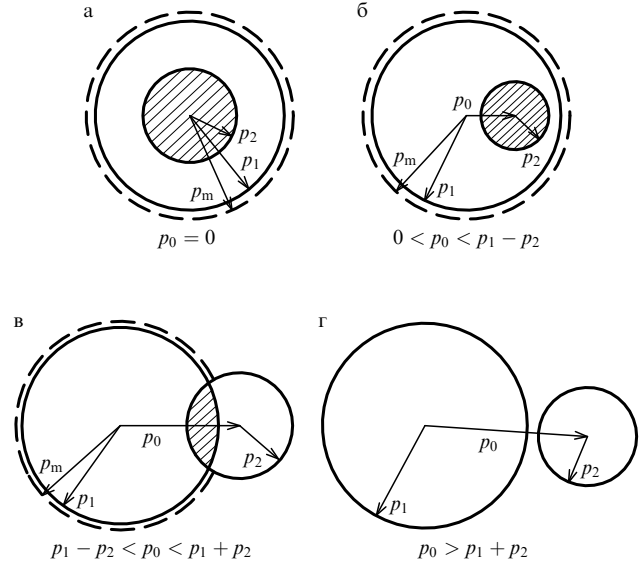


Рис. 6. То же, что на рис. 5 по работе [90]. Штриховыми линиями показаны квазиравновесные распределения электронов, первоначально занимавших заштрихованную область

$\rho_{1,2}$, принимая для определенности, что $\rho_1 > \rho_2$. Тогда в условиях квазиравновесия распределения электронов в импульсном пространстве представляют собой сферы Ферми с радиусами $p_i = (3\pi^2 \rho_i)^{1/3}$, так как в теории ТФ $\rho_i = p_i^3/3\pi^2$. Очевидно, что в задачах радиационной физики всегда можно считать один атом покоящимся, а другой — имеющим скорость v_1 . При $v_1 \neq 0$ возможны несколько случаев перекрывания ферми-распределений, показанные на рис. 6. Уже из этого рисунка ясно, что при $v_1 = p_0 > p_1 + p_2$ изменения кинетической энергии системы не происходит (это же касается обменной и корреляционной энергии), поэтому потенциал будет включать только кулоновскую часть (см. формулу (2.17)). При $p_0 < p_1 + p_2$ перекрывание изменяется от частичного до полного. Половина электронов, занимающих область перекрывания, должна занять ячейки с большими значениями импульсов. Новые квазиравновесные распределения показаны штриховыми линиями, а центры их совпадают с центром большей сферы в силу принципа минимума энергии. В случаях, соответствующих рис. 6а,б, новое значение "квазиравновесного" радиуса определяется по формуле

$$p_m = (p_1^3 + p_2^3)^{1/3}, \quad (2.56)$$

выражающей сохранение объема \mathbf{p} -пространства. В этих же случаях нетрудно найти и изменения кинетической и обменной энергии. Принимая объем перекрывания в координатном пространстве равным Ω , изменение кинетической энергии электронов, занявших сферу Ферми радиусом p_m , запишется в виде

$$V_{\text{кин}} = \frac{2\Omega}{(2\pi)^3} \left[\int_0^{p_m} \frac{p^2}{2} 4\pi p^2 dp - \int_0^{p_1} \frac{p^2}{2} 4\pi p^2 dp - \int_{D(p_2)} \frac{p'^2}{2} d^3 p' \right], \quad (2.57)$$

где $D(p_2)$ — объем области перекрывания \mathbf{p} -пространства. Два первых интеграла в (2.57) элементарны, а последний легко вычисляется в цилиндрических координатах с началом в центре меньшей сферы (см. рис. 7). Из рис. 7 видно, что этот интеграл представляется в виде

$$\int_{D(p_2)} \frac{p'^2}{2} d^3 p' = \pi \int_0^{p_2} dz \int_0^{\sqrt{p_2^2 - z^2}} r dr [2r^2 + (p_0 - z)^2 + (p_0 + z)^2] = \frac{2\pi}{3} p_0^2 p_2^3. \quad (2.58)$$

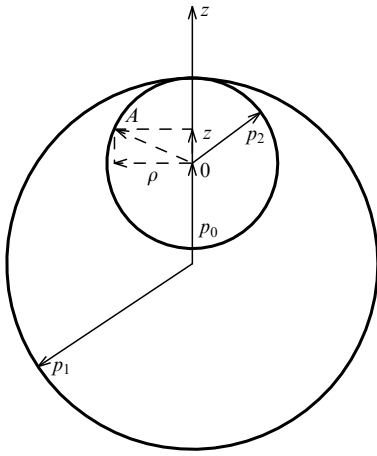


Рис. 7. Координатная система, используемая при вычислении интеграла (2.58)

Подставляя (2.58) в (2.57), получим

$$V_{\text{кин}} = \Omega \left(\frac{p_m^5}{10\pi^2} - \frac{p_1^5}{10\pi^2} - \frac{p_2^5}{10\pi^2} - \frac{p_0^2 p_2^3}{6\pi^2} \right). \quad (2.59)$$

Первые три слагаемых (2.59) соответствуют статическому результату, а последний равен кинетической энергии относительного движения тех электронов второго атома, что оказались в области Ω , поскольку $\rho_2 = p_2^3/3\pi^2$. Переходя от p_1 и p_2 к плотностям ρ_1 и ρ_2 , перепишем формулу (2.59) в виде

$$V_{\text{кин}} = \frac{3}{10} (3\pi^2)^{2/3} \Omega [(\rho_1 + \rho_2)^{5/3} - \rho_1^{5/3} - \rho_2^{5/3} - 0, 5v_1^2 \rho_2]. \quad (2.60)$$

Первый член (2.60) отражает аддитивность электронных плотностей в области перекрывания, являющуюся, очевидно, следствием принципа запрета и минимальности энергии.

При переходе к неоднородным распределениям электронов в атомах формула (2.60) должна рассматриваться как локальное соотношение в объеме $d^3 r$, в котором $\rho_1 > \rho_2$. Области $\rho_2 > \rho_1$ нужно учитывать точно таким же образом, делая замену $\rho_1 \leftrightarrow \rho_2$ в (2.60). Поэтому в окончательной форме вклад кинетической

энергии в потенциал запишется в виде

$$V_{\text{кин}}(R, v_1) = \frac{3}{10} (3\pi^2)^{2/3} \left\{ \int \left([\rho_1(r_1) + \rho_2(r_2)]^{5/3} - \rho_1(r_1)^{5/3} - \rho_2(r_2)^{5/3} - \frac{v_1^2}{2} \rho_2(r_2) \right) \times \right. \\ \times \theta(\rho_1 - \rho_2) d^3 \mathbf{r} + \int \left([\rho_1(r_1) + \rho_2(r_2)]^{5/3} - \rho_1(r_1)^{5/3} - \rho_2(r_2)^{5/3} - \frac{v_1^2}{2} \rho_1(r_1) \right) \times \\ \left. \times \theta(\rho_2 - \rho_1) d^3 \mathbf{r} \right\}. \quad (2.61)$$

Вклад обменной энергии вычисляется аналогично с учетом, что плотность ее в единице объема конфигурационного пространства равна $-p/\pi$. В итоге для случая, соответствующего рис. 6а,б, получим

$$V_{\text{об}} = -\Omega \left[\frac{p_m^4 - p_1^4}{4\pi^2} - \frac{1}{6\pi^3} \left(2p_0 p_2^3 + 0, 4 \frac{p_2^5}{p_0} \right) \theta(p_0 - p_2) - \right. \\ \left. - \frac{1}{6\pi^3} \left(\frac{3}{2} p_2^4 + p_2^2 p_0^2 - 0, 1 p_0^4 \right) \theta(p_2 - p_0) \right]. \quad (2.62)$$

При переходе от (2.62) к интегралу по объему, как и в (2.61), эту формулу нужно дополнить симметричными членами с заменой $p_1 \leftrightarrow p_2$, так как (2.62) относится только к области $\rho_1 > \rho_2$.

При неполном перекрывании ферми-сфер соответствующие формулы тоже элементарны, хотя и более громоздки [89, 91]. Кроме того, p_m находится из более сложного алгебраического уравнения. Поскольку в модели ТФ средняя скорость электронов равна $1,2 Z^{2/3}$, условие, при котором ПВ становится кулоновским, можно записать в виде

$$E_1 > E_{\text{кр}} = 0,036 A_1 (Z_1^{2/3} + Z_2^{2/3})^2 \text{ МэВ}, \quad (2.63)$$

где A_1 — массовое число налетающего атома. Так, например, для столкновений Ar–Ar получим $E = 290$ МэВ. На рис. 8 показаны результаты расчета

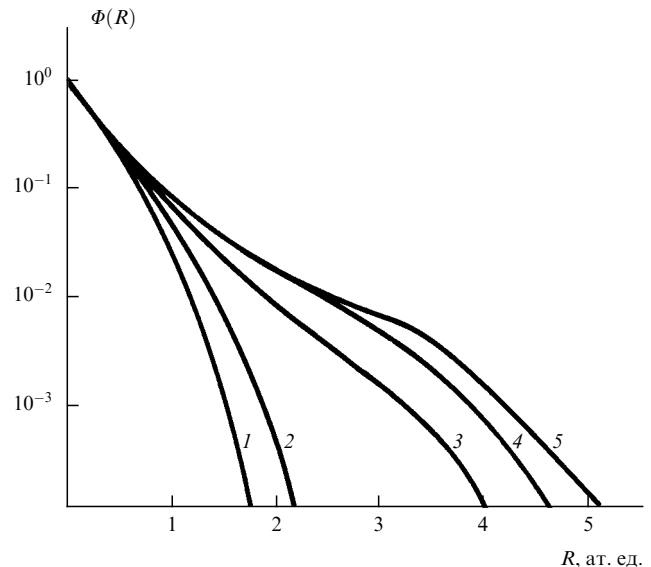


Рис. 8. Зависимость функции экранирования ПВ Ar–Ar [90б] от E : 1 — $E = \infty$, 2 — $E = 10$ МэВ, 3 — $E = 1$ МэВ, 4 — $E = 0,1$ МэВ, 5 — $E = 0$

функции экранирования потенциала Ag–Ag, выполненные при различных энергиях E . Плотности электронов атомов соответствовали модели ТФ в аппроксимации [68]. Кинетическая энергия вычислялась по формуле (2.61). Из рисунка видно, что динамический эффект появляется уже при $E_1 = 1$ МэВ и наиболее заметен в области средних и больших межъядерных расстояний. Заметим, что формула (2.61) несколько завышает величину $V_{\text{кин}}$, поскольку отвечает полному перекрыванию ферми-сфер. Корректировка ее достигается тем, что члены, зависящие от p_2 в формулах (2.59) и (2.56), берутся с коэффициентом $1/2$ (аналогично и в формуле (2.62)).

Изменение вклада обменной энергии в общий потенциал не так заметно и, как показывает расчет, состоит в дополнительном увеличении ПВ. Если p_0 не слишком мало, то определяющую роль играет второй член в формуле (2.62), а при малых p_0 и больших межъядерных расстояниях — первое и третье слагаемые.

Рассмотренная теория относится к случаю слабой ионизации первой частицы. При движении в среде со скоростями $\sim Z^{2/3}$ значительная часть оболочки атома обдирается уже на малых глубинах, поэтому расчет ПВ должен учитывать реальную степень ионизации, возрастающую с увеличением скорости. Учет этого фактора сделан в [91]. При этом предполагалось, что степень ионизации соответствует равновесному заряду, приобретаемому ионом в веществе. На рис. 9 показаны результаты расчета ПВ гомоядерных пар при различных скоростях. Отдельно представлены вклады кинетической и кулоновской энергий (рис. 9а, б) и суммарный потенциал (рис. 9в). Степень ионизации с учетом (2.28) равна

$$q = 1 - \frac{N}{Z} = 1 - \frac{1}{Z} \int_0^{R_1} 4\pi r^2 \rho_1(r_1) dr = \sum_{i=1}^3 c_i (1 + b_i x_0) \exp(-b_i x_0), \quad (2.64)$$

где $x_0 = 1, 13R_1 Z^{2/3}$, а R_1 находится из уравнения

$$\rho_1(R_1) = \frac{v_1^3}{3\pi^2}. \quad (2.65)$$

Формулы (2.64), (2.65) соответствуют известному критерию "обдирки" Бора, а коэффициенты c_i и b_i — работе [68]. Из рис. 9 следует, что динамическое уменьшение ПВ наблюдается при всех R , если $x_0 > 3$, что соответствует $q < 2/3$. Эффект наиболее заметен при $x > 6$. Рост потенциала при $x < 6$ обусловлен оголением электронной оболочки иона и увеличением кулоновского взаимодействия. Сравнение с расчетом ПВ для нейтральных атомов (см. рис. 8) показывает, что в последнем случае эффект уменьшения потенциала выражен гораздо сильнее и наблюдается при всех R . При $R \rightarrow 0$ динамические эффекты незначительны, поскольку все потенциалы близки к $Z_1 Z_2 / R$. При $R > 2R_1$ формула (2.61) может быть записана в более простом виде:

$$V_{\text{кин}}(R, v_1) = V_{\text{кин}}^{\text{ст}}(R) - 0,5 v_1^2 \tilde{N}_2, \quad (2.66)$$

где $V_{\text{кин}}^{\text{ст}}$ — статическое значение потенциала, а \tilde{N}_2 — число электронов атома-мишени, попадающих внутрь

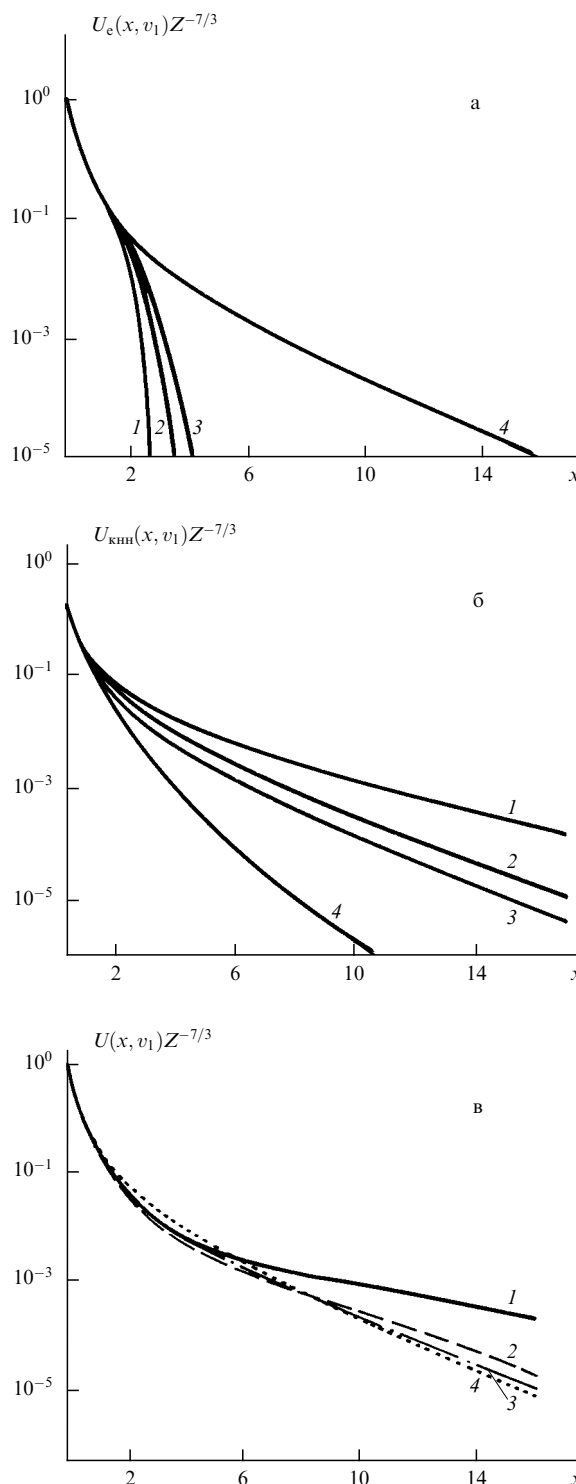


Рис. 9. Универсальные ПВ ион–атом гомоядерных пар в квазистатическом приближении ТФ с учетом степени ионизации [90в]. "Приведенный радиус" x_0 иона связан со скоростью движения соотношением (2.65): а — вклад электростатического взаимодействия; б — вклад кинетической энергии; в — суммарный ПВ ($x = 1, 13Z^{1/3}R$); 1 — $x_0 = \infty$, 2 — $x_0 = 5$, 3 — $x_0 = 3$, 4 — $x_0 = 2$

электронного облака иона (имеющего радиус R_1). Таким образом, в этом случае динамическая поправка пропорциональна кинетической энергии частицы. Этот результат не является неожиданным: пропорциональная энергии поправка к дальнедействующему потенциалу взаимодействия электрона с атомом водорода была

получена в работе [93], а еще раньше аналогичный результат найден Гамбошем [22] в рамках статистической электронной теории и, по сути говоря, лежит в основе теории псевдопотенциалов. Таким образом, формулу (2.66) можно рассматривать как обобщение этих результатов для ион-атомного потенциала.

В работах [89, 90] применялась терминология "зависящих от скорости" межатомных потенциалов. В этом случае строгое решение задачи двух тел может быть получено стандартными методами классической механики. Как вытекает из результатов этого раздела, соответствующие эффекты становятся существенными при скоростях порядка $Z^{2/3}$ и наиболее заметны при средних и больших межъядерных расстояниях. В этом случае процессы торможения и рассеяния на большие углы мало чувствительны к изменениям потенциала, поскольку определяются его кулоновской асимптотикой. Поэтому в плане приложений таких потенциалов наиболее интересны процессы малоуглового рассеяния и каналирования, когда энергия (и скорость) частиц в первом приближении остаются постоянными. При этих условиях более уместно говорить о потенциалах, параметрически зависящих от энергии (скорости).

3. Взаимодействие заряженных частиц с твердыми телами

Вопрос о влиянии свойств твердого тела на процессы атомных столкновений является очень сложным, несмотря на значительный прогресс, достигнутый в этой области в последнее время. К теме этого обзора имеют отношение прежде всего классические характеристики движения частиц, расчет которых опирается на применение межатомных и усредненных потенциалов. Ряд смежных вопросов, выходящих за рамки этих приближений, рассмотрен более кратко.

3.1. Дифференциальные сечения ион-атомного рассеяния

Для большинства ион-атомных взаимодействий в веществе (кроме рассеяния Н на Н₂, Не) квантовые эффекты несущественны, следовательно, можно применять классическое описание. В этом случае основные соотношения теории и их связь с экспериментальными величинами хорошо известны [95–97], поэтому остановимся на практических методах расчета углов и сечений, применяемых в радиационной физике.

Стандартное классическое выражение для угла рассеяния в системе центра масс (СЦМ) имеет вид [95]

$$\theta = \pi - 2 \int_{r_m}^{\infty} \frac{b^2/r^2}{\sqrt{1 - b^2/r^2 - V(r)/E}} dr, \quad (3.1)$$

где b — прицельный параметр, E — относительная энергия столкновения, r_m — расстояние наибольшего сближения, определяемое из уравнения

$$1 - \frac{b^2}{r_m^2} - \frac{V(r_m)}{E} = 0.$$

Для устранения расходимости подынтегральной функции (3.1) используется преобразование [98]

$$p = \frac{Z_1 Z_2}{E}, \quad P = \frac{b}{p}, \quad \cos \alpha = \frac{r_m}{r}, \quad H = \frac{r_m}{p}, \quad (3.2)$$

с учетом которого (3.1) приводится к виду

$$\theta = \pi - \frac{2P}{H} \int_0^{\pi/2} \frac{\sin \alpha d\alpha}{\sqrt{1 - (P/H)^2 \cos^2 \alpha - \cos \alpha \Phi(Hp/\cos \alpha)/H}}, \quad (3.3)$$

где $\Phi(x) = rV(r)/Z_1 Z_2$ — функция экранирования ПВ. Обычно угол θ мал, поэтому вычитание двух близких чисел в (3.3) вызывает большие ошибки. Для их устранения используется преобразование [99]

$$\begin{aligned} \theta &= \pi - \frac{2P}{H} \left\{ \int_0^{\pi/2} y_0(\alpha) d\alpha - \int_0^{\pi/2} [y_0(\alpha) - y(\alpha)] d\alpha \right\} = \\ &= 2 \operatorname{arccot} \left[\frac{2P}{\Phi(Hb)} \right] + \frac{2P}{H} \int_0^{\pi/2} [y_0(\alpha) - y(\alpha)] d\alpha, \end{aligned} \quad (3.4)$$

где

$$y_0(\alpha) = \frac{\sin \alpha}{(1 - (P/H)^2 \cos^2 \alpha - \cos \alpha \Phi(Hb)/H)^{1/2}},$$

а $y(\alpha)$ совпадает с подынтегральной функцией (3.3). Интеграл в (3.4) легко вычисляется методом Симпсона. При $\theta \ll 1$ применяется также малоугловое приближение [95]

$$\theta = -\frac{b}{E} \int_b^{\infty} \frac{dV}{dr} \frac{1}{\sqrt{r^2 - b^2}} dr, \quad (3.5)$$

причем вычисление этого интеграла целесообразно проводить с помощью квадратурной формулы Гаусса–Кристоффеля [100]

$$\int_{-1}^1 \frac{f(x) dx}{\sqrt{1-x^2}} \approx \frac{\pi}{n} \sum_{i=1}^n f(x_i), \quad x_i = \cos \left[\frac{\pi}{n} \left(i - \frac{1}{2} \right) \right], \quad (3.6)$$

где $f(x)$ — не имеющая особенностей функция. Учитывая (3.5), (3.6), находим

$$\theta E = -\frac{\pi}{2n} \sum_{i=1}^n r_i \left(\frac{dV}{dr} \right)_{r=r_i}, \quad r_i = b \left| \cos \left[\frac{\pi}{n} \left(i - \frac{1}{2} \right) \right] \right|^{-1}. \quad (3.7)$$

Обычно уже при $n = 20-30$ формула (3.7) обеспечивает высокую точность. Линдхард с соавторами [101] предложили модификацию (3.5) для больших углов с использованием представления $V(r)$ через функцию экранирования ТФ. Тогда, учитывая (2.37), (2.54) и (3.5), получим

$$\varepsilon \theta = F \left(\frac{b}{a} \right), \quad (3.8)$$

$$F(x) = -x \int_x^{\infty} \frac{d}{dy} \left[\frac{\Phi(y)}{y} \right] \frac{dy}{\sqrt{y^2 - x^2}}. \quad (3.9)$$

Экстраполяция формулы (3.8) на большие углы состоит в замене θ на $2 \sin(\theta/2)$, после чего, вводя безразмерный

параметр рассеяния $\sqrt{t} = \varepsilon \sin(\theta/2)$, получим

$$\sqrt{t} = 0,5F\left(\frac{b}{a}\right). \quad (3.10)$$

Решая уравнение (3.10) относительно b/a , придем к универсальному соотношению

$$b = a\Psi(\sqrt{t}), \quad (3.11)$$

где $\Psi(\sqrt{t})$ — функция, обратная к $F(z)$. С учетом (3.11) дифференциальное сечение рассеяния равно

$$d\sigma = 2\pi b db = \pi a^2 \frac{d}{dt} [\Psi^2(\sqrt{t})] = \frac{\pi a^2}{2} \frac{f(\sqrt{t})}{t^{3/2}} dt, \quad (3.12)$$

где $f(\sqrt{t})$ — универсальная функция рассеяния [101], зависящая от потенциала через $\Phi(x)$. Для потенциала ТФ функция $f(\sqrt{t})$ аппроксимирована в виде [102a]

$$f(\sqrt{t}) = \lambda t^{0,5-m} [1 + (2\lambda t^{1-m})^q]^{-1/q}, \quad (3.13)$$

где $\lambda = 1,309$, $q = 2/3$, $m = 1/3$. Для других функций экранирования аналогичные параметры приведены в [102b]. Если сечение вычисляется по строгой формуле для угла рассеяния, то, приравнявая (3.12) к $2\pi b db$, с учетом соотношения $t = \varepsilon^2 \sin^2(\theta/2)$ получим функцию рассеяния общего вида [103]:

$$f(\sqrt{t}, \varepsilon) = \frac{4\varepsilon}{a^2} b(\theta(t)) \left[\frac{db}{d\theta} \tan \frac{\theta}{2} \sin \frac{\theta}{2} \right]_{\theta=\theta(t)}. \quad (3.14)$$

Таким образом, в общем случае f зависит не только от универсального параметра t , но и от энергии ε , причем ε входит в $f(\sqrt{t}, \varepsilon)$ также через b [104]. В работах [105] предложена "магическая" формула для $\theta(b)$, удобная при моделировании прохождения ионов в веществе и имеющая погрешность около 1%. Соответствующая программа получила название TRIM (transport ions in matter) и широко используется в радиационной физике.

Сравнение теоретических приближений для функций рассеяния, вычисленных с разными потенциалами (функциями экранирования) без аппроксимации и с аппроксимацией на большие углы, проводилось в работах [104, 107]. На рис. 10 показаны результаты расчета [104]. Кривая 3 соответствует формуле (3.13), т.е. потенциалу ТФ, кривая 2 аппроксимирует экспериментальные результаты для пробегов [142], кривая 1 — расчет в приближении широких углов для среднего потенциала [49], штриховые кривые — точные расчеты по формуле (3.14) для этого же случая. Точки обрыва кривых со стороны больших t соответствуют рассматриваемым значениям ε . Как следует из рисунка, форма применяемых потенциалов существенно влияет на функцию рассеяния (ср. кривые 1, 3). Приближение больших углов вызывает отклонения $f(\sqrt{t}, \varepsilon)$ от $f(\sqrt{t})$ на 5–10% при $\varepsilon > 10^{-2}$. Функции рассеяния для зависящих от энергии потенциалов вычислялись в [106, 107]. На рис. 11 показаны результаты расчета [106], сделанные в приближении широких углов. Кривая 1 получена для статического потенциала, кривая 2 — для "голого" электростатического, а кривая 3 — для скорости $v_1 = 0,24Z_1^{2/3}$ (рассматривался случай гомоатомной пары с учетом ионизации движущегося иона). Параметры функции экранирования (2.28) соответствовали работе [72]. Рисунок показывает, что учет зависимости ПВ от E значительно

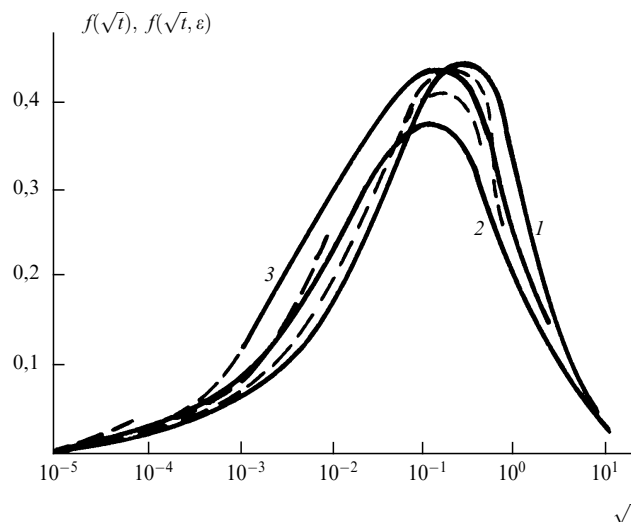


Рис. 10. Приведенные функции рассеяния $f(\sqrt{t})$ для различных приближений ПВ [104]: штриховые линии — расчет $f(\sqrt{t}, \varepsilon)$ по (3.14) для ПВ [49] при разных ε (значения $\sqrt{t} = \varepsilon$ в точках обрыва кривых соответствуют рассматриваемым значениям ε); 1, 2, 3 — расчет $f(\sqrt{t})$ в приближении больших углов (1 — для ПВ [49], 2 — из эксперимента [142], 3 — по формуле (3.13))

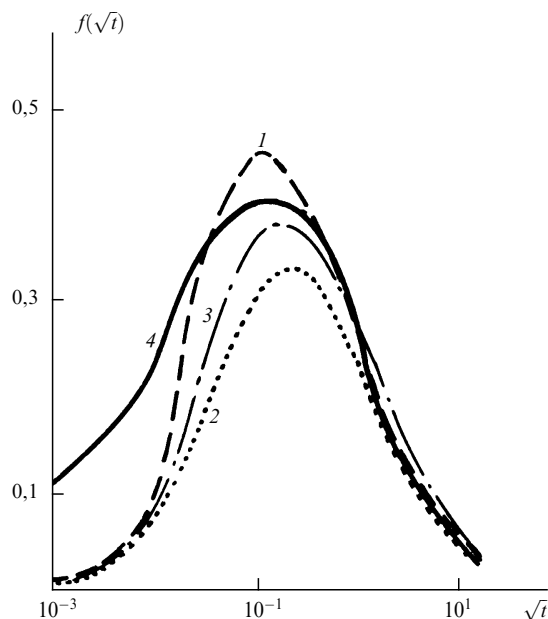


Рис. 11. Функция рассеяния для зависящих от скорости ПВ гомоатомных пар [106]: 1 — статистический ПА, 2 — электростатический ПВ, 3 — при $v_1 = 0,24Z_1^{2/3}$ с учетом ионизации, 4 — по (3.13)

уменьшает сечение рассеяния при $\sqrt{t} < 1$, т.е. при средних и больших межъядерных расстояниях.

3.2. Упругие и неупругие энергетические потери и пробеги ионов в твердых телах

Основные механизмы потерь энергии нерелятивистскими ионами в веществе связаны с упругими и неупругими эффектами. Фундаментальными параметрами торможения являются тормозные потери на единицу длины и сечения торможения S . Для упругого рассеяния по определению

$$\frac{dE}{dz} = NS_n = N \int T d\sigma, \quad (3.15)$$

где $T = T_{\max} \sin^2(\theta/2)$ — энергия, переданная атому-мишени в одном столкновении,

$$T_{\max} = 4M_1M_2 \frac{E}{(M_1 + M_2)^2}$$

— максимальная переданная энергия, θ — угол рассеяния в СЦМ, N — плотность атомов мишени, $d\sigma$ — дифференциальное сечение рассеяния. Конкретные значения S_n определяются видом потенциала взаимодействия. Вводя безразмерную единицу пробега [101]

$$\rho = 4\pi a^2 N z \frac{M_1 M_2}{(M_1 + M_2)^2}, \quad (3.16)$$

где z — длина пути иона в веществе (остальные величины имеют обычный смысл), после подстановки (3.12) в (3.15) с учетом (2.54) получим

$$\begin{aligned} \frac{dE}{dz} &= N T_{\max} \frac{\pi a^2}{2} \frac{1}{\varepsilon^2} \int_0^{\varepsilon^2} \frac{f(\sqrt{t})}{\sqrt{t}} dt = \\ &= \frac{4\pi M_1 Z_1 Z_2 a N}{(M_1 + M_2)} \frac{1}{\varepsilon} \int_0^{\varepsilon} f(x) dx, \end{aligned} \quad (3.17)$$

или, учитывая (3.16),

$$s_n(\varepsilon) = \frac{d\varepsilon}{d\rho} = \frac{1}{\varepsilon} \int_0^{\varepsilon} f(x) dx. \quad (3.18)$$

Формула (3.18) имеет общий характер вне зависимости от того, использовано или нет приближение больших углов для определения $f(x)$. В расчетах пробегов последнего времени широкое распространение получили аппроксимации сечений, полученных из (3.18) на основе "средних потенциалов" [49, 50]:

$$s_n(\varepsilon) = \frac{0,5 \ln(1 + \varepsilon)}{\varepsilon + 0,1412\varepsilon^{0,4206}}, \quad (3.19)$$

$$s_n(\varepsilon) = \frac{0,5 \ln(1 + 1,383\varepsilon)}{\varepsilon + 0,0132\varepsilon^{0,2123} + 0,19594\varepsilon^{0,5}}. \quad (3.20)$$

Обе формулы удовлетворяют предельному переходу при $\varepsilon \gg 1$, когда сечение становится резерфордским. В этом случае, как нетрудно показать, точный результат равен $s_n = 0,5 \ln \varepsilon / \varepsilon$.

Сечение электронного (неупругого) торможения S_e вводится соотношением

$$\frac{dE}{dz} = N S_e. \quad (3.21)$$

Теория электронной тормозной способности еще не приняла завершенной формы, несмотря на большое количество имеющихся приближений. Обсуждению этих вопросов посвящены многочисленные монографии и обзоры [75, 108–112], поэтому ограничимся анализом некоторых результатов последнего времени. При скоростях $v_1 > Z_2 v_0$ основным приближением является теория Бете–Меллера–Блоха [22, 75], в которой $S_e \propto v_1^{-2}$. При $v_1 < Z_1^{2/3} v_0$ в основном $S_e \propto v_1$, однако в случае $v_F < v_1 < Z_1^{2/3} v_0$, где v_F — скорость Ферми, существует также область квадратичной зависимости $S_e \propto v_1^2$ [110,

111]. Теория S_e в области максимума для легких частиц рассматривалась в [211]. При $S_e \propto v_1$ приняты, главным образом, два подхода: модель Фирсова [113], трактующая торможение как совокупность индивидуальных актов ион-атомного взаимодействия, и Линдхарда с соавторами [114–117], основанная на диэлектрическом формализме. В первоначальной форме обе модели предсказывали монотонную зависимость S_e от Z_1 и Z_2 . Модификация их с целью описания Z_1 - и Z_2 -осцилляций проводилась в ряде работ. Основные варианты модернизированной теории Фирсова изложены в [75, 118–122]. Несмотря на то, что этот подход в целом дает приближенное описание эффектов осцилляций, как отмечалось в [111], обобщения феноменологической теории [119] связаны с большим произволом, связанным с определением положения фирсовской плоскости и потока электронов через нее.

Диэлектрический подход развивался не так интенсивно и в основном касался описания Z_2 -осцилляций [123–125]. Введение в диэлектрическую теорию Z_1 -эффекта достигается отказом от модели бесструктурной частицы. В этом случае тормозные потери можно записать в виде [126, 127]

$$\frac{dE}{dz} = \frac{2}{\pi v_1^2} \int_0^{\infty} \frac{dk}{k} |\rho_{ne}(k)|^2 \int_0^{kv_1} d\omega \omega \operatorname{Im} \left(-\frac{1}{\varepsilon(\mathbf{k}, \omega)} \right), \quad (3.22)$$

где $\rho_{ne}(k)$ — формфактор распределения заряда частицы, $\varepsilon(\mathbf{k}, \omega)$ — диэлектрическая функция. Существенно то, что из этой формулы можно получить оба предельных соотношения для S_e : $S_e \propto v_1$ при $v_1 \ll v_F$ и $S_e \propto v_1^{-2}$ при $v_1 \gg v_F$.

Существует мнение [128, 129], что линейная диэлектрическая теория, в рамках которой получена формула (3.22), неприменима в случае $v_1 \ll v_F$, что мотивируется отсутствием Z_1 -осцилляций в расчетах [127]. В последней работе, однако, применялась грубая атомная модель, не учитывавшая оболочечного строения атомов. В работе [130] аналогичные вычисления были сделаны с применением кусочно экспоненциальной аппроксимации (2.25) для атомов с $Z_1 < 18$ и показали наличие Z_1 -эффекта. Поэтому есть основания считать, что результаты могут быть заметно улучшены при использовании более точных формфакторов. Используя (3.22), можно также получить зависимость энергии, переданной в одном столкновении, от прицельного расстояния b :

$$T_e(b) = 2 \int_{r_m}^{\infty} \frac{dE}{dz} \frac{dr}{\sqrt{1 - b^2/r^2 - V(r)/E}}, \quad (3.23)$$

где основной параметр диэлектрической функции — плазменная частота — локально зависит от плотности электронов атома-мишени: $\omega_p = \sqrt{4\pi\rho_2(\mathbf{r})}$. В этом случае, очевидно, Z_2 -эффект вводится в теорию через функцию ω_p . В такой форме, однако, расчеты по формуле (3.23) еще не проводились. Квантовое обобщение (3.23) для бесструктурных частиц сделано в [75], но ввиду громоздкости конечных формул этот подход большого распространения не получил и применялся лишь для описания торможения легких каналированных частиц. При моделировании ион-атомных столкновений в твердых телах часто применяются также методы расчета с

разделением электронов на сильно- и слабосвязанные [112, 131–133].

В работах [134, 135, 128, 129] развивалась нелинейная теория S_e , основанная на известной формуле Мессии и Бархоба [136], обобщение которой записывается в виде

$$S_e = \frac{4\pi n}{v_F^2} v_1 \sum_{l=0}^{\infty} (l+1) \sin^2(\delta_l - \delta_{l+1}), \quad (3.24)$$

где v_F и n — скорость и плотность электронного газа Ферми, δ_l — фазовые сдвиги рассеяния электронов на самосогласованном потенциале иона. Наиболее точные расчеты сделаны в [128, 129], где для определения потенциала иона применялся метод функционала электронной плотности. Результаты этих вычислений описывают Z_1 -осцилляции тормозных сечений в хорошем согласии с экспериментальными данными (правда, рассматривались лишь ионы с $Z_1 \leq 18$). Полуэмпирическое направление теории электронного торможения базируется на концепции эффективного заряда Бора [94, 137]:

$$S_e(Z_1, Z_2, v_1) = Z_{1\text{эфф}}^2(v_1) S_e(1, Z_2, v_1), \quad (3.25)$$

где $S_e(1, Z_2, v_1)$ — тормозное сечение протона, $Z_{1\text{эфф}}$ — эффективный заряд тормозящегося иона. Различные аппроксимации для $Z_{1\text{эфф}}$ приведены в [137, 138, 140, 141], в том числе — аналитические аппроксимации, описывающие эффекты осцилляции сечений — в работах [50, 140, 141].

Основное приближение, используемое в теории пробегов, начиная с основополагающей работы [101], состоит в предположении о независимости упругого и неупругого механизмов торможения, поэтому результирующее сечение равно $s = s_n + s_e$, а приведенный пробег $\rho(\varepsilon)$ и относительный энергетический страгглинг равны [101]

$$\rho(\varepsilon) = \int_0^{\varepsilon} \frac{d\varepsilon'}{s_n(\varepsilon') + s_e(\varepsilon')}, \quad (3.26)$$

$$\frac{\langle \Delta \rho^2 \rangle}{\rho^2} = \frac{\gamma}{\rho^2} \int_0^{\varepsilon} \frac{W(\varepsilon')}{[s_n(\varepsilon') + s_e(\varepsilon')]^3}, \quad (3.27)$$

$$W(\varepsilon) = \frac{1}{2\varepsilon^2} \int_0^{\varepsilon} f(\sqrt{t}) \sqrt{t} dt, \quad (3.28)$$

где $\gamma = 4M_1 M_2 / (M_1 + M_2)^2$, $f(\sqrt{t})$ — функция рассеяния. При $\varepsilon \ll 1$, если не учитываются Z_1 - и Z_2 -эффекты, обычно принимается $s_e = 0, 15\sqrt{\varepsilon}$. Очевидно, все указанные величины в конечном итоге связаны с рассеивающим потенциалом.

Сравнение пробегов и параметров их распределений с точки зрения роли ПВ проводилось в работах [49, 104, 143]. Их результаты показывают, что при $\varepsilon < 0, 1$ величины ρ , $\langle \Delta \rho^2 \rangle / \rho^2$ и другие параметры весьма существенно зависят от применяемого потенциала, причем результаты различаются в несколько раз при переходе к более высоким моментам распределений.

Более точные расчеты профилей распределения внедряемых ионов проводятся методами Монте-Карло и кинетических уравнений (см. [143–145] и цитированную там литературу), однако основные факторы, определяющие результаты расчета, остаются без изменений.

В [146] сообщено о модификации программы TRIM [105] путем отказа от приближения $s = s_n + s_e$. При этом неупругие потери непосредственно учитывались в интеграле рассеяния. Это позволило улучшить согласие теоретических и экспериментальных значений пробегов при $\varepsilon < 10^{-2}$. Аналогичный метод в рамках малоуглового приближения несколько ранее предлагался в работе [147].

3.3. Многократное рассеяние

В теории многократного рассеяния основным является метод, основанный на применении кинетического уравнения Бете [148], общее решение которого, пригодное для произвольных сочетаний ион-мишень, было получено Компанейцем [149]. Согласно этим работам, функция углового распределения частиц, прошедших пленку толщиной l с плотностью атомов N , равна

$$f(\theta) = \frac{1}{2\pi} \int_0^{\infty} u J_0(u\theta) du \exp \left\{ -Nl \int d\sigma [1 - J_0(u\theta')] \right\}, \quad (3.29)$$

где $d\sigma$ — дифференциальное сечение, $J_0(x)$ — функция Бесселя. Формула (3.29) связывает угловой профиль $f(\theta)$ с потенциалом взаимодействия через сечение $d\sigma$. В работе Мейера [150] с учетом предположения сечения в форме (3.12), выражения для "оптической" толщины $\tau = N\pi a^2 l$ и приведенного угла рассеяния $\eta = \varepsilon\theta/2$ формула (3.29) получена в безразмерном виде (углы θ и Ω относятся к лабораторной системе)

$$f(\theta) d\Omega = \eta d\eta \int_0^{\infty} x J_0(x\eta) \exp[-\tau\Delta(x)] dx, \quad (3.30)$$

где функция $\Delta(x)$ равна ($f_s(y)$ — функция рассеяния (3.12))

$$\Delta(x) = \int_0^{\infty} \frac{f_s(y)}{y^2} [1 - J_0(xy)] dy. \quad (3.31)$$

В действительности, однако, при таком преобразовании верхний предел интегрирования в (3.31) должен быть равен ε , поэтому с учетом асимптотики $f_s(y)$ при $y \gg 1$, этот результат верен лишь при $\varepsilon \gg 1$. Кроме того, дополнительная зависимость от ε имеется и в самой функции рассеяния $f_s(y)$ (см. раздел 3.1), следовательно, угловые распределения, вообще говоря, не представляются в универсальном виде даже для потенциалов ТФ. Результаты численного расчета угловых распределений по формулам (3.30), (3.31) табулированы в [150, 151] в интервале толщин $10^{-3} < \tau < 2 \cdot 10^3$. В расчетах применялись потенциалы ТФ с разной экранировкой и степенные. Результаты [151] показывают, что использование разных потенциалов вызывает при $\tau < 1$ изменение угловой полуширины профиля распределения в несколько раз. При $\tau > 1$, напротив, результаты близки, поскольку рассеяние обусловлено кулоновской частью потенциала.

Авторы работ [152–154] предположили, что частицы, прошедшие пленку вблизи угла $\theta = 0$, испытывают столкновения лишь при углах рассеяния, не превосходящих угловой полуширины распределения всех прошед-

ших частиц, $\eta_{1/2}$, поэтому упругие энергетические потери таких частиц должны быть ограничены, а величина угла $\eta_{1/2}$ связана с толщиной τ соотношением

$$\tau \rho \varepsilon_* s_n(\varepsilon_*) = c \eta_{1/2}^2, \quad \varepsilon_* = \frac{\varepsilon \psi_{\max}}{2}, \quad (3.32)$$

где ψ_{\max} — максимальный угол рассеяния в СЦМ, $s_n(\varepsilon)$ — приведенное сечение тормозных потерь, c — численный коэффициент, близкий к единице (в [151–153] принималось, что $c = 1$, а в [157] — $c = 1,4$). В работе [155] в развитие этих идей показано, что при сделанных предположениях имеется более простая зависимость:

$$\eta_{1/2} = \varepsilon_* = 0,5 \varepsilon \psi_{\max}. \quad (3.33)$$

Этот результат непосредственно следует из соотношений

$$\varepsilon = \frac{a M_2 E_1}{Z_1 Z_2 (M_1 + M_2)}, \quad \eta = \frac{E_1 a \theta}{2 Z_1 Z_2},$$

$$\theta = \frac{M_2}{M_1 + M_2} \psi, \quad (3.34)$$

где θ — угол рассеяния в лабораторной системе, ψ — угол рассеяния в СЦМ, остальные обозначения стандартны. С учетом (3.32), (3.33) при $c = 1$ получим [155]

$$s_n(\eta_{1/2}) = \frac{\eta_{1/2}}{\tau}. \quad (3.35)$$

Формула (3.35) была проверена моделированием по программе TRIM [105] с потенциалом Мольтера. В случае аналитического расчета вычисленные для этого потенциала сечения $s_n(\varepsilon)$ аппроксимировались в виде (3.19) с заменой численных коэффициентов в знаменателе на 0,052 и 0,32. Кроме того, аналогичная аппроксимация применялась для потенциала Кг–С, вычисленного по модели электронного газа (с коэффициентами 0,11 и 0,38 соответственно). Результаты расчета зависимостей $\eta_{1/2}(\tau)$ по приведенной формуле, а также полученные путем моделирования приведены для сравнения на рис. 12. Как и следовало ожидать, зависимость, полученная путем моделирования, лучше согласуется с (3.35) для соответствующей потенциалу Мольтера функции $s_n(\varepsilon)$. Ценность этих результатов авторы [155] связывают с возможностью выделения из полных энергетических потерь упругого вклада, поскольку не существует простого способа оценки электронного торможения. Заметим, что формула (3.35) может быть получена непосредственно из (3.29), если интегрирование в показателе экспоненты (3.29) ограничить значением $t = \varepsilon_*^2$ (сечение предварительно выражается через функцию рассеяния по формуле (3.12), а затем учитывается соотношение (3.18), для функции Бесселя использовать разложение $J_0(u\theta') \approx 1 - u^2\theta'^2/4$, а для θ' сделать подстановку $t = \varepsilon^2\theta'^2/4$, имея в виду, что $\theta' \ll 1$).

В интерпретации экспериментов по многократному рассеянию до сих пор применяется также теория Мольтера [156], основанная на непосредственном суммировании малых угловых отклонений. Для приложений она менее удобна, поскольку ориентирована на конкретный потенциал, а варьировать можно лишь параметры экранирования и эффективные заряды частиц. Сравнение угловых распределений Мольтера [156] и Мейера [150] проводилось в [75] (см. также соответствующие ссылки), откуда следует, что при $\tau \gg 1$ результаты близки, а при $\tau \ll 1$

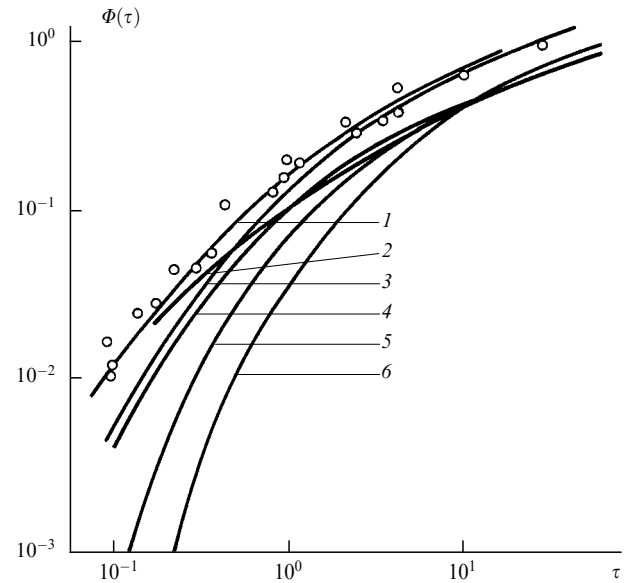


Рис. 12. Приведенная функция угловой ширины профиля многократного рассеяния [155]: 1 — расчет по (3.35) для потенциала Мольтера, 2 — по [150], 3 — то же, что 1, для потенциала Кг–С; 4, 5 — по работе [151] для потенциалов ТФ и Ленца–Иенсена; 6 — по работе [153]

согласие плохое.

Как вытекает из результатов разделов 3.1, 3.2, дифференциальные сечения рассеяния наиболее чувствительны к виду рассеивающего потенциала при \sqrt{t} , $\varepsilon < 1$, поэтому для корректного сопоставления результатов эксперимента с ПВ расчет угловых распределений по формуле (3.30) следует проводить без дальнейших упрощений. В этом случае наибольший интерес представляет случай $\tau < 1$. Применение формулы (3.35), очевидно, дает возможность зондирования потенциала и при $\tau > 1$.

В заключение заметим, что в работах [108, 151, 109] были получены также формулы, непосредственно связывающие функции углового распределения с дифференциальными сечениями, не получившие до сих пор большого применения.

3.4. Динамическое экранирование потенциалов

При движении ионов в плазме твердого тела их электрическое поле дополнительно экранируется, поэтому эффективность взаимодействия с атомами должна уменьшаться. Степень экранировки убывает с возрастанием скорости иона и при $v_1 \gg v_F$ стремится к нулю, поскольку экранирующие заряды "не успевают" следовать за частицей. На роль этого эффекта обращалось внимание в работе [158]. Общие формулы для потенциала "голого" электрического заряда Z_1 , движущегося в плазме со скоростью v_1 , были получены в работах [159–165] в рамках линейной диэлектрической теории. В [163] были выведены также формулы для флуктуаций плотности окружающего ион индуцированного заряда. Подробное изложение вопросов, связанных с механизмами формирования зарядовых состояний ионов дано в обзоре [327]. В [91, 107, 166–168] получены общие выражения для короткодействующей части экранированного потенциала (с учетом собственных электронов), а затем — потенциалы взаимодействия с отдельными атомами твердого тела. Следуя [91, 166, 167], запишем общее выражение для потен-

циала иона:

$$\Phi(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{2\pi^2} \int d^3\mathbf{q} \int \frac{\exp[i(\mathbf{q}\mathbf{r} - \omega t)]}{q^2 \varepsilon(\mathbf{q}, \omega)} \rho(\mathbf{q}) \delta(\omega - \mathbf{q}\mathbf{v}_1) d\omega, \quad (3.36)$$

где $\rho(\mathbf{q})$ — формфактор распределения заряда, $\varepsilon(\mathbf{q}, \omega)$ — диэлектрическая функция. Для $\rho(\mathbf{q})$ удобно использовать выражение, отвечающее аппроксимации плотности электронов формулой (2.48):

$$\rho(q) = Z_1 - N_1 + \sum_i \frac{c_i(qa_*/b_i)^2}{1 + (qa_*/b_i)^2}. \quad (3.37)$$

При упрощении формулы (3.36) либо сразу берется интеграл по частоте ω [163, 164], либо вводится цилиндрическая координатная система в \mathbf{q} -пространстве с осью z в направлении вектора \mathbf{v}_1 [160], а затем проводится интегрирование по угловой переменной и z -компоненте вектора \mathbf{q} . В этом случае получим [160]

$$\Phi(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{\pi v_1} \int_0^\infty J_0(\rho x) x dx \int_{-\infty}^\infty \frac{\exp[i\omega(z/v_1 - t)] \rho(q)}{\varepsilon(\mathbf{q}, \omega) (x^2 + \omega^2/v_1^2)} d\omega, \quad (3.38)$$

причем $q^2 = x^2 + \omega^2/v_1^2$. При интегрировании (3.38) по частоте используются аналитические свойства функции $\varepsilon(\mathbf{q}, \omega)$. В отсутствие затухания плазмонов полюса ее вещественны, и интегрирование по комплексному контуру, включающему вещественную ось, приводит к известному "кильватерному" потенциалу [159, 160, 163], описывающему поляризационный "след" частицы. Этот потенциал и возможность образования в нем квазисвязанных состояний "конвойных" электронов подробно обсуждались в указанных работах и здесь нас интересовать не будут. Заметим только, что пространственный период "кильватерного" потенциала равен v_1/ω_p , а сам он сосредоточен позади частицы. Учет поглощения в функции $\varepsilon(\mathbf{q}, \omega)$ приводит к убыванию амплитуды осцилляций с удалением от иона [163]. Короткодействующая часть поля иона обусловлена полюсами $\omega = \pm i\hbar v_1$ для "голого" заряда и полюсами формфактора $\rho(q)$ для электронного вклада [91, 167]. В первом случае конкретная зависимость $\varepsilon(\mathbf{q}, \omega)$ от \mathbf{q} не играет роли, поскольку $\mathbf{q} = 0$. Тогда (в случае $N_1 = 0$) получим [163, 164]

$$\Phi(\mathbf{r}, t) = \frac{Z_1}{\sqrt{\rho^2 + z'^2}} - Z_1 \frac{\omega_p}{v_1} \int_0^\infty \frac{J_0(\rho y \omega_p/v_1)}{1 + y^2} \times \exp\left[-\frac{\omega_p}{v_1} |z'|y\right] dy, \quad (3.39)$$

где ω_p — плазменная частота, $z' = z - v_1 t$, ρ и z' — цилиндрические координаты точки относительно положения иона в момент t . Из (3.39) следует, что поправка к кулоновскому полю иона в точке $\mathbf{r} = 0$ равна

$$\Delta\Phi(0) = -Z_1 \frac{\pi\omega_p}{2v_1}.$$

Если рассматривать ее как первый член разложения экранированного потенциала $Z_1 \exp(-\alpha r)/r$, то, очевидно, $\alpha = \pi\omega_p/2v_1$. В действительности интеграл в

(3.39) убывает несколько медленнее. В работах [91, 165] он вычислен в аналитическом виде, а затем представлен разложением по полиномам Лежандра от $\cos\theta$, где θ — угол между \mathbf{r} и \mathbf{v}_1 . Сферическая часть разложения хорошо аппроксимируется формулой [91, 168]

$$\Delta\Phi_0(r) \approx \frac{Z_1}{r} \left[1 - \exp\left(-1,064 \frac{\omega_p}{v_1} r\right) \right]. \quad (3.40)$$

Анизотропия потенциала $\Delta\Phi$, связанная с учетом угловых членов, не очень велика: в направлении оси z он несколько выше, чем в перпендикулярном. Эти зависимости показаны на рис. 13 для потенциала H^+ в алюминии при $v_1 = 3v_0$ ($\omega_p = 0,56$ ат. ед.).

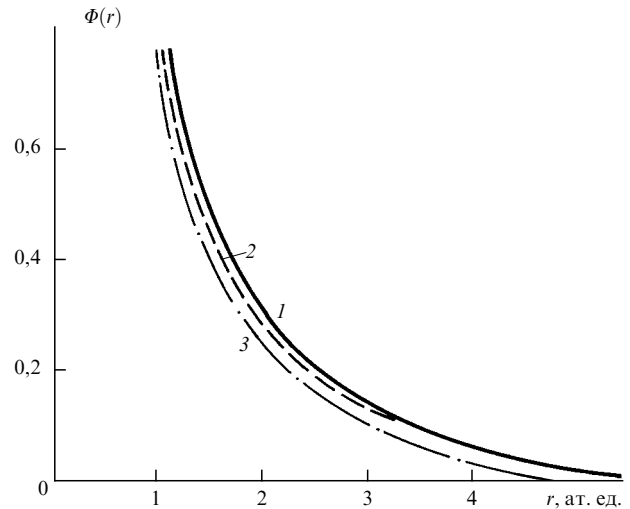


Рис. 13. Динамический электрический потенциал иона H^+ в алюминии при $v_1 = 3v_0$ [168]: 1 — (3.40); 2 — (3.39) при $\rho = 0$ (вдоль направления движения); 3 — аналогично 2 при $z' = 0$ (в перпендикулярном направлении)

Для ионов с частичной ионизацией потенциал (3.38) вычислен в [107, 168]. Диэлектрическая функция была взята в виде, предложенном в [127, 163]:

$$\varepsilon(\mathbf{q}, \omega) = 1 + \frac{\omega_p^2}{\omega_g^2 + 0,6v_F^2 q^2 + 0,25q^4 - \omega^2}, \quad (3.41)$$

где ω_g — ширина энергетической щели. Подстановка (3.41) и (3.37) в (3.38) приводит к результату

$$\begin{aligned} \Phi(\rho, z') = & \frac{Z_1 - N_1}{\sqrt{\rho^2 + z'^2}} - \frac{N_1}{\sqrt{\rho^2 + z'^2}} \sum_i c_i \times \\ & \times \exp\left(-\frac{\sqrt{\rho^2 + z'^2}}{a_*} b_i\right) - k(Z_1 - N_1) \times \\ & \times \int_0^\infty \frac{J_0(k\rho y) \exp(-k|z'|y)}{1 + y^2} dy + \frac{N_1 \omega_p^2}{a_*} \sum_i \frac{c_i}{b_i} \times \\ & \times \int_1^\infty \frac{J_0(\rho b_i \sqrt{t^2 - 1}/a_*)}{A_i + v_1^2 b_i^2 t^2/a_*^2} \exp\left(-t|z'| \frac{b_i}{a_*}\right) dt, \end{aligned} \quad (3.42)$$

$$A_i = \omega_g^2 + \frac{b_i^2}{a_*^2} \left(v_1^2 - v_F^2 + \frac{b_i^2}{4a_*^2} \right), \quad (3.43)$$

причем $k = (\omega_p^2 + \omega_g^2)/\omega_p$. Очевидно, что первые два члена (3.42) описывают статический электрический

потенциал иона в точке $r = \sqrt{\rho^2 + z'^2}$, а два последних связаны с эффектом экранирования. Нетрудно показать, что второй интеграл, как правило, значительно меньше первого. Мажорируя их соответствующими значениями при $\rho = z' = 0$ и полагая c_i и b_i равными коэффициентам Мольера, отношение второго интеграла к первому можно записать в виде

$$s \approx 1,6 \frac{Z_1 - N_1}{N_1} \frac{v_1}{\omega_p a_*}. \quad (3.44)$$

Поскольку обычно $\omega_p \approx 0,5$ ат. ед., $a_* \approx 0,2-0,3$, то при $v_1 > v_0$ и не слишком малых $Z_1 - N_1$ имеем $s \gg 1$. Случай $Z_1 \approx N_1$ не так важен, поскольку здесь преобладает экранировка за счет собственных электронов. Таким образом, в практически важных случаях последний член в (3.42) можно не учитывать, а для третьего применять формулу (3.39) с заменой Z_1 на $Z_1 - N_1$. Область применимости формул (3.39)–(3.42), как отмечено в [167], ограничена расстоянием $r < v_1/\omega_p$, когда существенны высокочастотные гармоники потенциала. Этот случай можно считать пределом слабого экранирования, поскольку поле иона в точке \mathbf{r} быстро изменяется за время пролета (по сравнению с периодом плазменных колебаний). При $r > v_1/\omega_p$, напротив, изменение поля мало и экранирование близко к статическому. Тогда в пределе $\omega \rightarrow 0$ диэлектрическую функцию можно записать в виде [169, 170]

$$\varepsilon(\mathbf{q}, \omega) = \frac{1}{q^2 D^2} + \frac{2i\omega}{q^2}, \quad q \leq 2k_F, \quad (3.45)$$

где D — дебаевский радиус. Потенциал "голого" заряда Z_1 , получаемый при подстановке (3.42) в (3.36), равен [91, 166, 167]

$$\begin{aligned} \Phi(\mathbf{r}, t) = & \frac{Z_1}{r} \exp\left(-\frac{r}{D}\right) r - \frac{Z_1 D^3 v_1^2}{4} \sin^2 \theta \left(1 + \frac{r}{D}\right) \times \\ & \times \exp\left(-\frac{r}{D}\right) + 4Z_1 v_1^2 D^3 \left(1 - \frac{3}{2} \sin^2 \theta\right) \times \\ & \times \left[\frac{2}{x^3} - \left(\frac{3}{8} + \frac{x}{8} + \frac{1}{x} + \frac{2}{x^2} + \frac{2}{x^3}\right) \exp(-x)\right], \end{aligned} \quad (3.46)$$

где θ — угол между векторами \mathbf{v}_1 и $\mathbf{r} - \mathbf{v}_1 t$, $r = \sqrt{(\mathbf{r} - \mathbf{v}_1 t)^2}$, $x = r/D$. Из (3.46) следует, что на больших расстояниях

$$\Phi(\mathbf{r}, t) \sim \frac{v_1^2}{r^3} \left(1 - \frac{3}{2} \sin^2 \theta\right).$$

В случае частичной ионизации частицы с применением формфактора (3.37) для $\Phi(\mathbf{r}, t)$ также нетрудно получить аналитическую формулу, но она выглядит более громоздко. Потенциал взаимодействия "голого" экранированного иона с отдельным атомом мишени равен [91, 167]

$$U(\mathbf{R}, t) = \Phi(\mathbf{R}, t) Z_2 - \int \Phi(\mathbf{R}, t) \rho(\mathbf{r}') d^3 r', \quad (3.47)$$

где $\rho(\mathbf{r}')$ — плотность электронов атома мишени, причем, вообще говоря, ее следует брать без учета коллективизированной части электронов (во всяком случае, для металлов). Подставляя (3.40) в (3.47) с учетом $\rho(\mathbf{r}')$ в

форме (2.48), получим

$$\begin{aligned} U(R) = & \frac{Z_1 Z_2}{R} \exp(-\tilde{a}R) - \frac{Z_1 N_2}{R} \sum_i \frac{c_i b_i^2}{(\tilde{a} a_*)^2 - b_i^2} \times \\ & \times \left[\exp\left(-\frac{b_i R}{a_*}\right) - \exp(-\tilde{a}R) \right], \end{aligned} \quad (3.48)$$

где R , как обычно, межъядерное расстояние, $\tilde{a} = 1,064 \omega_p/v_1$. При сохранении ионом части оболочки основной результат для статического случая (формула (2.18)) легко модифицировать. Если, как отмечалось выше, пренебречь последним слагаемым в (3.42), то, как следует из этой формулы, учет динамического экранирования дает поправку $-\Delta\Phi$ к потенциалу точечного заряда Z_1 , и $(N_1/Z_1)\Delta\Phi$ — к потенциалу электронного облака, где $\Delta\Phi$ определяется вторым слагаемым (3.39) с заменой $\omega_p \rightarrow (\omega_p^2 + \omega_g^2)^{1/2}$. Поэтому в формулу (2.18) нужно ввести поправочный член:

$$\Delta U(R) = -\Delta\Phi \frac{Z_2}{R} + \int \Delta\Phi(\mathbf{R}) \left(1 - \frac{N_1}{Z_1}\right) \rho_2(\mathbf{r}') d^3 r'. \quad (3.49)$$

Формулы (2.18) и (3.49) имеют общий характер независимо от применяемой для вычисления $\rho_2(\mathbf{r}')$ модели. Вклады в ПВ, связанные с функционалом электронной плотности, должны вычисляться обычным путем. В таком случае мы, очевидно, не учитываем влияния экранирования на соответствующие члены потенциала. При $v_1 = 0$ такое влияние, как показано в [171, 172], отсутствует, т.е. экранировка изменяет лишь электростатическое взаимодействие частиц. При $v_1 \neq 0$ аналогичный результат пока не получен, но из общих соображений (уменьшение роли экранирования с ростом скорости) можно предположить, что изменение ПВ тоже вызвано в основном только потенциалом $\Delta U(R)$. В работе [107] проводились расчеты $\Delta U(R)$ по формуле (3.49) с применением $\rho_2(r)$ в аппроксимации (2.25). Кроме того, в [107, 168] получено выражение для потенциала ион-атом в случае легких ионов, сохраняющих 1–2 электрона в связанном состоянии. На рис. 14 показаны результаты расчета потенциала Н–Ал при $v_1 = 1,2v_0$ [168] с учетом и без учета связанного электрона. Из рисунка видно, что

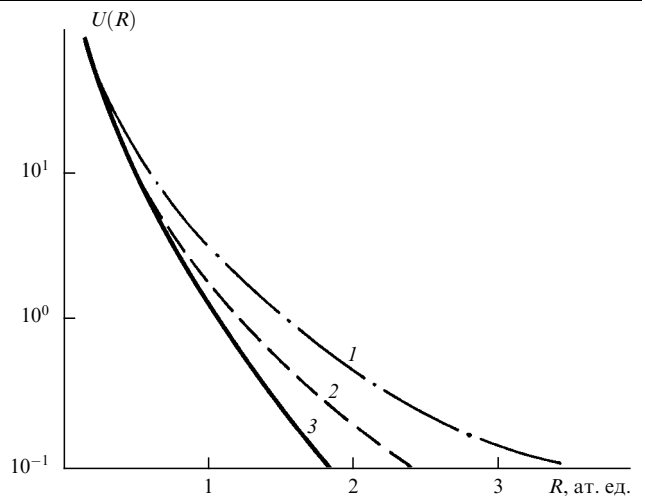


Рис. 14. Потенциал взаимодействия Н–Ал при $v_1 = 1,2v_0$: 1 — без учета экранирования; 2 — с учетом; 3 — с учетом экранирования и связанного электрона Н

экранирование существенно изменяет ПВ при $R > 2$ ат.ед. Для тяжелых частиц влияние динамического экранирования выражено слабее и проявляется на больших межъядерных расстояниях.

3.5. Непрерывные потенциалы атомных цепочек и плоскостей при каналировании

В теории ориентационных эффектов, связанных с прохождением заряженных частиц через кристаллы в направлениях, близких к направлениям кристаллографических осей (плоскостей), одно из центральных мест занимает понятие непрерывного потенциала (НП), впервые введенного в [173–175, 70]. Этот потенциал описывает когерентное малоугловое рассеяние частицы от большого числа атомов цепочки (плоскости), взаимодействующих с ней на малом участке траектории. В этом случае процессы рассеяния на большие углы и некогерентного многократного рассеяния оказываются подавленными, а характерные углы векторов скоростей частиц по отношению к направлениям каналов не превышают критических значений $\theta_{кр}$. Для классических частиц приближение НП справедливо, начиная с килоэлектронвольтового диапазона энергий, если прицельные параметры ионов по отношению к цепочке (плоскости) не превосходят величины $\sqrt{u_{\perp}^2 + a^2}$ (где u_{\perp} и a — амплитуда тепловых колебаний и параметр экранирования). При каналировании релятивистских лептонов модель НП работает, начиная с мегаэлектронвольтовых энергий, если в потенциальной яме, образованной стенками канала, образуется хотя бы несколько уровней. Волновые функции поперечного движения таких частиц находятся из уравнения Шрёдингера, содержащего НП и модифицированного путем замены массы покоя электрона на релятивистскую. Для случаев изолированной атомной цепочки и изолированной плоскости НП равен

$$U_{\text{ц}}(r) = \frac{1}{d} \int_{-\infty}^{\infty} V(\sqrt{z^2 + r^2}) dz, \quad (3.50)$$

$$U_{\text{пл}}(x) = 2\pi n_s \int_0^{\infty} V(\sqrt{\rho^2 + x^2}) \rho d\rho, \quad (3.51)$$

где $V(r)$ — атом-атомный ПВ, d и n_s — расстояние между атомами цепочки и поверхностная концентрация атомов плоскости, r и x — координаты, перпендикулярные цепочке и плоскости, соответственно. Нетрудно показать, что эти соотношения определяют нулевые коэффициенты Фурье-разложений от суммы взаимодействий частицы со всеми атомами цепочки (плоскости). В первых расчетных работах по каналированию положительных частиц [173–178] общий потенциал, действующий на ион в канале, выбирался в виде НП от небольшого числа близлежащих цепочек (плоскостей). При этом применялась аппроксимация (2.37) с функциями экранирования Линдхарда [70] и Мольера [66] (см. формулы (2.41) и (2.28)). В этих случаях из (3.50), (3.51) следуют хорошо известные выражения для НП [176]:

а) в случае цепочки

$$U_{\text{ц}}^{\text{Л}}(r) = \frac{2Z_1 Z_2}{d} \ln \sqrt{1 + \frac{3a^2}{r^2}}, \quad (3.52)$$

$$U_{\text{ц}}^{\text{М}}(r) = \frac{2Z_1 Z_2}{d} \sum_i c_i K_0\left(\frac{b_i r}{a}\right), \quad (3.53)$$

б) в случае плоскости

$$U_{\text{пл}}^{\text{Л}}(x) = 2\pi n_s Z_1 Z_2 a \left[\sqrt{\frac{x^2}{a^2 + 3}} - \frac{x}{a} \right], \quad (3.54)$$

$$U_{\text{пл}}^{\text{М}}(x) = 2\pi n_s Z_1 Z_2 a \sum_i \frac{c_i}{b_i} \exp\left(-\frac{b_i x}{a}\right), \quad (3.55)$$

где a — параметр экранирования, $K_0(x)$ — модифицированная функция Бесселя. В работах [177, 178] получены "тепловые" НП в рамках дебаевского приближения для смещений атомов от положений равновесия. При отсутствии взаимных корреляций распределения вероятностей смещения атомов в осевом и плоскостном случаях равны [178]

$$f_{\text{ц}}(\Delta r) = \frac{1}{\pi u_{\perp}^2} \exp\left(-\frac{\Delta r^2}{u_{\perp}^2}\right), \quad (3.56)$$

$$f_{\text{пл}}(\Delta x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi} u_1} \exp\left(-\frac{\Delta x^2}{2u_1^2}\right), \quad (3.57)$$

где u_1 и u_{\perp} — одномерная и двумерная ($u_{\perp} = \sqrt{2} u_1$) среднеквадратичные амплитуды тепловых колебаний атома решетки, Δr и Δx — смещения от цепочки и плоскости. С учетом (3.56), (3.57) "тепловые" НП записываются в виде

$$U_{\text{ц}}^{\text{Т}}(r) = \int_0^{\infty} \Delta r d(\Delta r) \int_0^{2\pi} d\theta f_{\text{ц}}(\Delta r) \times \\ \times U_{\text{ц}}\left(\sqrt{[r^2 + (\Delta r)^2 - 2r \Delta r \cos \theta]}\right), \quad (3.58)$$

$$U_{\text{пл}}^{\text{Т}}(x) = \int_{-\infty}^{\infty} d(\Delta x) f_{\text{пл}}(\Delta x) U_{\text{пл}}(|x - \Delta x|). \quad (3.59)$$

Усреднение плоскостного потенциала (3.55) дает [177, 178]

$$U_{\text{пл}}^{\text{Т}}(x) = \pi n_s Z_1 Z_2 a \sum_i \frac{c_i}{b_i} \exp\left(\frac{b_i u_1^2}{2a^2}\right) \times \\ \times \left\{ \exp\left(-\frac{b_i x}{a}\right) \operatorname{erfc}\left[\frac{1}{\sqrt{2}} \left(\frac{b_i u_1}{a} - \frac{x}{u_1}\right)\right] + \right. \\ \left. + \exp\left(\frac{b_i x}{a}\right) \operatorname{erfc}\left[\frac{1}{\sqrt{2}} \left(\frac{b_i u_1}{a} + \frac{x}{u_1}\right)\right] \right\}, \quad (3.60)$$

где

$$\operatorname{erfc}(t) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_t^{\infty} \exp(-y^2) dy.$$

Аналогично для осевого НП Мольер получено [179]

$$U_{\text{ц}}^{\text{Т}}(r) = \frac{Z_1 Z_2}{d} \sum_i c_i \exp(q_i^2) \int_0^1 \exp\left(-\frac{r^2 t}{u_{\perp}^2} - \frac{q_i^2}{t}\right) \frac{dt}{t}, \quad (3.61)$$

где $q_i = b_i u_{\perp} / 2a$. Формулы (3.60), (3.61) и аналогичные им для других потенциалов [187] неудобны при проведении численных расчетов, включающих сумму НП большого

числа плоскостей (цепочек). В связи с этим в работе [183] для результирующего потенциала кристалла, действующего на частицу с зарядом Z_1 , движущуюся в режиме каналирования, предложена формула

$$U(\mathbf{p}_\perp) = \frac{Z_1}{\Omega} \sum_{\mathbf{g}_\perp} v_{\mathbf{g}_\perp} \exp(i\mathbf{g}_\perp \mathbf{p}_\perp) S(\mathbf{g}_\perp) \exp(-0,5g_\perp^2 u_\perp^2), \quad (3.62)$$

где \mathbf{p}_\perp — поперечная координата, $v_{\mathbf{g}_\perp}$ — фурье-образ атомного потенциала, $S(\mathbf{g}_\perp)$ — структурный фактор, Ω — объем элементарной ячейки, \mathbf{g}_\perp — поперечная компонента вектора обратной решетки, $u_\perp = u_1$ в плоскостном случае и $u_\perp = \sqrt{2}u_1$ — в осевом. Для моноатомного кристалла "решетка" в поперечном направлении имеет простейший базис, поэтому $S(\mathbf{g}_\perp) = 1$. В случае кристаллов сложного состава (3.62) легко обобщить, введя дополнительное суммирование по разным компонентам [186]. Формула (3.62) представляется очевидной при $u_\perp = 0$, т.е. в случае статической решетки. Однако при $u_\perp \neq 0$, вообще говоря, идентичность ее выражению общего потенциала как суммы отдельных НП типа (3.60), (3.61) требует обоснования, поскольку фактор Дебая–Валлера включен в (3.62) по аналогии с формулой для амплитуды рассеяния рентгеновских лучей. Рассмотрим сначала плоскостной случай. Для этого перепишем (3.59) в виде [187]

$$U_{\text{пл}}^r(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}u_1} \int_0^\infty U_{\text{пл}}(z) \left\{ \exp\left[-\frac{(z+x)^2}{2u_1^2}\right] + \exp\left[-\frac{(z-x)^2}{2u_1^2}\right] \right\} dz. \quad (3.63)$$

Учитывая, что общий потенциал, действующий на частицу со стороны всех плоскостей, равен

$$U(x) = \sum_{n=-\infty}^\infty U_{\text{пл}}^r(x + nd_p), \quad (3.64)$$

где d_p — межплоскостное расстояние, и разлагая (3.64) в ряд Фурье, получим ($g_n = 2\pi n/d_p$)

$$U(x) = \sum_n U(g_n) \exp(ig_n x). \quad (3.65)$$

Коэффициенты разложения $U(g_n)$ с учетом (3.51) равны

$$U(g_n) = \frac{2}{d_p} U_{\text{пл}}(g_n) \exp(-0,5g_n^2 u_1^2). \quad (3.66)$$

С другой стороны, если атомный потенциал $V(R)$ сферически-симметричен, то соответствующий формфактор равен

$$v_g = 4\pi \int_0^\infty \frac{\sin(gr)}{gr} V(r) r^2 dr. \quad (3.67)$$

Интегрируя (3.67) по частям, с учетом асимптотики $V(R)$ и (3.51) получим

$$v_g = \frac{2}{n_s} U(g_n). \quad (3.68)$$

Поскольку в данном случае $\Omega = d/n_s$, из (3.65)–(3.68) непосредственно видно, что формулы (3.65) и (3.62) эквивалентны, так как $g_\perp = g_n = 2\pi n/d_p$ и $u_\perp = u_1$. В осевом случае аналогично (3.65), (3.66) коэффициент разложения Фурье равен

$$U(\mathbf{g}_\perp) = \frac{1}{\Omega_2} \int \exp(-i\mathbf{g}_\perp \mathbf{p}_\perp) U_{\text{пл}}^r(\mathbf{p}_\perp) d^2 \mathbf{p}_\perp = \frac{1}{\Omega_2} U_{\text{пл}}(g_\perp) \exp(-0,5g_\perp^2 u_1^2), \quad (3.69)$$

$$U_{\text{пл}}(g_\perp) = 2\pi \int_0^\infty U_{\text{пл}}(r) r J_0(g_\perp r) dr, \quad (3.70)$$

где $J_0(x)$ — функция Бесселя. Преобразуя далее формфактор, получим

$$v_g = \int \exp(-i\mathbf{g}\mathbf{r}) V(r) d^3 r = 2\pi d \int_0^\infty r U_{\text{пл}}(r) J_0(gr) dr = dU_{\text{пл}}(g). \quad (3.71)$$

Учитывая, что $\Omega_2 = \Omega/d$, очевидно, вновь придем к формуле (3.62), однако фактор Дебая–Валлера, как и в случае плоскостного потенциала, равен $\exp(-0,5g_\perp^2 u_1^2)$, в отличие от такового в [183]. Таким образом, в формуле (3.62) и в плоскостном, и в осевом случаях $u_\perp = u_1$. При вычислении потенциала для каналирования тяжелых частиц, очевидно, вместо $Z_1 v_g$ в (3.62) нужно подставить фурье-образ ион-атомного ПВ.

В работах [180–182] для расчета спектров излучения релятивистских каналированных электронов и позитронов применялась аппроксимация квантовомеханических атомных факторов по работе Дойля–Тернера [184]:

$$v_g = 2\pi f(s) = 2\pi \sum_{i=1}^4 a_i \exp(-b_i s^2), \quad (3.72)$$

где $g = 4\pi s$, a_i и b_i — табулированные коэффициенты. Обращая ее, получим атомный потенциал Дойля–Тернера:

$$V(r) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \sum_{i=1}^4 \left(\frac{a_i}{B_i} \right)^{3/2} \exp\left(-\frac{r^2}{B_i}\right), \quad (3.73)$$

причем $B_i = b_i/4\pi^2$. Формулы (3.73), (3.74) удобны тем, что из них с учетом (3.50), (3.51) и (3.58), (3.59) получаются простые формулы для "тепловых" НП цепочки [181, 185] и плоскости [182]:

$$U_{\text{пл}}^r(r) = \frac{2Z_1}{d} \sum_{i=1}^4 \frac{a_i}{B_i + u_1^2} \exp\left(-\frac{r^2}{B_i + u_1^2}\right), \quad (3.74)$$

$$U_{\text{пл}}^r(x) = 2\sqrt{\pi} n_s Z_1 \sum_{i=1}^4 \frac{a_i}{(B_i + 2u_1^2)^{1/2}} \exp\left(-\frac{x^2}{B_i + 2u_1^2}\right). \quad (3.75)$$

Заметим, что хотя потенциалы (3.74), (3.75) принято считать квантовомеханическими [180–182], такое отождествление не совсем корректно. Это следует из того, что формула (3.73) не отражает асимптотики атомного потенциала при $r \rightarrow 0$. Кроме того, плотность электро-

нов, соответствующая (3.73), не описывает оболочечной структуры. В этом смысле НП, получаемые на основе кусочно экспоненциальной модели (2.25) и аналитической модели Хартри–Фока [321], более обоснованны. Соответствующие формулы для статических и "тепловых" потенциалов приведены в работах [45, 187]. Сопоставление различных приближений для НП на основе сравнения характеристического излучения каналированных частиц проводится в разделе 4.6.

Потенциал (3.62) можно также обобщить в случае, когда кристалл, состоящий из нескольких сортов атомов (ионов) типа i , деформирован полем поперечной ультразвуковой (электромагнитной) волны с частотой ω_s (ω_e) [277]. Если x_i — амплитуда атомных смещений, вызванных этим полем, то для усредненного (по плоскости) потенциала частица–кристалл получим

$$\begin{aligned} U(x, t) = & 2 \sum_i \sum_{m=1}^{\infty} c_{im} J_0(g_m x_i) \cos(g_m x) + \\ & + 4 \sum_i \sum_{m=1}^{\infty} \sum_{p=1}^{\infty} c_{im} J_{2p}(g_m x_i) (-1)^p S_{im} \cos(g_m x) \times \\ & \times \cos(2p\Omega t) + 4 \sum_i \sum_{m=1}^{\infty} \sum_{p=1}^{\infty} c_{im} J_{2p-1}(g_m x_i) \times \\ & \times (-1)^p S_{im} \sin(g_m x) \sin[(2p-1)\Omega t], \end{aligned} \quad (3.76)$$

где $g_m = 2\pi m/d_{pi}$ — вектор обратной решетки, $\Omega = (c/v_s)\omega_s$ для ультразвуковой волны и $\Omega = (n-1)\omega_e$ для электромагнитной волны (v_s — скорость звука, c — скорость света в вакууме, n — оптический показатель преломления); S_{im} зависит от типа канала (в случае (100) и (110) NaCl, например, $S_{im} = 1$, а для (111), соответственно, $S_{im} = (-1)^m$); $J_k(x)$ — функция Бесселя порядка k ; коэффициенты c_{im} равны

$$c_{im} = \frac{n_{si} d_{pi}}{\pi m^2} [Z_i - \rho_i(g_m)] \exp\left(-\frac{g_m^2 u_i^2}{2}\right). \quad (3.77)$$

В последней формуле n_{si} и d_{pi} — поверхностная плотность и межплоскостное расстояние для подрешетки ионов типа i , $\rho_i(g_m)$ — формфактор плотности электронов, u_i — соответствующие амплитуды тепловых колебаний.

Близким к проблеме влияния внешнего периодического поля на НП является и вопрос об учете дислокационных эффектов, рассматривавшийся в работах [315, 316] с помощью модельных потенциалов.

3.6. Поверхностные эффекты

При движении заряженной частицы вблизи поверхности твердого тела роль плазменных эффектов существенно возрастает. Как показано в [188, 189], в этом случае тормозные потери в основном связаны с возбуждением поверхностных плазмонов и, кроме того, появляется динамический индуцированный поверхностный потенциал, аналогичный возникающему в объеме (см. формулу (3.36)). В условиях скользящего взаимодействия с поверхностью [245] на участке траектории после отражения поверхностный "кильватерный" потенциал оказывает притягивающее действие на положительный ион, что может приводить к его скачкообразному движению [190]. Другой эффект связан с возможностью ориента-

ционного влияния поверхности на движение диатомной молекулы или кластера, приводящего к повороту линии ядер перпендикулярно поверхности [112, 191]. В работе [192] рассматривалось также влияние кильватерных взаимодействий на многократное рассеяние, испытываемое диатомной молекулой, в частности, отмечалось появление когерентности рассеяния при малых углах между направлением вектора скорости и осью молекулы.

В теории динамических поверхностных потенциалов (и тормозной способности) в основном применяются два подхода: диэлектрический метод, основанный на модели зеркального отражения [193–199] и метод эффективного гамильтониана в представлении поверхностных плазмонов [188–190, 200]. Траектория частицы до и после отклонения предполагается прямолинейной. Наиболее общие формулы для индуцированного динамического потенциала получены в [199]. В частности, при движении заряда вне твердого тела (с компонентами скорости \mathbf{v}_{\parallel} и \mathbf{v}_{\perp} параллельно и перпендикулярно поверхности) индуцированный потенциал равен

$$\begin{aligned} \Phi^{\text{ind}}(\mathbf{r}, t) = & \frac{Z_1}{2\pi^2} \int d^2\mathbf{k} \int d\omega \frac{v_{\perp} \exp(-k|z|)}{(\omega - \mathbf{v}_{\parallel}\mathbf{k})^2 + v_{\perp}^2 k_z^2} \frac{kI_0 - \pi}{kI_0 + \pi} \times \\ & \times \exp[-i(\mathbf{k}\mathbf{v}_{\parallel} - \omega)t], \end{aligned} \quad (3.78)$$

где $\mathbf{k} = (\mathbf{k}_2, k_z)$, z — расстояние от поверхности, I_0 определяется выражением

$$I_0 = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dk_z}{(k^2 + k_z^2) \varepsilon(\mathbf{k}, \omega)}. \quad (3.79)$$

С учетом (3.78) тормозные потери на единице длины пути равны

$$\frac{dE}{dx} = \frac{1}{v_1} \frac{dE}{dt} = \frac{Z_1}{v_1} \left(-\frac{\partial \Phi^{\text{ind}}}{\partial \mathbf{r}} \mathbf{v}_1 \right). \quad (3.80)$$

Учитывая, что при прямолинейном движении $\mathbf{r} = \mathbf{v}_1 t$, получим

$$\frac{dE}{dx} = -\frac{Z_1}{v_1} \left(\frac{\partial \Phi^{\text{ind}}}{\partial t} \right)_{\mathbf{r}=\mathbf{v}_1 t}. \quad (3.81)$$

В работе [199] приведены расчетные формулы для dE/dx при различных аппроксимациях диэлектрической функции. Случай "одетых" ионов пока не рассматривался. При достаточно больших расстояниях от поверхности, очевидно, $Z_1 \Phi^{\text{ind}}(\mathbf{r}, t)$ можно рассматривать как результирующий потенциал взаимодействия иона с твердым телом. Однако при $z < 1, 2$ ат. ед. нужно также учитывать парные взаимодействия, и пока, вообще говоря, не ясно, как это согласовать с диэлектрическим подходом. В качестве более грубой альтернативной модели предложено использовать "непрерывный" потенциал поверхности вида [202, 203]

$$U(x) = N \int_x^{\infty} dz \int_0^{\infty} 2\pi r V(\sqrt{z^2 + r^2}) dr, \quad (3.82)$$

где N — плотность атомов мишени, z — расстояние от поверхности, $V(R)$ парный ПВ частицы с атомом вещества. При компьютерном моделировании скользящих

отражений все известные программы, такие как TRIM [105], MARLOWE [204] и аналогичные [205, 206], оперируют с обычными ПВ, рассматривая столкновения по бинарной схеме.

В заключение заметим, что в ряде работ изучались также динамические эффекты при взаимодействии нейтральных частиц с поверхностями. В частности, в [207, 208] такие эффекты рассматривались для ван-дер-ваальсовых взаимодействий нейтральных атомов с цилиндрическими и плоскими поверхностями. В [208] показано, что при нерелятивистском движении атома параллельно поверхности наряду с силой притяжения появляется сравнимая по величине тормозящая, а при определенных условиях даже ускоряющая сила в направлении движения частицы, обусловленная обменом энергии с поверхностными плазмонами. Ряд других эффектов, связанных с малоугловым отражением ионов от поверхности, описан в [245].

3.7. Особенности взаимодействий при высоких энергиях

В этом разделе кратко обсудим ряд результатов последнего времени, связанных с учетом эффектов, выходящих за рамки стандартных приближений для парных и усредненных потенциалов. Так, при рассмотрении радиационных явлений, возникающих при взаимодействии релятивистских электронов и позитронов с кристаллической решеткой, важное место занимают некогерентные процессы генерации гамма-излучения с одновременным рождением или поглощением возбуждений кристалла [304, 306–307, 317]. Радиационные переходы с передачей решетке продольных импульсов порядка $2\pi\hbar/d$ (d — межатомное расстояние в цепочке) можно рассмотреть, только учитывая дискретность атомных цепочек (и их потенциалов) в продольном направлении. Этот механизм особенно важен в переходном режиме от плоскостного к осевому каналированию. В случае движения электронов с малыми угловыми моментами относительно цепочек необходимо также учитывать изменение их кинетической энергии вследствие продольных осцилляций с периодом d/c , что достигается добавлением к НП дополнительного слагаемого, связанного с этой энергией [304]. В тонких кристаллах возникает эффект радужного рассеяния электронов [313, 314], обусловленный когерентным сложением амплитуд рассеяния на один и тот же угол при различных моментах частиц относительно одной атомной цепочки. Напротив, аналогичный эффект при рассеянии положительных частиц (протонов) [310, 311] интерпретировался в рамках представлений об интерференции вкладов рассеяния от нескольких цепочек.

В обзоре [309] рассмотрено явление динамического хаоса, связанного с совместным действием кристаллических полей и некогерентных эффектов на ориентированное движение частиц. В частности, развивалось представление об атомной плоскости как системе кристаллических осей.

Для учета рассеяния частиц полем, возникающим при поляризации решетки, используются оптические (комплексные) потенциалы для электронов и тяжелых частиц [112, 318]. В рамках этого подхода получены функции тормозной способности и коэффициенты "поглощения" тяжелых каналированных ионов.

Авторы работ [305, 319] обсуждали индуцированно-дисперсионное взаимодействие частиц с решеткой,

заключающееся в том, что на атоме, движущемся в продольно-периодическом поле кристаллической решетки, наводится электрический (а в магнитной решетке — магнитный) момент $\mathbf{p} = \alpha\mathbf{E}$, взаимодействующий с вызвавшим его полем в течение всего времени пролета частицы. Этот эффект сопровождает известное ранее явление резонансного возбуждения атома, открытое О कोरोковым [320]. Можно также отметить потенциалы магнитного взаимодействия нейтронов с индуцированным в их системе покоя магнитным полем

$$\mathbf{H} = \frac{1}{c} [\mathbf{v}\mathbf{E}]$$

[305], где \mathbf{v} — скорость нейтрона, а \mathbf{E} — электрическое поле решетки.

4. Экспериментальные результаты

В силу ограниченности объема настоящего обзора анализ экспериментальных результатов менее всего претендует на исчерпывающее изложение. При выборе этого материала акцент делался прежде всего на те вопросы, теоретическая трактовка которых в рамках описанных ранее моделей еще требует доработки. Обсуждение характеристического излучения при каналировании ограничено плоскостным случаем, причем рассматриваются лишь положения линий наблюдаемого излучения, наиболее прямым образом связанные с потенциалами. Многие другие вопросы можно найти в монографиях и обзорах [10, 11, 112, 306–310, 314] и др.

4.1. Энергетические потери и пробеги ионов низких энергий

В течение последних 15 лет достигнут значительный прогресс в описании торможения и пробегов ионов низких энергий ($\varepsilon \ll 1$), когда основным механизмом энергетических потерь является упругое торможение. В основе этих достижений лежит универсальная теоретическая модель Линдхарда с соавторами [101], базирующаяся на применении соотношений (3.16)–(3.18) для сечений упругого торможения, формулы $s_e = 0,15\sqrt{\varepsilon}$ для неупругого торможения и предположения об их независимости. Итогом развития этой концепции является обоснование универсальной зависимости "пробег–энергия" [506, в, 142, 209, 210], согласующейся с экспериментальной зависимостью $\rho_{\text{экл}}(\varepsilon)$, полученной для мишеней из аморфного кремния, на уровне нескольких процентов (в среднем). В работах [506, в, 211] на полумпирическом уровне удалось также ввести в теорию эффекты Z_1 - и Z_2 -осцилляций тормозных сечений. В свою очередь это стимулировало успешное развитие теоретического описания процессов распыления твердых тел при ионном облучении [210–212]. Наблюдавшиеся отклонения от универсальной зависимости для металлических [213] и ионно-кристаллических мишеней [214, 215] удалось преодолеть модификацией параметров экранирования ПВ [216] и учетом ион-ионных составляющих взаимодействия частицы с мишенью [214, 215]. Однако адекватного теоретического описания Z_1 - и Z_2 -зависимостей тормозных сечений и связанных с ними величин до сих пор нет. Этот пробел теории был известен еще на уровне дифференциальных сечений упругого рассеяния, осцилляции которых наблюдались в экспериментах [217, 218], и которые не удалось описать даже с

применением наиболее точных межатомных ПВ, вычисленных по модели электронного газа (подробное обсуждение этих экспериментов и результатов расчета см. в [48, 75]). Ситуация еще более осложнилась в связи с обнаружением большого эффекта Z_1 -осцилляций пробегов в аморфных полупроводниковых мишенях и отсутствием его в металлических [219–221]. Так как при энергиях порядка 1 кэВ/а.е.м., отвечавших этим экспериментам, соотношение упругих и неупругих потерь составляет примерно 10:1, то было сделано предположение о том, что осцилляции пробегов обусловлены осцилляциями упругих сечений и, в конечном итоге, оболочечными эффектами ПВ. С этой целью были выполнены расчеты пробегов, основанные на применении потенциалов, вычисленных по модели электронного газа [222–225], которые, как и можно было ожидать, не дали согласия с экспериментами. Это видно из рис. 15, на котором показаны теоретические [225] и экспериментальные зависимости $\rho(\varepsilon)$ для ионов Au, Yb и Eu в аморфном кремнии [220]. Осцилляции тормозных сечений наблюдались также на газовых мишенях [218, 226]. В последней работе обсуждалась возможность того, что весь эффект связан с осцилляцией электронного тормозного сечения S_e . В этом случае соответствующие амплитуды должны быть порядка 200% от средних значений $0,15\sqrt{\varepsilon}$. Это предположение, вероятно, опровергается результатами

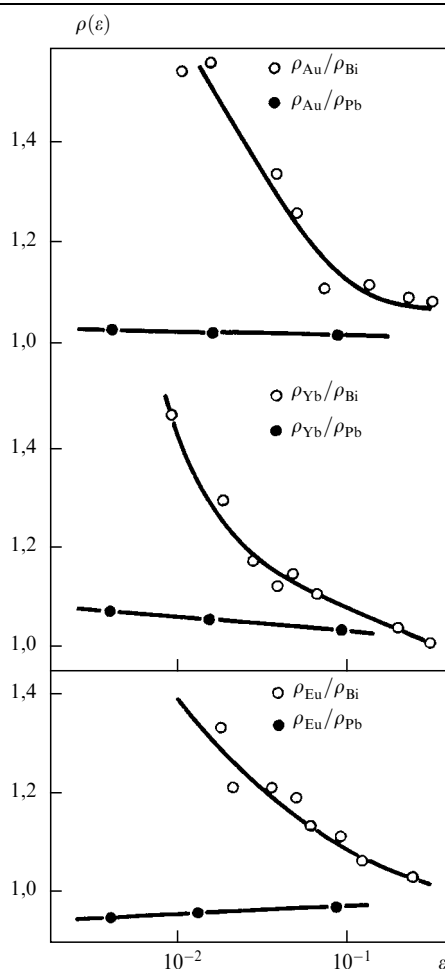


Рис. 15. Пробег ионов в приведенных единицах. Светлые кружки — экспериментальные результаты [220], темные — теоретический расчет [225]. Сплошные линии проведены для наглядности

экспериментальных измерений электронного торможения [227], показывающими, что амплитуда Z_1 -эффекта в углероде не превышает 20% (при $Z_1 > 40$). Затем, что еще из первых экспериментов по Z_1 -осцилляциям известно, что в углероде их амплитуды особенно велики [228, 229]. Таким образом, более вероятным представляется предположение о том, что эффект связан с упругим торможением. Трудности теории представляются наиболее серьезными в отношении газовых мишеней, поскольку, казалось бы, потенциалы взаимодействия свободных атомных частиц в этом случае более адекватны эксперименту. В качестве альтернативных механизмов осцилляций дифференциальных сечений указывалось на возможность влияния неупругих эффектов, с одной стороны [231], и образования квазимолекулярных состояний, с другой [48, 218], но эти идеи пока не получили должного развития.

Проблема отсутствия Z_1 -осцилляций пробегов в металлических мишенях тоже остается нерешенной. В [220–225] в качестве рабочей гипотезы высказывалось предположение о том, что экранирующий ион-электронный газ "маскирует" детали оболочечного строения. Общие соображения, однако, подсказывают, что при большом размере иона экранирующее электронное облако тоже должно быть большим, поэтому периферическое распределение электронов вокруг иона получается весьма близким к тому, что соответствует нейтральному атому, и, следовательно, подавление Z_1 -эффекта выглядит проблематично. В целом понимание этих вопросов все еще далеко от ясности.

4.2. Многократное рассеяние

Подробный обзор соотношения теории и эксперимента по многократному рассеянию до 1980 г. приведен в [75], где имеются соответствующие ссылки. Ряд результатов более недавнего времени отражен в [233–239]. В целом можно сказать, что при больших приведенных толщинах мишеней ($\tau \gg 1$, см. раздел 3.3) наблюдается хорошее согласие теории и эксперимента. Однако для "медленных" ионов с энергиями 3 кэВ $< E < 1$ МэВ в ряде случаев отмечались заметные расхождения [240–242]. В работе [241] наблюдались Z_1 -осцилляции угловой полуширины распределения рассеянных частиц. При рассеянии на поликристаллических мишенях с размером зерен более 100 Å экспериментальная угловая полуширина иногда составляет лишь 25% от теоретической [243], что связывалось с влиянием каналирования. Экспериментальные угловые распределения (в особенности для тонких мишеней), как правило, уже теоретических, что указывает на более слабый рассеивающий потенциал. Однако при интерпретации угловых распределений ионов Li, рассеянных на мишенях V, Cr, Fe, Co, Ge [240], напротив, пришлось уменьшить параметр экранирования на 20–30%, чтобы улучшить согласие с экспериментом, т.е. рассеивающий потенциал был выше теоретического.

В последнее время интерес к многократному рассеянию возрос в связи с обнаруженной зависимостью энергетических потерь от угла вылета из пленки. Для ионов этот эффект наблюдался в [232–234], для электронов — в [235–236]. В этих работах обнаружено увеличение тормозных потерь частиц с ростом угла вылета из пленки с последующим насыщением зависимости. Отмечается усиление эффекта с возрастанием Z_2 . В случае прохождения протонов с энергией 100 кэВ [234] эффект наблюдался

вплоть до углов вылета $\alpha = 15^\circ$. Практическая значимость этих исследований обусловлена необходимостью увеличения точности измерений энергетических потерь пучков протонов, применяемых в качестве калибровочных частиц при изучении радиационной стойкости материалов (в частности, биологических тканей). В интерпретации экспериментов [232–234] до сих пор нет полной ясности (см., например, [237, 238]). Если при энергиях $E < 1$ МэВ в пределах углов 0° – 3° еще можно ожидать влияния эффекта каналирования для части пучка [234], то при углах 10° – 15° это заведомо не так, поэтому результаты экспериментов не могут быть объяснены этим эффектом (при котором энергетические потери становятся меньше). То же можно сказать об экспериментах [232, 233], в которых энергия протонов была 7 МэВ. Насыщение зависимости наблюдалось при углах 3° – 4° , на порядок превосходящих критические углы каналирования. В работе [237] отмечалось, что хотя результаты моделирования [233] согласуются с экспериментальной зависимостью, использованные в расчетах тормозные способности, зависящие от прицельного параметра, втрое превышали тормозные потери, вычисленные в приближении локальной электронной плотности, считающемся достаточно надежным при этих энергиях. Расчеты торможения в полуклассической модели [238] с разделением вкладов от внутренних и внешних электронов привели к еще более низким значениям энергетических потерь (при близких к нулю прицельных параметрах).

Особый интерес представляет изучение многократного рассеяния частично "ободранных" ионов, когда существенны процессы зарядового обмена, экранирования, или имеется зависимость ПВ от E . Для легких ионов с $Z_1 < 10$ основную роль играют первые два эффекта. В работе [239] измерялись угловые распределения ионов ^{14}N и ^{16}O с энергиями 30–330 кэВ/а.е.м., рассеянных металлическими пленками. Измеренные и теоретические (по Мольер) угловые распределения удалось согласовать [239] при условии, что эффективные заряды ионов, ответственных за многократное рассеяние, в 1,5–1,8 раза превышали эффективные "тормозные" заряды. Отсюда был сделан вывод о том, что процесс многократного рассеяния идет на меньших прицельных параметрах, чем торможение. Это заключение находится в видимом противоречии с обсуждавшейся выше корреляцией энергетических потерь с углом рассеяния. С целью прояснения данного вопроса в работе [107] были проведены расчеты угловых распределений по модифицированной теории Мольер с потенциалом взаимодействия, учитывающим экспериментальные значения степени ионизации и динамическое экранирование. Результаты расчета угловых распределений ионов, рассеянных пленками алюминия, сравниваются с экспериментальными данными на рис. 16. Значение плазменной частоты принято равным 0,57 ат.ед. Как следует из рисунка, применение более корректного потенциала позволяет объяснить экспериментальные зависимости без дополнительных предположений об "особых" прицельных параметрах.

4.3. Критические углы каналирования

В модели Линдхарда [70] критический угол каналирования $\theta_{\text{кр}}$ непосредственно связан с величиной рассеивающего потенциала. В осевом случае $\theta_{\text{кр}}$ находится из

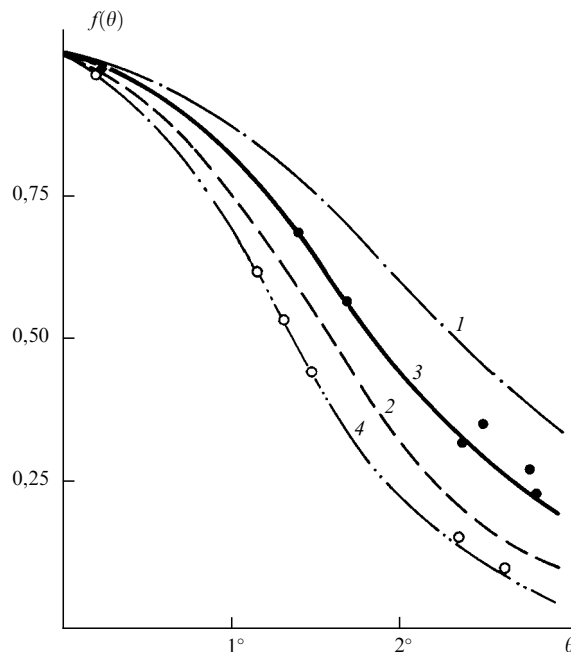


Рис. 16. Угловые распределения ионов ^{16}O , прошедших пленку Al толщиной $l = 0,3$ мкм; \bullet и \circ — эксперимент [239] при $E = 1,25$ и $1,77$ МэВ соответственно, кривые 1 и 2 — теоретические расчеты без учета динамического экранирования [108]; 3 и 4 — с учетом экранирования и степени ионизации

уравнения

$$U_{\text{ц}}(\theta_{\text{кр}}d) = E\theta_{\text{кр}}^2, \quad (4.1)$$

где $U_{\text{ц}}(r)$ — непрерывный потенциал атомной цепочки, определяемый формулой (3.50), d — расстояние между атомами цепочки, E — энергия частицы. Для НП (3.52) из (4.1) следуют хорошо известные формулы для $\theta_{\text{кр}}$ при высоких и низких энергиях [176]:

$$\theta_{\text{кр}} = \begin{cases} \sqrt{\frac{2Z_1Z_2}{dE}}, & E > \frac{2Z_1Z_2d}{a^2}, \\ \left(\frac{3Z_1Z_2a^2}{d^3E}\right)^{0,25}, & E < \frac{2Z_1Z_2d}{a^2}, \end{cases} \quad (4.2)$$

где a — параметр экранирования. Величина энергии

$$E = \frac{2Z_1Z_2d}{a^2}$$

в случае каналирования протонов в $\langle 110 \rangle$ Ge равна 170 кэВ. В экспериментах измеряется не $\theta_{\text{кр}}$, а угловая полуширина выхода обратного рассеяния $\psi_{1/2}$, пропорциональная $\theta_{\text{кр}}$ [178, 244, 246]. Зависимости $\psi_{1/2} \propto E^{-1/2}$ и $\psi_{1/2} \propto E^{-1/4}$, вытекающие из (4.2) при высоких и низких энергиях, хорошо подтверждены в экспериментах, хотя область низких энергий ($E < 0,5$ МэВ/а.е.м.) изучалась реже [247–250]. Проведение экспериментов в этом случае осложняется зависимостью $\psi_{1/2}$ от глубины рассеяния, необходимостью улучшения энергетического разрешения детектора и другими факторами. Важно отметить, однако, что зависимость $\psi_{1/2} \propto E^{-1/2}$ выполняется для любого вида потенциала, тогда как соотношение $\psi_{1/2} \propto E^{-1/4}$ специфично только для потенциала Линдхарда (3.52). В общем случае решение уравнения (4.1) приводит к функции $\theta_{\text{кр}}(E)$ более сложного вида, что

было, по-видимому, впервые отмечено в [251], где исследовался "завал" зависимости $\theta_{кр}(E)$ (со стороны низких энергий) при каналировании килоэлектронвольтных протонов в вольфраме. Об экспериментальном подтверждении этого результата сообщалось в [252].

В случае плоскостного каналирования как при низких, так и при высоких энергиях выполняется соотношение $\theta_{кр} = \sqrt{U_B/E}$, где U_B — высота потенциального барьера, поэтому зависимость от энергии величины $\psi_{1/2}\sqrt{E}$ (если она есть) однозначно указывает на изменение НП. На это впервые обращалось внимание в работах [91, 166, 167], где показано, что зависимость ПВ от E или его изменение из-за влияния динамического экранирования и изменения зарядового состояния могут вызывать увеличение (уменьшение) $\psi_{1/2}$ по сравнению с ожидаемыми значениями на 10–15%. Уменьшение наблюдаемых углов захвата ионов Br и I в плоскостные каналы кристалла Au с ростом энергии отмечалось в [253], где изучалось каналирование ионов с энергиями 20–80 МэВ. Другие экспериментальные данные, к сожалению, не известны. Нужно также отметить, что форма НП влияет и на угловой профиль выхода обратного рассеяния [176], однако в целях уточнения потенциала это обстоятельство, по-видимому, не привлекало особого внимания.

4.4. Измерение траекторий и потенциалов при плоскостном каналировании тяжелых частиц

Плоскостное каналирование ионов в отличие от осевого (и от каналирования электронов и позитронов) характеризуется хорошо выраженным периодическим движением частиц на малых глубинах (в этом случае эффекты многократного рассеяния еще малы), в результате которого синхронно с приближением их к атомным плоскостям осциллирует выход обратного рассеяния и вторичных процессов. Торможение ионов по мере движения создает энергетическую "развертку" спектра обратного рассеяния, осцилляции которого обусловлены частицами, отраженными на глубинах, кратных полутолщине траектории $\lambda/2$. Расстояние между соседними максимумами a и b энергетического спектра равно [254]

$$\Delta E_{ab} \approx \frac{\lambda}{2} \left[S_r(k^2 E_0) \frac{\cos \theta_{in}}{\cos \theta_{out}} + \gamma k^2 S_r(E_0) \right], \quad (4.3)$$

где E_0 — начальная энергия, k — кинематический фактор обратного рассеяния, θ_{in} и θ_{out} — углы "влета" и "вылета" из кристалла, отсчитываемые от нормали к поверхности, $S_r(E)$ — тормозная способность неориентированного движения, γ — отношение тормозной способности частиц с большой амплитудой осцилляций, дающих вклад в рассеяние, к S_r . Измерение ΔE_{ab} , очевидно, дает информацию о λ и потенциале, с одной стороны, и об энергетических потерях — с другой. В большинстве известных экспериментов [255–263] такие спектры измерялись при различных отношениях $\cos \theta_{in}/\cos \theta_{out}$ (так называемый "метод косинусов" [254]), а величина λ находилась из (4.3) с использованием табличных значений S_r [50в]. В работе Барретта [264] предложен "q-метод", в котором путем сканирования угла наклона пучка к плоскостям находится угол ψ_m , соответствующий максимуму обратного рассеяния. Величина ψ_m связана с $\lambda/2$ соотношением

$$q = \frac{\lambda}{2} \psi_m d_p, \quad (4.4)$$

где d_p — межплоскостное расстояние, q — константа порядка единицы, характерная для данной энергии и плоскости. Формула (4.4) получена путем компьютерного моделирования и имеет простой физический смысл: частица, начинающая движение из центра канала под углом ψ_m к плоскости, двигаясь по прямой линии пересекла бы ее на глубине $\Delta z = \lambda/4$. В этом случае мы бы имели $q = 1$. На самом деле движение идет по искривленной траектории, что увеличивает значения λ и q . В [254], в частности, показано, что для ионов He с энергиями 1–2 МэВ, каналирующих в кристалле германия, $1,39 < q < 1,43$. Параметры λ и ψ_m очевидным образом связаны с НП:

$$\psi_m = \sqrt{\frac{U_B}{E_0}}, \quad (4.5)$$

$$\lambda = 4 \sqrt{\frac{2E_0}{M_1}} \int_0^{d_p/2} \frac{dx}{\sqrt{U_B - U(x)}}, \quad (4.6)$$

причем x отсчитывается от середины канала, $U_B = U(d_p/2) - U(0)$ — высота потенциального барьера, M_1 — масса частицы. Сравнение теоретических (вычисленных по формулам (4.5), (4.6) и путем моделирования) и экспериментальных значений λ и ψ_m , найденных "методом косинусов" и "q-методом", показывает [254], что между ними имеется согласие на уровне расхождений в 3–10%, причем ПВ He–Ge должен быть "слабее" потенциала Мольтера с параметром экранирования (2.29). Это, вероятно, обусловлено влиянием экранировки за счет связанного электрона He и электронного газа кристалла. На рис. 17 показаны экспериментальный и полученный моделированием спектры выхода обратнорассеянных частиц в зависимости от глубины, разрешение по которой (в эксперименте и при моделировании) составляло 12–13 нм.

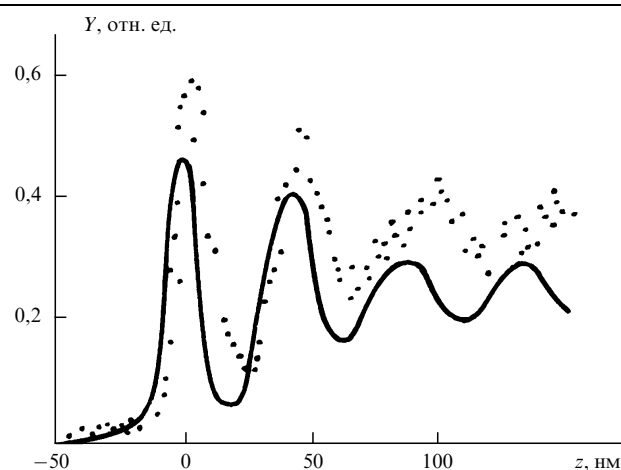


Рис. 17. Относительный выход обратнорассеянных ионов гелия с энергией 2 МэВ в зависимости от глубины при каналировании в (110) Ge [254]. Точки — эксперимент, сплошная кривая — моделирование

Другое направление эмпирических оценок потенциалов инициировалось работами Робинсона [265] и основано на применении опытной зависимости тормозных потерь от частоты осцилляций ионов в канале (α и β — эмпирические постоянные, характерные для данного

типа иона и канала):

$$S(\omega) = \frac{dE}{dx} \Big|_{E=E_0} = \alpha + \beta\omega, \quad (4.7)$$

где ω — частота осцилляций, определяемая формулой (x_{\max} — амплитуда осцилляций)

$$\omega^{-1} = 2 \int_0^{x_{\max}} \frac{dx}{\sqrt{U(x_{\max}) - U(x)}}. \quad (4.8)$$

Фактор $\sqrt{2M_1}$ в (4.8) опущен, так как включен в коэффициент β в (4.7). Робинсон предложил модельное выражение для тормозной способности вида

$$S(x, E) = S_0 + S_1 [\sigma(x) - 1], \quad (4.9)$$

где x — координата иона в канале, S_0 и S_1 зависят от энергии, $\sigma(0) \equiv 1$.

Предполагая, что ион совершил целое число полуосцилляций, после усреднения (4.9) по периоду движения с учетом (4.7) получим

$$\alpha = S_0 - S_1, \quad (4.10)$$

$$\beta = 2S_1 \int_0^{x_{\max}} \sigma(x) \frac{dx}{\sqrt{U(x_{\max}) - U(x)}}, \quad 0 \leq x_{\max} \leq \frac{d_p}{2}. \quad (4.11)$$

Решение интегрального уравнения (4.11) относительно $\sigma(x)$ имеет вид

$$\sigma(x) = \frac{\beta}{\pi S_1} \frac{d}{dx} \sqrt{U(x) - U(0)}, \quad 0 \leq x \leq \frac{d_p}{2}. \quad (4.12)$$

Учитывая четность $U(x)$ и условие $\sigma(0) = 1$, из (4.12) имеем

$$U''(0) = 2\pi^2 \frac{(S_0 - \alpha)^2}{\beta^2}. \quad (4.13)$$

Еще одно соотношение получается усреднением (4.9) по координате x , тогда, с учетом (4.7)–(4.11) и (4.12) находим

$$\begin{aligned} S_r(E) &= S_0 + S_1 \left[\frac{2}{d_p} \int_0^{d_p/2} \sigma(x) dx - 1 \right] = \\ &= \alpha + \frac{2\beta}{\pi d_p} \sqrt{U\left(\frac{d_p}{2}\right) - U(0)}. \end{aligned} \quad (4.14)$$

Непосредственно из эксперимента находятся α , β , S_0 и $S_r(E)$. Внутренняя непротиворечивость модели подтверждается близостью значений $S_r(E)$, получаемых из (4.14) для разных каналов с применением различных НП. В случае, когда НП задан в подходящем параметризованном виде, соотношения (4.13), (4.14) позволяют найти параметры аппроксимации, используя данные для нескольких каналов. В работе [265] этот метод применялся для определения ПВ ионов Н, Не, О и I с атомами Si и Au. В случае ионов Н и Не эмпирические потенциалы хорошо согласовались с ПВ по Хартри–Фоку и хуже с ПВ Мольера. Для ионов I согласие было плохим (во всех

случаях предполагалось, что ион — голая частица с эффективным зарядом, соответствующим данной скорости).

В [266] формулы (4.9) и (4.12) использовались для расчета энергетических потерь α -частиц в плоскостных каналах Та, причем применялись разные аппроксимации НП. Обнаружена слабая зависимость формы результирующих спектров от НП. В [267] функции $S(x, E)$ вычислялись по формуле (4.9) для плоскостного потенциала вида

$$U(x) = 2\pi Z_1 Z_2 N d_p \sqrt{3} a^2 \times \left(\frac{1}{0,5d_p + a - x} + \frac{1}{0,5d_p + a + x} \right), \quad (4.15)$$

где использованы стандартные обозначения. Необходимые для расчета параметры S_0 и S_1 были взяты из эксперимента [268]. Результаты расчета сравнивались с вычислениями $S(x, E)$ по модели локальной электронной плотности (для α -частиц в каналах (100) и (110) Si). Обнаруженное согласие функций $S(x, E)$ вблизи стенок каналов было интерпретировано как доказательство адекватности НП (4.15) данному случаю. В частности, отмечалось согласие экспериментальных значений

$$\sigma'_{\text{exp}} = (S_r - \alpha) \frac{\pi}{\beta}$$

с теоретическими

$$\sigma'_{\text{th}} = \frac{2}{d_p} \sqrt{U\left(\frac{d_p}{2}\right) - U(0)}$$

в пределах отклонений в 7–8 % ($\sigma'_{\text{th}} < \sigma'_{\text{exp}}$). Нетрудно видеть, однако, что неучтенное в (4.15) влияние температуры вызовет добавочное уменьшение величины σ'_{th} примерно на 10% из-за понижения высоты потенциального барьера, поэтому общее отклонение величины $U(d_p/2) - U(0)$ от экспериментального значения составит ~ 35 %, так что говорить о преимуществах потенциала (4.15) проблематично.

Еще один метод оценки плоскостных потенциалов применялся в [269]. Основные соотношения имеют вид (x — координата, U — НП)

$$\begin{aligned} x(U) &= \left(\sqrt{8\pi^2 M_1 v_1} \right)^{-1} \int_0^U \lambda_{\text{ch}}(E_{\perp}, U) \frac{dE_{\perp}}{\sqrt{U - E_{\perp}}}, \\ E_{\perp} &= E\psi_{\text{in}}^2, \end{aligned} \quad (4.16)$$

где $\lambda_{\text{ch}}(E_{\perp}, U)$ — "длина волны" осцилляций иона с поперечной энергией E_{\perp} , ψ_{in} — начальный угол "влета" относительно плоскостей. В этом случае экспериментальными параметрами являются λ_{ch} и ψ_{in} (см. (4.3) и (4.6)). Нетрудно видеть, что (4.16) является обращением (4.6) и представляет частный случай известной формулы восстановления потенциала по периоду движения в одномерном потенциальном поле [95].

4.5. Зависимость энергетических потерь от частоты осцилляций при плоскостном каналировании тяжелых ионов

В работах [91, 92] указывалось на несколько существенных деталей экспериментов [270, 271], в которых изучалась зависимость (4.7), не привлекаясь, однако, доста-

точного внимания. Кроме того, и сама зависимость (4.7) не получила теоретического объяснения. Наиболее отличительная особенность — увеличение коэффициента β с ростом энергии ионов. Покажем, следуя [91], что этот факт непосредственно связан с уменьшением плоскостного НП вследствие зависимости от E потенциала взаимодействия. Это иллюстрирует рис. 18, на котором схематически показаны точки $i-i$ и $j-j$ поворота иона с одинаковой частотой осцилляций ω , но движущегося в разных потенциальных "ямах". Из-за большей крутизны кривой 2 точки $j-j$ находятся дальше от стенок канала, чем точки $i-i$. Если частота осцилляций увеличивается на $\Delta\omega$, то новые точки поворота $i'-i'$ смещаются к стенкам канала сильнее, чем точки $j'-j'$ из-за меньшей крутизны потенциальных кривых. Отсюда следует, что при равенстве тормозных способностей ионов с разными энергиями энергетические потери частиц, движущихся в более пологом НП, возрастут сильнее, поскольку ионы движутся в области более высокой плотности электронов и ядер кристалла. Сопоставляя этот вывод с экспериментальной зависимостью (4.7), можно сделать заключение о том, что потенциальная кривая 2 на рис. 18 отвечает меньшей энергии. Напротив, при увеличении НП с ростом энергии мы бы имели уменьшение коэффициента наклона β . Количественные расчеты, подтверждающие эти выводы, были сделаны в [107, 333]. На рис. 19 показаны экспериментальные и расчетные зависимости $S(\omega)$ для ионов I с энергиями 15 и 60 МэВ при каналировании в канале (111) Au. В расчетах ПВ I–Au учитывалось электростатическое взаимодействие по формуле (2.18) и вклад кинетической энергии электронного газа по формуле (2.61), а плотности электронов Au и I определялись из (2.48) с учетом экспериментальных значений степени ионизации ионов I при заданной энергии ($Z_1 - N_1 = 13$ при $E = 15$ МэВ и $Z_1 - N_1 = 22$ при $E = 60$ МэВ [272]). Коэффициенты c_i и b_i в (2.48) отвечали аппроксимации [68]. Вычисленные таким путем ПВ усреднялись стандартным образом с учетом тепловых колебаний. Результирующие НП показаны на рис. 20 вместе с потенциа-

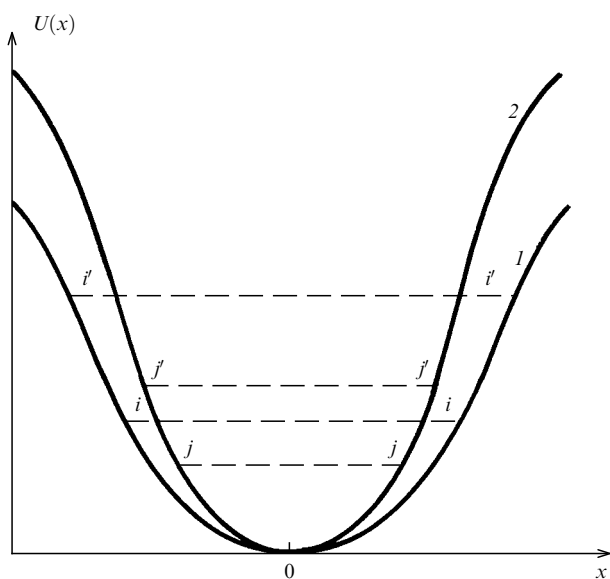


Рис. 18. Схема движения ионов в плоскостном канале для разных НП. Точки поворота, i, j и i', j' отвечают частотам осцилляций ω и $\omega + \Delta\omega$

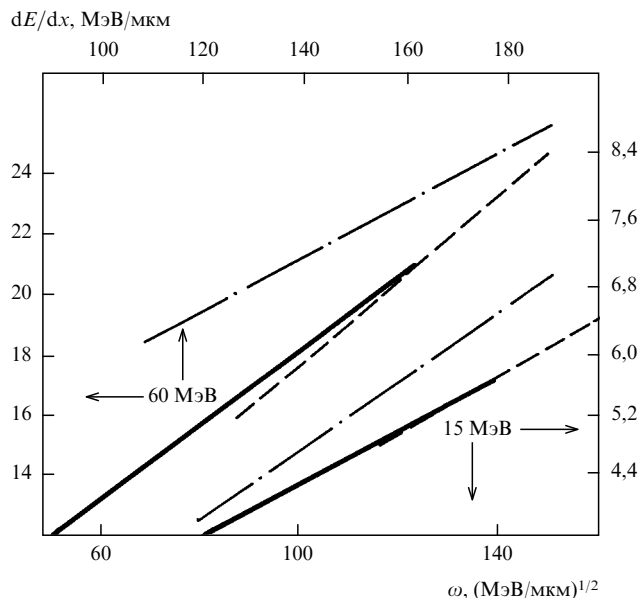


Рис. 19. Тормозные способности ионов ^{127}I при каналировании в (111)Au в зависимости от частоты осцилляций и энергии: сплошные линии — эксперимент, штриховые — расчет в квазистатистическом приближении [333]; штрихпунктирные — расчет для потенциала (4.17)

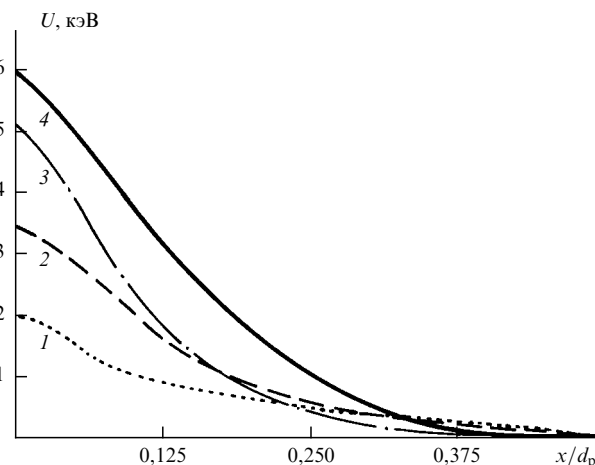


Рис. 20. Непрерывные потенциалы для ионов I при каналировании в (111)Au: 1, 2 — приближение "эффективного заряда" (4.17) при $Z_{1\text{эфф}} = 13$ (1) и 22 (2); 3, 4 — квазистатистическое приближение [107, 333] для $E = 60$ МэВ (3) и 15 МэВ (4)

лами типа Мольер при эффективных зарядах ионов $Z_{1\text{эфф}} = 13$ и $Z_{1\text{эфф}} = 22$. В последнем случае ПВ I–Au равен

$$V(R) = \frac{Z_{1\text{эфф}} Z_2}{R} \Phi\left(\frac{R}{a_2}\right), \quad (4.17)$$

где $a_2 = 0,8853 Z_2^{-1/3}$ — параметр экранирования атома Au, а функция $\Phi(x)$ соответствует [68]. Из рис. 20 видно, что динамическое уменьшение потенциала наиболее велико в средней части канала. Приближение (4.17), напротив, приводит к росту НП при увеличении энергии частиц.

Для нахождения теоретической зависимости $S(\omega)$ вычислялись частоты осцилляций по формуле (4.8), после чего амплитуда x_{max} исключалась с помощью

усредненной по периоду движения координатной зависимости тормозных потерь, взятой в виде

$$S(x, E) = 0,034 Z_{\text{эфф}}^2(E) \left(1 + \frac{16}{d_p^2} x^2\right) \frac{\text{МэВ}}{\text{мкм}}. \quad (4.18)$$

Формула (4.18) аппроксимирует результаты теоретического расчета тормозных потерь [273] для ионов He и I в кристалле Au. Как следует из рис. 19, теоретический расчет (штриховые кривые) правильно отражает главную особенность эксперимента — увеличение наклона β с возрастанием энергии. Некоторое завышение частот осцилляций ионов можно отнести к погрешности расчета потенциалов. Аналогичные вычисления для НП (4.17), показанные штрихпунктирными линиями, как и следовало ожидать, показывают уменьшение наклона β с увеличением энергии. Еще один аргумент в поддержку теории вытекает из сравнения тормозных способностей ионов I для разориентированного кристалла. Так, для энергий 15 и 60 МэВ соответствующие экспериментальные значения были равны 9 и 23,9 МэВ/мкм [274], т.е. возросли в 2,65 раза. В то же время квадрат заряда ионов возрос в $(22/13)^2 = 2,9$ раза. В соответствии с формулой (4.14) это различие можно связать с уменьшением высоты потенциального барьера на 10–15% вследствие зависимости ПВ от E . Это согласуется с наблюдавшимся в [265] сближением вычисленных и экспериментальных оценок $S_r(E)$ с увеличением энергии, поскольку теоретические значения тормозных потерь вычислялись для потенциала (4.17), возрастающего с возрастанием E : в этом случае рост $S_r(E)$ в соответствии с (4.14) происходит быстрее, чем дает зависимость $\propto Z_{\text{эфф}}^2$, вытекающая из (4.18) при усреднении по координате x , поэтому наблюдавшийся "дефицит" торможения при $E = 15$ МэВ уменьшился при $E = 60$ МэВ (см. данные табл. 3 в [2656]). Таким образом, зависимость $S(\omega) = \alpha + \beta\omega$ обусловлена, с одной стороны, динамикой движения ионов в канале, определяемой НП, а с другой — зависимостью торможения от координаты (4.18). Заметим, что при достаточно больших энергиях, когда ПВ начинает возрастать (см. раздел 2.7), параметр β в (4.7) уменьшается до асимптотического значения, соответствующего потенциалу (4.17) при $Z_{\text{эфф}} = Z_1$, поэтому измерения β при разных энергиях могли бы дать ценную информацию для уточнения зависимости ПВ от E .

4.6. Характеристическое излучение каналированных электронов и позитронов

При каналировании релятивистских лептонов волновая функция связанного движения удовлетворяет уравнению Шрёдингера [275–277]

$$-\frac{1}{2\gamma} \Delta_{\perp} \Psi(\mathbf{r})_{\perp} + [U(\mathbf{r}_{\perp}) - E_{\perp}] \Psi(\mathbf{r}_{\perp}) = 0, \quad (4.19)$$

где γ — фактор Лоренца,

$$\Delta_{\perp} = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2},$$

$\mathbf{r}(x, y)$ — поперечная проекция радиуса-вектора на плоскость x, y , перпендикулярную к направлению продольного движения, $U(\mathbf{r}_{\perp})$ — непрерывный потенциал (в случае плоскостного каналирования $\Delta_{\perp} = d^2/dx^2$). В

работах [112, 275, 278] показано, что для электронов с энергиями $E < 50$ МэВ при плоскостном и $E < 10$ МэВ при осевом каналировании уровни энергии E_{\perp} дискретны. Линии излучения, отвечающие спонтанным переходам между ними, с учетом релятивистского преобразования частоты соответствуют энергиям

$$E_{\gamma} = 2\gamma^2 \Delta E_{\perp}. \quad (4.20)$$

Неэквидистантность уровней E_{\perp} приводит к наличию в спектре отдельных пиков, что дает возможность судить о пространственной локализации излучающих частиц. Очевидно, спектр поперечных энергий и гамма-квантов однозначно определяется формой НП.

Сравнение экспериментальных и теоретических значений энергий E_{γ} , вычисленных для конкретных потенциалов, позволяет судить об их качестве. С другой стороны, экспериментальная информация может использоваться в целях диагностики потенциалов, электронной плотности в каналах, температур Дебая, анизотропии тепловых колебаний атомов решетки и других параметров [11, 280, 281, 186, 306, 307].

Излучение электронов при осевом каналировании в кристаллах алмаза и кремния наблюдалось в [283, 284], при плоскостном — в [285, 287, 288], а для позитронов — в [288, 290, 291]. Излучение в кристалле LiF исследовалось в [292, 293], а в некоторых других кристаллах сложного типа — в [285, 294, 295]. В расчетах спектральных линий чаще всего применялись потенциалы типа Дойля–Тернера (3.74), (3.75), а уравнение Шрёдингера (4.19) решалось методом плоских волн. В работах [296, 187, 298] применялось квазиклассическое приближение, а для позитронов — классический метод, так как при энергиях $E > 50$ МэВ число уровней связанного движения достаточно велико. В этих работах использовался плоскостной потенциал, соответствующий модели (2.25). В [299] применялся вариационный метод решения уравнения Шрёдингера с потенциалом Дойля–Тернера. Результаты теоретических расчетов энергий пиков излучения в целом хорошо согласуются между собой и с экспериментальными данными. В работах [287, 296, 187] обращалось, однако, внимание на то, что частоты, отвечающие максимумам излучения позитронов для потенциала Дойля–Тернера (ДТ) примерно на 7–10% превышали экспериментальные, тогда как для электронов расхождение в большинстве случаев не превышало 1–5%. В этом отношении НП для кусочно экспоненциальной модели (КЭМ) (2.25) оказывается более универсальным, что подтверждается данными табл. 5 и 6. Расчеты с потенциалом Мольера хуже согласуются с опытными данными. Заметим, что первоначальные расчеты НП с применением КЭМ были завышены [187] (в формуле (14) этой работы последнее слагаемое должно иметь знак "плюс").

Таблица 5. Энергии гамма-квантов E_{γ} (кэВ) в максимуме пика излучения каналированных позитронов. Результаты расчета для КЭМ, потенциала Мольера и ДТ

Плоскость	γ	Расчет			Эксперимент [290, 291]
		[296, 187]	[187]	[290, 291]	
(110) Si	111	42	40	44,2	42,5
(110) Si	107,4	38	37	41,6	38,8
(100) Si	111	45	45	46–51	46,7
(110) C	107,4	64	60	69,2	65,3
(110) Ge	107,4	49,5	—	52,2	48,1

Таблица 6. Энергии гамма-квантов E_γ (кэВ) при излучении каналированными электронами в направлении "вперед"

Плоскость	γ	Переход	Расчет*			Эксперимент [291, 292]
			[296, 187]	[300]	[291, 180]	
(110) Si	110,6	1–0	122,4	139,1	134	128
		2–1	94,8	101,4	96	94
		3–2	70,6	75,5	69	68
		4–3	53,8	58,2	53	52
		5–4	43,6	45,4	41	42
(110) Si	55,8	1–0	38,7	44,8	—	40
		2–1	26,8	28,9	—	25
		3–2	19,0	19,8	—	17
(100) Si	110,6	1–0	95,2	109,1	—	99
		2–1	66,3	72,3	—	64
		3–2	45,3	50,3	—	39
(100) Si	55,8	1–0	29,5	34,3	—	31
		2–1	17,6	17,3	—	21
(110) C	106,7	1–0	158,4	161**	163,8	161,8
		2–1	104,3	100**	108,3	104,4
		3–2	78,2	72**	79,0	78,4
		4–3	56,3	49**	60,4	58
(100) C	106,7	1–0	116,9	117**	120,6***	120
		2–1	65,1	57**	65***	65,4

* Результаты расчета в столбцах 4–6 соответствуют тем же потенциалам, что и в табл. 5 (в столбцах 4–6).
 ** По работе [276].
 *** По работе [301].

Данные, приведенные в табл. 5, 6, показывают, что потенциал ДТ систематически завышает не только энергии пика излучения позитронов, но также и энергии отдельных линий для электронов (особенно в случае перехода 1–0 в (100) и (110) Si). Приближение КЭМ, напротив, приводит к меньшим энергиям перехода 1–0. Эти расхождения нельзя отнести к неточности квазиклассического приближения, использованного в [296, 187], поскольку было показано [187], что погрешность этого метода в определении уровней поперечного движения не превышает 1% даже при энергиях 5–10 МэВ. Дополнительную проверку потенциалов дает сравнение сумм энергий отдельных переходов. Соответствующие табл. 6 значения приведены в табл. 7 и показывают, что в итоге КЭМ дает значения этих сумм, лишь на 1–2% отличающиеся от экспериментальных. Это связано с компенсацией "дефицита" энергий для переходов с низколежащих уровней соответствующим их "избытком" для более высоколежащих. Для потенциала ДТ расхождения немного больше и достигают 2,5–3%.

Таблица 7. Суммарные значения энергий гамма-квантов $\sum E_\gamma$ (кэВ) при плоскостном каналировании электронов

Плоскость	γ	Расчет*			Эксперимент
		1	2	3	
(110) Si	110,4	385,2	417,6	393	384
(110) Si	55,8	84,5	93,5	—	82
(100) Si	110,6	206,8	231,7	—	202
(110) C	106,7	397,2	382	411,5	402,6
(100) C	106,7	182	174	185,6	186,3

* Данные столбцов 1–3 соответствуют столбцам 4–6 табл. 6.

Эти результаты позволяют несколько иначе оценить попытку уточнения дебаевской температуры кристалла кремния в работе [285б], где для согласования теоретического и экспериментального значений энергий квантов в линии 1–0 принято значение 495 К вместо 543 К — обычно используемого значения, отвечающего данным рентгеновской дифракции [302, 303]. Более строгие расчеты, проведенные в [312], дали значения $\theta_D = 504$ К при $T = 298$ К и $\theta_D = 514$ К при $T = 110$ К. Заметим, что изменение θ_D практически влияет лишь на переход 1–0, не затрагивая других уровней. Делая такое же согласование для потенциала КЭМ, напротив, приходим к необходимости увеличения θ_D примерно до 575 К, причем согласие теоретического и экспериментального значений $\sum E_\gamma$ заметно ухудшится. Таким образом, пересмотр значений температуры Дебая не может быть сделан без критического выбора НП.

Аналогичные замечания можно сделать в связи с применением спектров излучения каналированных частиц для определения плотности электронов в канале [283] на основе уравнения Пуассона

$$\rho_e(\mathbf{r}_\perp) = \frac{1}{4\pi} \Delta_\perp V(\mathbf{r}_\perp). \quad (4.21)$$

Применяемый метод заключается в корректировке теоретических значений формфакторов потенциала в формуле (3.62) с целью согласования теоретического и экспериментального спектра. В математическом отношении такая процедура не совсем корректна, так как фурье-преобразование атомного фактора, представленного суммой гауссовых экспонент (3.72), не дает правильного оболочечного распределения потенциала и плотности электронов, отвечающего распределению Хартри–Фока. Кроме того, при корректировке формфакторов на

величину ΔV_g соответствующая функция определяется лишь для конечного числа векторов обратной решетки, и, следовательно, обратное фурье-преобразование к атомному потенциалу и электронной плотности в кристалле не является однозначным. В результате, как отмечалось также в [306], существует целый класс функций распределения электронной плотности и дебаевских температур, для которых можно достичь согласия теоретических и экспериментальных данных. Более последовательным методом, по мнению автора, представляется применение для соответствующих целей не модели ДТ, а аналитических аппроксимаций Хартри-Фока типа КЭМ, или Бонхэма-Стрэнда [321], причем корректировочная функция ΔV_g должна обеспечивать выполнение стандартных нормировочных условий, накладываемых на атомный потенциал и электронную плотность. Указанные модели дают корректные начальные приближения для решения этой задачи.

В [292, 293] коррекция формфакторов применялась также в расчетах спектров излучения в кристалле LiF, причем амплитуды тепловых колебаний ионов Li^+ и F^- отвечали разным значениям температур Дебая. Так, в [292] отношение амплитуд равнялось 1,28 вместо значения 1,65, вытекающего из соотношения $k_B \Theta_D \sim M_i u_i^2$ (M_i — масса иона, k_B — постоянная Больцмана). Это, а также несогласованность применяемых разными авторами значений Θ_D (особенно для кристаллов и сплавов сложного состава), затрудняет сравнение и интерпретацию получаемых результатов. Так, авторы работ [285, 293] пришли к выводу о том, что амплитуда тепловых колебаний иона F^- в кристалле LiF занижена вдвое, а в кристалле LiH амплитуды H, вдвое больше, чем D в LiD. Отмечалось (см. также [306]), что этот вывод подтверждает рис. 21, на котором показаны экспериментальные спектры излучения электронов с энергией 54,5 МэВ в канале (100) кристаллов LiH и LiD. Вывод основан на видимом сдвиге линий излучения в область более низких частот для LiH. Однако из теории следует, что изменение температуры Дебая (и амплитуды тепловых колебаний) заметно влияет лишь на частоту перехода 1–0, в то время как на рис. 21 наблюдается сдвиг всех линий. Кроме того,

при более высокой амплитуде тепловых колебаний ширина линий должна быть больше для кристалла LiH (ср., например, влияние температуры на спектры, показанные на рис. 7 в [306]), что также не согласуется с рис. 21. Таким образом, приходим к прямо противоположным выводам.

В [186] показано, что важную информацию о величине ионных зарядов атомов кристалла дает сравнение интенсивностей первых максимумов когерентного тормозного излучения (в случае плоскостных каналов, состоящих из плоскостей с ионами разного знака заряда, например (111) NaCl). Это обусловлено наличием в НП гармоник с периодами d_p и $2d_p$ (d_p — расстояние между плоскостями с ионами разного знака), причем фурье-гармоники большего периода пропорциональны ионным зарядам атомов кристалла. По мнению автора, применение спектров когерентного тормозного излучения в диагностических целях еще не получило должной оценки, между тем амплитуды пиков этого излучения непосредственно связаны с отдельными фурье-гармониками кристаллического потенциала, в отличие от спектров излучения при каналировании, формируемых суммарным потенциалом.

Следует отметить также ряд работ, посвященных спектральным характеристикам излучения каналированных частиц при учете дислокационных эффектов [315, 316] и влияния внешних периодических полей [277, 305, 307], а также прямому восстановлению потенциалов по спектрам [322, 323]. Последняя задача в математическом отношении является некорректно поставленной и требует дополнительного анализа.

В заключение можно сделать вывод о том, что хотя теория успешно объясняет наблюдаемые спектральные особенности излучения, применение этих данных в рамках нового диагностического метода требует выполнения довольно жестких требований к качеству потенциалов, с одной стороны, и расчетных моделей — с другой. В настоящее время эти условия в полной мере еще не удовлетворены.

5. Заключение

Из приведенного обзора видно, что концепция межатомных потенциалов находит широкое применение при изучении и интерпретации многочисленных явлений, связанных с прохождением пучков заряженных частиц в веществе, многие из которых (такие, как распыление, фазовые превращения при облучении, взаимодействие с поверхностями, энергетические потери при каналировании, деканалирование и др.) в силу ограниченности объема настоящего обзора были рассмотрены лишь частично или не затронуты совсем. Развита в последние 10–15 лет техника эксперимента позволяет проводить измерения различных величин, относящихся к пучку частиц, на уровне точности в несколько процентов (к ним относятся энергетические потери и пробеги, угловые и энергетические распределения, спектральные линии излучения при каналировании и т.д.). Результаты экспериментов способствовали формированию современных представлений о физической природе процессов торможения и каналирования частиц в веществе, излучения при каналировании и выхода вторичных процессов. Эти достижения привели к созданию новых экспериментальных методов измерения потенциалов взаимодей-

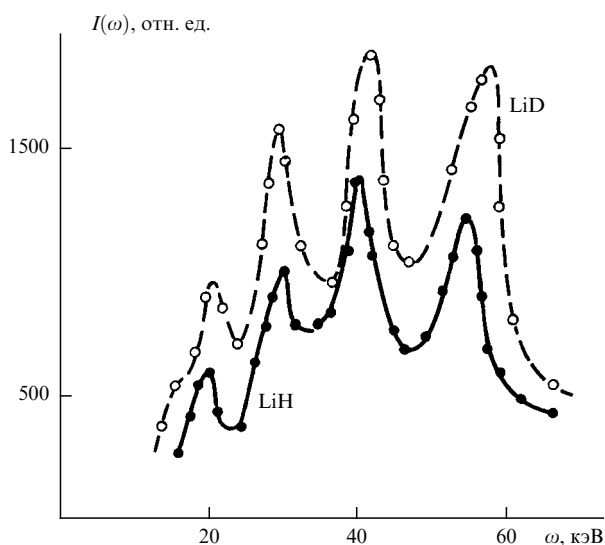


Рис. 21. Спектры излучения электронов с энергией 54,5 МэВ, каналированных в плоскости (100) кристаллов LiH и LiD [293, 295]

ствия и других величин, получение информации о которых является мощным инструментом зондирования твердых тел.

Вместе с тем, до сих пор имеются проблемы, касающиеся не только интерпретации экспериментов (это прежде всего эффекты Z_1 - и Z_2 -осцилляций сечений рассеяния, торможения и пробегов), но также и те, которые связаны с получением наиболее корректных теоретических потенциальных кривых в широком интервале межъядерных расстояний как в газовой фазе, так и в твердом веществе. Как показывает обзор, одним из вероятных направлений развития теории радиационных эффектов является возможность введения ПВ частица-твердое тело не только суммированием отдельных независимых вкладов, но также путем учета зарядовых состояний ионов, эффектов динамического экранирования, корреляции отдельных взаимодействий при малоугловом рассеянии и каналировании, а также электронной структуры атомов мишени. В случае малоуглового рассеяния и каналирования может оказаться существенной энергетическая зависимость потенциала, влияющая на тормозные потери через траектории движения. Таким образом, твердотельные эффекты можно учитывать на более ранней стадии включением их в потенциалы. Для успешного развития этого направления необходимо проведение дополнительных экспериментов, касающихся динамического экранирования и энергетических зависимостей ПВ для тяжелых ионов.

Другим теоретическим направлением, почти не затронутым в обзоре, является возможность учета неупругих каналов в процессах элементарных актов ион-атомного взаимодействия также путем включения их в потенциалы. Даже если это будет сделано в рамках модели непрерывного замедления, теория получит дополнительный импульс в своем развитии.

Список литературы

- Hirshfelder J O *Interatomic Potentials* (N.Y.: Wiley, 1967)
- Margenau H, Kestner N R *Theory of Interatomic Potentials* (London: Pergamon, 1971)
- Stoneham A, Tailor R *Interatomic Potentials Handbook* (Harwell, AERE-R 1025, 1981)
- Torrens I M *Interatomic Potentials* (N.Y.: Wiley, 1972)
- Robinson M T, Oen O S J. *Appl. Phys. Lett.* **2** 30 (1963)
- Robinson M T, Oen O S, in *Proc. Conf. Bombardment Ionique* (Paris: CNRS, 1961)
- Линдхард Й *УФН* **99** 249 (1969)
- Kumakhov M A *Phys. Lett. A* **57** 17 (1976)
- Мирошниченко И И и др. *Письма в ЖЭТФ* **29** 786 (1979)
- Kumakhov M A, Wedell R *Radiation of Relativistic Light Particles during Interaction with Single Crystals* (Heidelberg, Berlin, N.Y.: Spectrum Akademischer Verlag, 1991)
- Огнев Л И *УФН* **154** 691 (1988)
- Кирсанов В И *ЭВМ-эксперимент в атомном материаловедении* (М.: Энергоатомиздат, 1990)
- Никитин Е Е *Теория элементарных атомно-молекулярных процессов при атомных столкновениях в газах* (М.: Атомиздат, 1968)
- Смирнов Б М *Атомные столкновения и элементарные процессы в плазме* (М.: Энергоатомиздат, 1968)
- Behmenburg H *Progress in Atomic Spectroscopy* (Eds W Hanle, H Kleinpoppen) (N.Y.: Plenum Press, 1979)
- Duren R *Adv. At. Mol. Phys.* **16** 55 (1980)
- Шифф Л *Квантовая механика* (М.: Изд-во иностр. лит., 1959)
- Weeks J D, Hazi A, Rice S A *Adv. Chem. Phys.* **16** 283 (1969)
- Bardsley J N *Case Stud. At. Phys.* **4** 299 (1974)
- Baylis W E *Progress in Atomic Spectroscopy* (Eds W Hanle, H Kleinpoppen) (N.Y.: Plenum Press, 1979)
- Пич Дж в сб. *Атомы в астрофизике* (Ред. Ф Г Берк и др.) (М.: Мир, 1986)
- Гамбош П *Статистическая теория атома и ее применения* (М.: Изд-во иностр. лит., 1951)
- Фирсов О Б *ЖЭТФ* **32** 1464 (1957)
- Goodisman J, Yonei K *Int. J. Quant. Chem. Symp.* (9) 59 (1975)
- Фирсов О Б *Поверхность* (6) 30 (1984); *Rad. Eff.* **61** 73 (1982)
- Hund F *Zs. Phys.* **77** 12 (1932)
- Sheldon J W *Phys. Rev.* **99** 1291 (1955)
- Townsend J R, Handler G S J. *Chem. Phys.* **36** 3325 (1962)
- Gross E, Dreizler R M *Phys. Lett. A* **57** 131 (1976)
- Yonei K, Goodisman J J. *Chem. Phys.* **66** 4551 (1977)
- Roberts R E *Phys. Rev.* **170** 8 (1968)
- Plindov G I, Pogrebnya S K *Phys. Lett. A* **91** 219 (1982)
- Киржниц Д А *ЖЭТФ* **32** 115 (1957)
- Scott J *Phil. Mag.* **43** 859 (1952)
- Ermiler W C, Milliken R S, Wahl A C J. *Chem. Phys.* **60** 3031 (1977)
- Плиндов Г И, Погребня С К *Оптика и спектр.* **51** 610 (1981)
- Gaydaenko V I, Nikulin V K J. *Chem. Phys. Lett.* **7** 360 (1970)
- Gordon R G, Kim Y S J. *Chem. Phys.* **56** 3122 (1974); **60** 4332, 4323 (1974)
- Cohen J S J. *Chem. Phys.* **61** 2372 (1974)
- Clugston M J *Adv. Phys.* **27** 893 (1978)
- Wedephol P *Solid State Comm.* **4** 479 (1966)
- Wedephol P *Proc. Phys. Soc.* **92** 79 (1967)
- Dedkov G V *Nucl. Istr. Meth. B* **36** 14 (1989)
- Wang W, Parr R *Phys. Rev.* **16** 891 (1977)
- Dedkov G V *Rad. Eff.* **79** 43 (1983)
- Дедков Г В Деп. рукопись N7884-B88 (М.: ВИНТИ, 1988)
- Дедков Г В Деп. рукопись N8554-B88 (М.: ВИНТИ, 1988)
- Gärtner K, Hehl K *Phys. St. Sol. (b)* **94** 231 (1979)
- Wilson W D, Haggmark L G, Biersack J P *Phys. Rev. B* **15**, 2458 (1977)
- Biersack J P, Ziegler J F (a) *Nucl. Instr. Meth.* **194** 93 (1982); (b) In *Springer Series in Electrophys* (Springer, 1982) vol. 10, p. 122; (в) *Stopping Powers and Ranges of Ions in Matter* (Ed. J F Ziegler) (N.Y.: Pergamon, 1985) vol. 1
- Никюлин В К *ЖТФ* **41** 41 (1971)
- Pyper N C, Grant I P, Gerber R B *Chem. Phys. Lett.* **49** 479 (1977)
- Chia Shin C *Phys. Rev. A* **14** 919 (1976)
- Murphy D R, Wang W P J. *Chem. Phys.* **72** 479 (1980)
- Amdur I., Mason E A J. *Chem. Phys.* **22** 1071 (1954); **25** 630 (1956)
- Stwally W J. *Chem. Phys.* **55** 170 (1971)
- Smith R M, Rulis A M, Scoles G et al. *J. Chem. Phys.* **67** 152 (1977)
- Kramer H L et al. *J. Chem. Phys.* **53** 2792 (1970)
- Pena R et al. *J. Chem. Phys.* **72** 5269 (1980)
- Patil S H J. *Chem. Phys.* **86** 7000 (1987); **89** 6357 (1988)
- Ahlrichs R et al. *J. Chem. Phys.* **88** 6290 (1988)
- Wilson J W, Heinbockel J H, Outlaw R A J. *Chem. Phys.* **89** 929 (1988)
- Lee C H, Kim Y S J. *Chem. Phys.* **74** 6145 (1981)
- Pauling L *The Nature of Chemical Bond* (Ithaca: Cornell Univ, 1960)
- Фирсов О Б *ЖЭТФ* **33** 696 (1957)
- Moliere G Z. *Naturforsch. A* **2** 133 (1947)
- Lindhard J, Nielsen V, Scharff M K. *Dan. Vid. Selsk. Mat.-Fys. Medd.* **36** (10) (1968)
- Csavinszky P *Phys. Rev.* **166** 53 (1968); *Phys. Rev. B* **17** 917 (1978)
- Cesarvani R N, Varshni Y P *Phys. Rev. A* **23** 991 (1981)
- Lindhard J K. *Dan. Vid. Selsk. Mat.-Fys. Medd.* **34** (14) (1965)
- Tietz T Z *Naturforsch. A* **23** 191 (1968)
- Lima M A P, Ferreira I G *Phys. Rev. A* **22** 343 (1980)
- Green A, Sellin D, Zachor A *Phys. Rev. A* **184** 1 (1969)
- Комаров Ф Ф *Изв. вузов, физ.* (4) 70 (1973)
- Кумахов М А, Комаров Ф Ф *Энергетические потери и пробеги ионов в твердых телах* (Минск: Изд. БГУ, 1979)
- Halgren T A J. *Amer. Chem. Soc.* **114** 7827 (1992)
- Ihm G et al. *Phys. Rev. A* **42** 5244 (1990)
- Sandhya Devi K R, Garsia J D *Phys. Rev. A* **300** 600 (1984)
- Stich W, Ludde H J, Dreizler R M *Phys. Lett. A* **99** 41 (1983)
- Stich W, Ludde H J, Dreizler R M J. *Phys. B* **18** 1195 (1983)

81. Kramlich K, Grun N, Sheid W *J. Phys. B* **19** 1457 (1986)
82. Henne A et al. *J. Phys. B* **19** L361 (1986)
83. Bloch F *Z. Phys.* **81** 363 (1933)
84. Jensen J Z. *Phys.* **106** 620 (1985)
85. Horbatsch M, Dreizler R M *J. Phys. A* **300** 119 (1981); *J. Phys. B* **25** 3315 (1992)
86. *Теория неоднородного электронного газа* (Ред. С. Лундквист, Н Марч) (М.: Мир, 1986)
87. Ying S C, Smith K R, Kohn W *J. Vac. Sci. Technol.* **575** (1972)
88. Дедков Г В *Письма в ЖТФ* **7** 279 (1981)
89. Дедков Г В *ЖТФ* **52** 1486 (1982)
90. Dedkov G V *Rad. Eff.* (a) **62** 183 (1982); (б) **71** 271 (1983); (в) **103** 157 (1987)
91. Kaneko T S *Phys. St. Sol. (b)* **156** 49 (1981)
92. Dedkov G V *Rad. Eff. Lett.* **86** 127 (1984)
93. Seaton M J, Steenman-Clark L J *J. Phys. B* **10** 263 (1977)
94. Бор Н *Прохождение атомных частиц через вещество* (М.: Изд-во иностр. лит., 1950)
95. Ландау Л Д, Лифшиц Е М *Механика* (М.: Наука, 1988)
96. Мотт Н, Мессе Г *Теория атомных столкновений* (М.: Мир, 1969)
97. Леонас В Б *УФН* **107** 29 (1972)
98. Фирсов О Б *ЖЭТФ* **34** 447 (1958)
99. Everhart E, Stone G, Carbone F J *Phys. Rev.* **99** 1287 (1955)
100. Калиткин Н Н *Численные методы* (М.: Наука, 1978)
101. Lindhard J, Scharff M, Schiott H E K. *Dan. Vid. Selsk. Mat.-Fys. Medd.* **33** (14) (1963)
102. Winterbon K B *Rad. Eff.* (a) **37** 14 (1970); (б) **13** 215 (1972)
103. Carlton T S, Gittins C M *J. Chem. Phys.* **94** 2614 (1991)
104. Burenkov A F, Komarov F F, Temkin M M *Phys. St. Sol. (b)* **105** 201 (1981)
105. Biersack J P, Haggmark L J *Nucl. Instr. Meth. (a)* **174** 257 (1980); (б) **174** 711 (1982); (в) **174** 706 (1982)
106. Дедков Г В *ЖТФ* **54** 2042 (1984)
107. Дедков Г В *Дисс. ... докт. физ.-мат. наук* (Нальчик, 1992)
108. Готт Ю В, Явлинский Ю Н *Взаимодействие медленных частиц с веществом в плазменных исследованиях* (М.: Атомиздат, 1973)
109. Готт Ю В *Взаимодействие частиц с веществом в плазменных исследованиях* (М.: Атомиздат, 1973)
110. Ахмезер И А, Давыдов Л Н *УФН* **129** 239 (1979)
111. Ахмезер И А, Давыдов Л Н *Введение в теоретическую радиационную физику металлов и сплавов* (Киев: Наукова думка, 1985)
112. Оцуки Е Х *Взаимодействие заряженных частиц с твердыми телами* (М.: Мир, 1985)
113. Фирсов О Б *ЖЭТФ* **36** 1517 (1959)
114. Lindhard J, Scharff M K. *Dan. Vid. Selsk. Mat.-Fys. Medd.* **27** (5) (1953)
115. Lindhard J *ibid* **28** (8) (1954)
116. Lindhard J, Winther A *ibid* **34** (4) (1964)
117. Lindhard J, Scharff M *Phys. Rev.* **124** 128 (1961)
118. Cheshire I M, Dearnaley G, Poate J M *Phys. Lett. A* **27** 304 (1968)
119. Cheshire I M, Dearnaley G, Poate J M *Proc. Roy. Soc. (London) A* **317** 47 (1969)
120. Кессельман В С *ЖТФ* **41** 1708 (1971); **42** 1161 (1972)
121. Komarov F F, Kumakhov M A *Phys. St. Sol. (b)* **58** 389 (1973)
122. Баклицкий Б Е, Парилес Е С *ЖТФ* **56** 27 (1986)
123. Gertner I, Meron M, Rosner B *Phys. Rev. A* **21** 1191 (1980)
124. Iafraite G J, Ziegler J F, Nass M J *J. Appl. Phys.* **51** 984 (1980)
125. Latta B M, Scanlon P J *Phys. Rev. B* **13** 1370 (1976)
126. Ferrell T L, Ritchie R H *Phys. Rev. B* **16** 115 (1977)
127. Brandt W, Kitagawa M *Phys. Rev. B* **25** 5631 (1982)
128. Barberan N, Echenique P M *J. Phys. B* **19** L81 (1986)
129. Echenique P M *Nucl. Instr. Meth. B* **27** 256 (1987); **67** 66 (1992)
130. Дедков Г В, Шидов Е Х в *Тез. докл. 3-й Всесоюз. конф. по излучению заряженных частиц в кристаллах* (Нальчик, 1988) с. 144
131. Dettmann K, Robinson M *Phys. Rev. B* **10** 1 (1974)
132. Dettmann K Z. *Phys. A* **272** 227 (1975)
133. Kabachnik N M, Kondratiev V N, Chumanova O V *Phys. St. Sol. (b)* **145** 103 (1988)
134. Briggs J, Pathak A J. *Phys. C* **6** L153 (1973); **7** 1929 (1974)
135. Echenique P M, Nieminen R M, Ritchie R H *Solid State Comm.* **37** 779 (1981)
136. Мессе Г, Бархоп Е *Электронные и ионные столкновения* (М.: Изд-во иностр. лит., 1958)
137. Betz H D *Rev. Mod. Phys.* **44** 74 (1972)
138. Yarlagaadda B S, Robinson J E, Brandt W *Phys. Rev. B* **17** 3473 (1978)
139. Moneta M, Kaneko T, Czerbniak J *Nucl. Instr. Meth. B* **67** 77 (1992)
140. Юдин В В *Электронная техника. Сер. 2: полупроводниковые приборы* (4) 3 (1989)
141. Xia Yue-yuan, Tan Chun-yu *Nucl. Instr. Meth. B* **13** 100 (1986)
142. Kalbitzer S, Oetzmann H *Rad. Eff.* **47** 57 (1980)
143. Буренков А Ф и др. *Таблицы параметров пространственного распределения ионно-имплантированных примесей* (Минск: Изд-во БГУ, 1980)
144. Буренков А Ф и др. *Пространственное распределение энергии, выделенной в каскаде атомных столкновений* (М.: Энергоатомиздат, 1985)
145. Комаров Ф Ф *Ионная имплантация в металлы* (М.: Металлургия, 1990)
146. Biersack J P in *Abstr. of the 4-th All-Union Conf. of Radiation with Solids* (Moscow, 199) p. 41
147. Дедков Г В, Шидов Е Х в *Тез. докл. 17-го Всесоюз. совещ. по взаим. заряд. частиц с кристаллами* (М.: Изд-во МГУ, 1987) с. 43
148. Bothe H Z. *Phys.* **54** 101 (1939)
149. Компанец А С *ЖЭТФ* **15** 235 (1945) **17** 1059 (1947)
150. Meyer L *Phys. St. Sol. (b)* **44** 253 (1971)
151. Sigmund P, Winterbon K *Nucl. Instr. Meth.* **119** 541 (1974); **125** 491 (1975)
152. Fastrup B, Hvelplund P, Sautter C A K. *Dan. Vid. Selsk. Mat.-Fys. Medd.* **35** (10) (1966)
153. Besenbacher F et al. *ibid.* **40** (3) (1979)
154. Skoog R *Rad. Eff.* **27** 53 (1975)
155. Krist Th, Mertens P, Biersack J P *Nucl. Instr. Meth. B* **2** 177 (1984)
156. Moliere G Z. *Naturforsch. A* **3** 78 (1948)
157. Sharma S, Makherjee S *Phys. Lett. A* **60** 195 (1977)
158. Brandt W *At. Collis. in Solids* (N.Y.: Plenum, 1975) vol. 1, p. 261
159. Neelavathi V N, Ritchie R H *ibid.* vol. 1, p. 289
160. Neufeld J, Ritchie R H *Phys. Rev.* **98** 1632 (1955)
161. Neelavathi V N, Kher R *Phys. Rev. B* **14** 4229 (1976)
162. Jakubassa D H J. *Phys. C* **18** 4491 (1977)
163. Echenique P M, Ritchie R H, Brandt W *Phys. Rev. B* **20** 2567 (1979)
164. Guinea F, Flores F *Phys. Rev. B* **25** 6109 (1982)
165. Echenique P M *Nucl. Instr. Meth. B* **27** 256 (1987)
166. Dedkov G V, A. Zh. Nasipov *Rad. Eff. Lett.* **87** 37 (1985)
167. Дедков Г В, Насипов А Ж *ЖТФ* **56** 660 (1986)
168. Дедков Г В, Насипов А Ж *Деп. рукопись N2117-B87* (М.: ВИНТИ, 1987)
169. Calkin M J, Nikolson P J *Rev. Mod. Phys.* **39** 361 (1967)
170. Kitagawa M, Ohtsuki Y H *Phys. Rev. B* **9** 4719 (1974)
171. Alfred L C R, March N H *Phil. Mag.* **2** 985 (1957)
172. Corless J K, March N H *ibid.* **6** 1285 (1961)
173. Lehmann C, Leibfrid G J. *Appl. Phys.* **34** 2821 (1963)
174. Lindhard J *Phys. Lett.* **12** 126 (1964)
175. Erginsoy C *Phys. Rev. Lett.* **15** 360 (1965)
176. Gemmell D S *Rev. Mod. Phys.* **46** 129 (1974)
177. Appleton B R, Erginsoy C, Gibson W M *Phys. Rev.* **161** 330 (1967)
178. Barrett J *Phys. Rev. B* **3** 1527 (1971)
179. Авакян А Л, Жеваго Н К, Ян Ши *ЖЭТФ* **82** 573 (1982)
180. Andersen J E, Eriksen K R, Laegsgaard E *Phys. Scripta* **24** 588 (1981)
181. Andersen J E et al. *Phys. Scripta* **28** 308 (1983)
182. Andersen J E, Laegsgaard E, Sorensen A H *Nucl. Instr. Meth. B* **2** 63 (1984)
183. Klein R K et al. *Phys. Rev. B* **31** 68 (1985)
184. Doyle T A, Turner P S *Acta Crystallogr. A* **24** 390 (1968)
185. Andersen J E et al. *Nucl. Instr. Meth.* **194** 209 (1982)
186. Dedkov G V, Nasipov A Zh *Nucl. Instr. Meth. B* **51** 383 (1991)
187. Dedkov G V, Shidov E Kh *Phys. St. Sol. (b)* **130** 719 (1986)
188. Kawai R, Iton N, Ohtsuki Y H *Surf. Sci.* **114** 137 (1982)
189. Ohtsuki Y H *Ann. Meeting of Phys. Soc. Jap* (1978)

190. Ohtsuki Y H, Koydyma K, Yamamura Y *Phys. Rev. B* **20** 5044 (1979)
191. O'Hori T, Ohtsuki Y H *Phys. Rev. B* **15** 3240 (1982)
192. Kononets Yu V, Yamankuzov N K *Nucl. Instr. Meth. B* **2** 46 (1984)
193. Ritchie R H, Marusak A L *Surf. Sci.* **4** 234 (1966)
194. Heinrichs J *Phys. Rev. B* **8** 1346 (1973)
195. Harris J, Jones R O J. *Phys. C* **7** 3751 (1974)
196. Hodges C H J. *Phys. C* **8** 1849 (1975)
197. Muscat J P, Newns D M *Surf. Sci.* **64** 641 (1977)
198. Ferrell T L, Echenique P M, Ritchie R H *Solid State Comm.* **32** 419 (1991)
199. Nunez R, Echenique P M, Ritchie R H J. *Phys. C* **13** 4229 (1980)
200. Suzuki K, Kitagawa M, Ohtsuki Y H *Phys. St. Sol. (b)* **82** 643 (1977)
201. Бериш Р *Фундаментальные и прикладные аспекты распыления твердых тел* ч. 1 (М.: Мир, 1984); ч. 2 (М.: Мир, 1986)
202. Кумахов М А, Сабиров А С *Поверхность* (6) 36 (1986); (9) 20 (1986)
203. Kumakhov M A, Sabirov A S *Rad. Eff.* **107** 197 (1989)
204. Robinson M T, Torrens I M *Phys. Rev. B* **9** 5008 (1976)
205. Oen O S *Surf. Sci.* **131** L407 (1983)
206. Daley R S, Huang H J, Williams R S *Surf. Sci.* **215** 281 (1989)
207. Бараш Ю С, Кясов А А *ЖЭТФ* **95** 69 (1989)
208. Кясов А А, в кн. *Экстремальные состояния вещества* (М.: ИФВТАН, 1992) p. 122
209. Connor J F G, Biersack J P *Nucl. Instr. Meth. B* **15** 14 (1986)
210. Biersack J P *Nucl. Instr. Meth. B* **27** 21 (1987)
211. Kühr E, Wedell R *Phys. Lett. A* **86** 54 (1981)
212. Sigmund P *Nucl. Instr. Meth. B* **27** 1 (1987)
213. Gombasson P et al. *Rad. Eff.* **36** 149 (1978)
214. Biersack J P, Stadle M *Rad. Eff.* **64** 51 (1982)
215. Izsack K, Berthold J, Kalbitzer S *Nucl. Instr. Meth. B* **15** 34 (1986)
216. Byster M, Hautala M, Jantti M *Rad. Eff.* **42** 201 (1979)
217. Andersen J E *Specialeogve i fys.* (Aarhus: Phys. Inst. Univ., 1975)
218. Loftager P et al. *Phys. Rev. A* **20** 1443 (1978)
219. Berthold J, Kalbitzer S *Nucl. Instr. Meth.* **209/210** 13 (1983)
220. Fichtner P F P et al. *Rad. Eff. Lett.* **87** 191 (1986); **85** 250 (1984)
221. Behar M et al. *Rad. Eff.* **90** 103 (1985); *Nucl. Instr. Meth. B* **6** 453 (1985)
222. Gärtner K, Hehl K *Phys. St. Sol. (b)* **108**, K109 (1981)
223. Чубисов М А, Аккерман А Ф в *Тр. 7-й Межд. конф. по ионной имплантации в полупроводниковых и других материалах* (Вильнюс, 1983) с. 223
224. Шлотцхауэр Г и др. в *Тр. 13-го Всесоюз. совещ. по взаимодействию заряженных частиц с кристаллами* (М.: Изд-во МГУ, 1984) с. 53
225. Burenkov A F et al. *Rad. Eff. Lett.* **68** 153 (1984)
226. Freitag K, Reschke D, Geyer E *Nucl. Instr. Meth. B* **27** 344 (1987)
227. Lennard W et al. *ibid.* **13** 127 (1986)
228. Fastrup B, Hvelplund P, Sautter S K. *Dan. Vid. Selsk. Mat.-Fys. Medd.* **35** (10) (1966)
229. Hvelplund P, Fastrup B *Phys. Rev.* **165** 408 (1968)
230. Eisen F *Can. J. Phys.* **46** 561 (1968)
231. Афросимов В В и др. *ЖЭТФ* **62** 848 (1972)
232. Ishivari R, Shiomi N, Sakamoto N J. *Phys. Soc. Jpn.* **39** 557 (1975)
233. Ishivari R, Shiomi N, Sakamoto N *Phys. Rev. A* **25** 2524 (1982)
234. Mertens P *Nucl. Instr. Meth. B* **27** 301 315 (1987)
235. Грачев Б Д и др. *ЖЭТФ* **79** 1641 (1980)
236. Грачев Б Д и др. в *Матер. 16-го Всесоюз. совещ. по взаимодействию заряженных частиц с кристаллами* (М.: Изд-во МГУ, 1987) с. 65
237. Gras-Marti A *Nucl. Instr. Meth. B* **9** 1 (1985)
238. Кабачник Н М, Кондратьев В Н, Чуманова О В в *Матер. 16-го Всесоюз. совещ. по взаимодействию заряженных частиц с кристаллами* (М.: Изд-во МГУ, 1987) с. 68
239. Бедняков А А и др. там же, с. 76
240. Schwabe S, Stolle R *Phys. St. Sol. (b)* **47** 111 (1971)
241. Krygel P, Lippold J, Schwabe S *ibid.* **53** 255 (1972)
242. Andersen H, Bottiger J, Knudsen H *Rad. Eff.* **13** 203 (1972)
243. Andersen H et al. *Phys. Rev. A* **10** 1568 (1974)
244. Davies J A, Denhartog J, Whitton J L *Phys. Rev.* **165** 345 (1968)
245. Winter H *Nucl. Instr. Meth. B* **2** 286 (1984)
246. Derry T E, Fearick R W, Sellshop J P F *ibid.* **24** 3675 (1981); **26** 17 (1982)
247. Bergstrom I et al. *Can. J. Phys.* **46** 2679 (1968)
248. Аброян И А и др. *ФТТ* **11** 3376 (1969)
249. Grahmann H, Feuerstein A, Kalbitzer S *Rad. Eff.* **29** 117 (1976)
250. Apel P, Muller-Jahreis U *Phys. St. Sol. (a)* **33** K129 (1976)
251. Van Gorkum A A *Phys. Lett. A* **75** 134 (1979)
252. Kornelsen E V, van Gorkum A A in *Proc. 8-th Int. Conf. At. Collis. in Solids* (Hamilton, 1979)
253. Datz S, Noggle T S, Moak C D *Phys. Rev. Lett.* **15** 254 (1965)
254. Culbertson R J, Withrow S P, Barrett J H *Nucl. Instr. Meth. B* **2** 19 (1984)
255. Bogh E *Rad. Eff.* **12** 13 (1972)
256. Poizat J.-C., Remilleux M J. *Phys. (Paris)* **33** 1013 (1972)
257. Abel F et al. *C.R. Acad. Sci. (Paris)* **276** 267 (1973)
258. Abel F et al. *Phys. Rev. B* **12** 4617 (1975)
259. Kaufmann E N *Phys. Rev. B* **17** 1024 (1978)
260. Kühr E, Taubner F *Phys. St. Sol. (a)* **61** 513 (1980)
261. Roosendaal H E et al. *Nucl. Instr. Meth.* **170** 119 (1980)
262. Roosendaal H E et al. *Phys. St. Sol. (b)* **107** 677 (1981)
263. Edge R et al. *Nucl. Instr. Meth.* **194** 133 (1982)
264. Barrett J H *Phys. Rev. B* **3** 1527 (1971)
265. Robinson M T (a) *Phys. Rev.* **179** 327 (1969); (б) *Phys. Rev. B* **4** 1461 (1971)
266. Steenstrup S, Pathak A P *Rad. Eff.* **55** 17 (1981)
267. Pathak A P *Phys. St. Sol. (b)* **122** 171 (1984)
268. Moak C D et al. *Phys. Rev. B* **5** 4406 (1982)
269. Gibson W M, Golovchenko J *Phys. Rev. Lett.* **28** 1301 (1972)
270. Datz S et al. *Phys. Rev.* **179** 315 (1969)
271. Appleton B R et al. *Phys. Rev. Lett.* **54** 1452 (1971)
272. Moak C D et al. *Phys. Rev.* **176** 427 (1968)
273. Ohtsuki Y H, Nitta H *Phys. Lett. A* **93** 94 (1982)
274. Moak C D, Brown M D *Phys. Rev.* **149** 244 (1966)
275. Wedell R *Phys. St. Sol. (b)* **99** 11 (1980)
276. Beloshitsky V V, Komarov F F *Phys. Rep.* **93** 117 (1982)
277. Дедков Г В *ЖТФ* **64** 96 (1994); Dedkov G V *Phys. St. Sol. (b)* **184** 535 (1994)
278. *Coherent Radiation Sources* (Eds A W Saenz, H Uberall) (Berlin, Heidelberg, New-York, Tokyo: Springer-Verlag, 1985) (Topics on Current Physica vol. 38)
279. De Vries P L J. *Opt. Soc. Amer. B* **7** 517 (1990)
280. Pathak A P *Phys. Rev. B* **31** 1633 (1984)
281. Pathak A P, Balagari P K J *Rad. Eff.* **100** 105 (1986)
282. Keo H, Shin K J, Kim Y S *Bull. Korean Chem. Soc.* **10** 239 (1989)
283. Andersen J U et al. *Phys. Rev. Lett.* **49** 215 (1982)
284. Andersen J U, Laegsgaard E, Sorensen A H *Nucl. Instr. Meth. B* **2** 63 (1984)
285. Berman B L et al. *Nucl. Instr. Meth. B* (a) **10/11** 611 (1985); (б) **13** 19 (1986)
286. Tang X, Rudolph H, Lambropoulos P *Phys. Rev. Lett.* **65** 3269 (1990)
287. Swent R L et al. *Nucl. Instr. Meth.* **194** 235 (1982)
288. Park H et al. *Phys. Lett. A* **96** 451 (1983); **96** 45 (1983)
289. Pindzola M S, Bottrell C J, Bottcher C J. *Opt. Soc. Amer. B* **7** 659 (1990)
290. Alguard M J et al. *Phys. Rev. Lett.* **42** 1148 (1979)
291. Datz S et al. *Phys. Lett. A* **96** 314 (1983)
292. Berman B L et al. *Phys. Rev. Lett.* **49** 474 (1982)
293. Swent R L et al. *Phys. Rev. B* **29** 52 (1984)
294. Pantell R H, Kephart J O in *Relativistic Channeling* (Eds R A Carrigan, J A Ellison) (New York: Plenum Press, 1987) p. 454; *Charged Particle Channeling and Radiation* (Villa Del Mare, Italy, 1986) p. 2
295. Berman B L et al. *Bull. Amer. Phys. Soc.* **30** 373 (1985)
296. Dedkov G V, Shidov E Kh *Rad. Eff. Lett.* **85** 111 (1984)
297. Mason E A, Daniel E W *Transport Prop. of Ions in Gases* (New York: Wiley, 1988) ch. 8
298. Dedkov G V, Gorshokov A M *Phys. St. Sol. (b)* **17** 57 (1983)
299. Horiata K, Yamamura Y *Rad. Eff.* **81** 71 (1984); **100** 19 (1986)
300. Komaki K, Fujimoto F *Rad. Eff.* **56** 13 (1981)
301. Klein P K et al. *Phys. Rev. B* **31** 68 (1985)
302. Batterman B W, Chipman D R *Phys. Rev.* **127** 690 (1962)
303. Nielsen O H, Weber W J. *Phys. C* **13** 2449 (1980)
304. Мальшевский В С *Автореф. дисс. ... докт. физ.-мат. наук* (Ереван, ЕРФИ, 1990)
305. Высоцкий В И, Кузьмин Р Н *УФН* **162** 1 (1992)

306. Базылев В А, Жеваго Н К *УФН* **160** 47 (1990)
307. Базылев В А, Жеваго Н К *Излучение быстрых частиц в веществе и во внешних полях* (М.: Наука, 1987)
308. Рябов В А *Эффект каналирования* (М.: Энергоатомиздат, 1994)
309. Akhiezer A I, Truten' V I, Shul'ga N F *Phys. Rep.* **203** (5) (1991)
310. Krause H F, Datz S, Dittner P F et al. *Phys. Rev. B* **33** 6036 (1986)
311. Neskovic N *Phys. Rev. B* **33** 6030 (1986)
312. Nau L V, Laegsgaard E, Andersen J U Preprint Inst. Phys. (Aarhus, 1989)
313. Шульга Н Ф, Трутень В И, Фомин С П *ЖТФ* **52** 2279 (1982); *Rad. Eff.* **84** 182 (1985)
314. Ахизер А И, Шульга Н Ф *УФН* **137** 561 (1982)
315. Pathak A P *Rad. Eff.* **61** 1 (1982)
316. Balagari P K J, Pathak A P *Phys. St. Sol. (b)* **41** K15 (1987); *Rad. Eff.* **100** 105 (1987)
317. Малышевский В С, Трутень В И, Шульга Н Ф *ЖЭТФ* **93** 570 (1987)
318. Kirilyuk A P *Nucl. Instr. Meth. B* **69** 200 (1992)
319. Высоцкий В И, Кузьмин Р Н, Максютя Н В *Взаимодействие мёссбауэровского излучения с веществом* (М.: Изд-во МГУ, 1987)
320. Окорочков В В *Письма в ЖЭТФ* **2** 175 (1965)
321. Bonham R, Strand T G *J. Chem. Phys.* **39** 2000 (1963)
322. Swent R L, Pantell R H *J. Appl. Phys.* **52** 3403 (1981)
323. Mikheev S A *Kristallografiya B* **38** 28 (1993)
324. Kobayashi K, Terakura K *J. Miner. Soc. Jpn.* **21** 211 (1992)
325. Deb B M, Chattaraj P K *Phys. Rev. A* **45** 42 (1992); *J. Phys. B* **26** 3447 (1993)
326. Irle S et al. *Ber. Bunsenges Phys. Chem.* **96** 1545 (1992)
327. Echenique P M, Flores F, Ritchie R H *Solid State Phys.* **43** 229 (1990)
328. Jablonski A *Physica A* **183** 361 (1992)
329. Kudella F, Kerkow H, Wedell R *Rad. Eff.* **41** 47 (1979)
330. Abbas M, Kerkow H, Wedell R *Phys. St. Sol. (b)* **159** 597 (1990)
331. Kerkow H, Wedell R *Rad. Eff.* **125** 42 (1993)
332. Wang You-Nian, Ma Teng-Cai, Cui Tao *J. Appl. Phys.* **73** 4257 (1993); *Phys. Lett. A* **167** 287 (1992)
333. Дедков Г В *Письма в ЖТФ* **21** 68 (1995)
334. Mason E, Viehland L J *J. Chem. Phys.* **23** 7125 (1990)

INTERATOMIC INTERACTION POTENTIALS IN RADIATION PHYSICS

G.V. Dedkov

State University of Kabardin Balcar Autonomous Republic 360000, Nalchik, Russia

Fax: (7-095) 337-95 55

E-mail: dedkov@cs.kbgu. nalchik.su

Current theoretical models in calculating pair interatomic and averaged interaction potentials with solid atoms and their applications in radiation physics are discussed. Side by side with well-known traditional static approximations the nonstationary theories and quasistatic generalization of the electron gas model accounting for the relative motion velocity v_1 of atoms are considered. Moreover, the ionization effects and dynamical screening of potentials by electron gas are taken into account. Detailed comparison of theoretical and experimental results is made concerning the energy losses, ranges and multiple scattering of ions in solids, energy losses of heavy ions at planar channeling, channeling radiation lines of relativistic electrons and positrons, etc.

PACS numbers: **34.20.-b**

Bibliography — 332 references

Received 4 April 1994, revised 25 January 1995