Доклады Академии наук СССР
1973. Том 212, № 4

УДК 537.1.026+537.311.33:539.16.04 — *ФИЗИКА*

В. В. БЕЛОШИЦКИЙ, М. А. КУМАХОВ

МНОГОКРАТНОЕ РАССЕЯНИЕ КАНАЛИРОВАННЫХ ИОНОВ В КРИСТАЛЛЕ. ПЛОСКОСТНОЕ КАНАЛИРОВАНИЕ

(*Представлено академиком И. М. Лифшицем 10 I 1973*)

В работе Ю. Кагана и Ю. В. Кононца ([1]) рассматривался эффект каналирования на основе квантового формализма матрицы плотности, в ней получены угловые распределения при малой толщине кристалла без учета неупругих процессов. Для тяжелых заряженных частиц классическое описание, как было показано Линдхардом ([2]), является вполне удовлетворительным. Классический подход дает возможность включить в рассмотрение неупругие процессы и проанализировать движение частиц в толстых кристаллах. Линдхардом ([2]) было рассмотрено аксиальное каналирование вдоль кристаллографических осей. Каналирование на больших глубинах им не рассматривалось. Эта задача рассматривалась в нашей работе ([3]).

В данной работе будет рассмотрено каналирование между атомными плоскостями на больших глубинах. Между аксиальным и плоскостным каналированием имеется важное различие в силу того, что при движении вдоль плоскости под большим углом к кристаллографическим осям последовательные столкновения, в отличие от аксиального случая, происходят с самыми различными прицельными параметрами. Поэтому ядерное рассеяние, кроме направляющего действия, оказывает, в противоположность аксиальному каналированию, существенное влияние на диффузию частиц по поперечной энергии даже при выключении из рассмотрения тепловых колебаний.

Усреднение уравнения диффузии по траекториям частиц при плоскостном каналировании приводит к следующему уравнению типа Фоккера — Планка *:

$$\frac{\partial F}{\partial t}=\frac{\partial^2}{\partial E_y^2}\left[\left\langle 2\frac{\overline{\Delta E_y}}{\Delta t}(E_y-Y(y))\right\rangle F\right]-\frac{\partial}{\partial E_y}\left[\left\langle\frac{\overline{\Delta E_y}}{\Delta t}\right\rangle F\right]-$$
$$-\frac{\partial}{\partial E_y}\left[\left\langle\frac{1}{E}\frac{\overline{\Delta E}}{\Delta t}(E_y-Y(y))\right\rangle F\right]-\frac{\partial}{\partial E}\left[\left\langle\frac{\overline{\Delta E}}{\Delta t}\right\rangle F\right],\qquad(1)$$

где $dN=F(E_y,\ E)dE_y\,dE$ есть число частиц, находящееся на $dEdE_y$, E — полная энергия, E_y — поперечная энергия частицы, Y — потенциал атомной плоскости, t — глубина; угловые скобки обозначают осреднение по периоду колебания частицы: $\overline{\Delta E_y}/\Delta t=E\overline{\Delta\theta_y^2}/\Delta t$, где $\overline{\Delta\theta_y^2}/\Delta t$ — y-компонента среднеквадратичного угла рассеяния на ядрах и электронах. Из сравнения (1) со стандартной формой уравнения Фоккера — Планка по-

* Так как нас интересовал уход частиц из канала, при выводе (1) опущены члены, связанные с уширением пучка вдоль атомной плоскости.

лучаем соотношение

$$\frac{1}{2}\left\langle \frac{\overline{\Delta E_y^2}}{\Delta t} \right\rangle = \left\langle 2\frac{\overline{\Delta E_y}}{\Delta t}(E_y - Y)' \right\rangle. \tag{2}$$

Отсюда следует, что

$$T\left\langle \frac{\overline{\Delta E_y}}{\Delta t} \right\rangle = \frac{1}{2}\frac{\partial}{\partial E}\left(T\left\langle \frac{\overline{\Delta E^2}}{\Delta t} \right\rangle\right), \tag{3}$$

где T — период колебания частицы между плоскостями.

Третий член уравнения (1) соответствует уменьшению поперечной энергии, связанному с уменьшением полной энергии:

$$\left\langle \frac{\overline{\Delta E}}{\Delta t} \right\rangle_{\text{loss}} = \left\langle \frac{1}{E}\frac{\overline{\Delta E}}{\Delta t}(E_y - Y) \right\rangle. \tag{4}$$

При энергиях $\geqslant 1$ Мэв можно пренебречь третьим и четвертым членами и, воспользовавшись соотношением (3), получить уравнение в более компактной форме:

$$\frac{\partial F}{\partial t} = \frac{1}{2}\frac{\partial}{\partial E_y}\left[\left\langle \frac{\overline{\partial E_y^2}}{\Delta t} \right\rangle T \frac{\partial}{\partial E_y}\left(\frac{F}{T}\right)\right]. \tag{5}$$

В отличие от аксиального случая [3] здесь в уравнение входит не размер доступной области, а период колебаний, что связано с различием в равновесном распределении по сечению канала и обусловлено, в конечном счете, различным числом измерений.

Найдем теперь изменение $\langle \overline{\Delta E_y / \Delta t} \rangle$ из-за ядерного рассеяния. Легко показать, что

$$\left\langle \frac{\overline{\Delta E_y}}{\Delta t} \right\rangle = N d_p \int\limits_{y_0}^{d_p/2} n(E_y, y_1)\, dy_1 \int\limits_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{-y_2^2/2\bar{u}_1^2} dy_2}{\sqrt{\pi 2\bar{u}_1^2}} \int\limits_{-\infty}^{\infty} E\varphi_y^2\, dz, \tag{6}$$

d_p — расстояние между плоскостями; $\bar{u}_1^2$ — среднеквадратичная амплитуда теплового колебания атома, перпендикулярная плоскости; $n(E_y, y)$ — распределение частиц по сечению канала [2]; y_0 определяется из условия $E_y = Y(y_0)$, φ_y — y-компонента угла рассеяния на ядре.

Расчет интеграла (6) проведем с точностью до членов $\bar{u}_1^2/y_0^2$. Когда потенциал взаимодействия частицы с ядром берется в виде $V(r) = Z_1 Z_2 \times \times e^2 c^2 a^2/(2r^3)$ (этому потенциалу соответствует плоскостной потенциал $Y = \pi_1 Z_1 Z_2 e^2 N d_p c^2 a^2/y$; $c^2 \approx 3$, a — параметр экранирования), получаем

$$\left\langle \frac{\overline{\Delta E_y}}{\Delta t} \right\rangle \approx \Gamma\left[S + \frac{15\bar{u}_1^2}{y_0^2}\left(\frac{80}{99} + \frac{1}{11\delta^5} + \frac{10}{99}\cdot\frac{1}{\delta^4}\right)\right]; \tag{7}$$

$$S = \frac{1}{7}\left[\frac{1}{\delta^3} + \frac{1}{\delta^2} + \frac{1}{3\delta} + \frac{8}{3}\right], \qquad \delta = \frac{d_p}{2y_0},$$

где

$$\Gamma = \left(\frac{a}{y_0}\right)^4 \frac{30\pi N d_p Z_1^2 Z_2^2 e^4 c^4 \delta^{-1/2} (\delta - 1)^{1/2}}{96 E y_0 [\sqrt{\delta}(\delta-1)^{1/2} + \ln|\sqrt{\delta} + (\delta-1)^{1/2}|]}$$

Первый член в (7) обусловлен дискретностью решетки, второй — тепловыми колебаниями. Как видно, отношение этих членов > 1.

Расчет $\langle \overline{\Delta E_y / \Delta t} \rangle$ был проведен также для случая, когда $E\varphi_y^2$ в (6) оценивался на основе потенциала Мольера. Плоскостной потенциал при этом аппроксимировался в виде $Y = Y_0/(1 + y^2 g^{-2} a^{-2}{}_1$, $g^2 \approx 2$,

$$Y_0=2\pi Z_1Z_2e^2aNd_p,$$

$$\left\langle \frac{\overline{\Delta E_y}}{\Delta t}\right\rangle \approx \frac{\pi N Z_1^2 Z_2^2 e^4}{6Ep^4}\left[1+\frac{12\bar{u}_1^2}{a^2}\cdot\frac{1}{p^2}\right]; \tag{8}$$

$$p^2=g^2\left(\frac{Y_0}{E_y}-1\right)\approx g^2\frac{Y_0}{E_y}.$$

Расчет диффузионных коэффициентов проводился в гармоническом приближении, когда потенциал брался в виде $Y=k(d_p/2-y)^2$, где k — коэффициент пропорциональности. В этом случае коэффициент диффузии для электронного и ядерного рассеяния можно получить в явном виде:

$$D_e=\frac{1}{2}\left\langle\frac{\overline{\Delta E_y^2}}{\Delta t}\right\rangle_e=\frac{m}{4M}E_y\left\langle\frac{\overline{\Delta E}}{\Delta t}\right\rangle, \tag{9}$$

где $\langle\overline{\Delta E}/\Delta t\rangle$ — потери энергии в канале, которые считаются не зависящими от E_y, и

$$D_n=\frac{1}{2}\left\langle\frac{\overline{\Delta E_y}^2}{\Delta t}\right\rangle_n=\frac{90\sqrt{2}\,Z_1^2Z_2^2e^4N}{E}\left(\frac{a}{d_p}\right)^4\frac{E_y}{(1-4b^2)^3}\times$$
$$\times\left\{\frac{1-b^2}{\sqrt{1-2b^2}}\left(\frac{\pi}{2}+\arcsin 2b\right)+b\left(\frac{19}{6}-\frac{91b^2}{6}+16b^4\right)\right\}, \tag{10}$$

где $b=\sqrt{E_y/(Kd_p^2)}$, причем $b\leqslant{}^1/_2$.

На «время удержания» основной массы частиц в канале при нормальном падении пучка на кристалл влияет, главным образом, значение коэффициента диффузии в центре канала, т. е. электронный коэффициент диффузии D_e. Уравнение (5) решалось с электронным коэффициентом диффузий (9). При этом получаем при граничном условии $F(t, E_{yc})=0$ (E_{yc} — критическая поперечная энергия) следующее решение:

$$F=\sum_{n=1}^{\infty}a_nJ_0\left(\mu_{0,n}\sqrt{\frac{E_y}{E_{yc}}}\right)\exp\left[-\mu_{0,n}^2\frac{m}{16M}\frac{|\Delta E|}{E_{yc}}\right], \tag{11}$$

где

$$a_n=[E_{yc}J_1^2(\mu_{0,n})]^{-1}\int_0^{E_{yc}}F_0(E_y)J_0\left(\mu_{0,n}\sqrt{\frac{E_y}{E_{yc}}}\right)dE_y, \tag{12}$$

F_0 — начальная функция распределения; J_0, J_1 — функция Бесселя, $\mu_{0,n}$ — n-й корень J_0; ΔE — потерянная энергия. Число частиц вне канала (функ-

Таблица 1

Глубина $x_{1/2}$, на которой половина каналированного пучка протонов в вольфраме покидает канал

Направление	Энергия, Мэв	$x_{1/2}$, μ	
		теор.	эксп. (4)
{100}	2	1,5	1,3
	3	2,2	2,8
	6	4,4	4,0
{111}	2	2,6	2,7
	3	3,9	4,1
	6	7,8	8,8

ция деканалирования)

$$I = 1 - \sum_n a_n \mu_{0,n}^{-1} 2E_{yc} J_1(\mu_{0,n}) \exp(-|\Delta E|/\tau_{E,n}), \qquad (13)$$

где $\tau_{E,n} = E_{y,c} \mu_{0,n}^2 16M/m.$

В табл. 1 приведен расчет глубин $x_{1/2}$, на которых число частиц в канале уменьшается вдвое.

Как видно из табл. 1, имеется хорошее согласие между теорией и экспериментом ([4]). Отсюда можно сделать вывод, что расчет $x_{1/2}$ по формулам (11)—(13) может служить хорошей оценкой для теоретического предсказания этой величины при постановке эксперимента.

В заключение авторы выражают благодарность акад. И. М. Лифшицу за полезное обсуждение.

Примечание при корректуре. Недавно появилась вторая работа Ю. Кагана и Ю. В. Кононца ([5]), в которой рассмотрены неупругие процессы. Авторы также приходят к решению уравнения Фоккера — Планка на больших глубинах.

Научно-исследовательский институт ядерной физики
Московского государственного университета
им. М. В. Ломоносова

Поступило
10 I 1973

ЦИТИРОВАННАЯ ЛИТЕРАТУРА

[1] Ю. Каган, Ю. В. Кононец, ЖЭТФ, 58, 226 (1970). [2] Lindhard, Mat.-Fys. Med. Dan. Vid. Sel., 34, 14 (1965). [3] В. В. Белошицкий, М. А. Кумахов, ЖЭТФ, 62, 1144 (1972). [4] J. A. Davies et al., Phys. Rev., 165, 345 (1968). [5] Ю. Каган, Ю. В. Кононец, ЖЭТФ, 63, 1041 (1973).