Math-Net.Ru

Общероссийский математический портал

Ю. А. Кашлев, Н. М. Садыков, Статистическая теория каналирования быстрых частиц, основанная на локальном уравнении Больцмана. Корреляционная матрица воздействий и диффузионная функция частиц, *ТМФ*, 1997, том 111, номер 3, 483–496

DOI: <https://doi.org/10.4213/tmf1024>

Использование Общероссийского математического портала Math-Net.Ru подразумевает, что вы прочитали и согласны с пользовательским соглашением

<http://www.mathnet.ru/rus/agreement>

Параметры загрузки:

IP: 54.205.225.156

26 апреля 2023 г., 17:29:02

Ю. А. Кашлев*, Н. М. Садыков†

**СТАТИСТИЧЕСКАЯ ТЕОРИЯ КАНАЛИРОВАНИЯ
БЫСТРЫХ ЧАСТИЦ, ОСНОВАННАЯ НА
ЛОКАЛЬНОМ УРАВНЕНИИ БОЛЬЦМАНА.
КОРРЕЛЯЦИОННАЯ МАТРИЦА ВОЗДЕЙСТВИЙ
И ДИФФУЗИОННАЯ ФУНКЦИЯ ЧАСТИЦ**

На основе цепочки уравнений Боголюбова развита кинетическая теория движения быстрых частиц в кристалле. Для одночастичной функции распределения в условиях взаимодействия частиц с тепловыми колебаниями решетки и валентными электронами получено локальное кинетическое уравнение. С учетом явного вида члена столкновений кинетического уравнения найдена характеристика подсистемы частиц в проблеме деканализирования – диффузионная функция $B(\varepsilon_{\perp})$ в пространстве поперечных энергий. Показано, что функциональная зависимость, которую дает $B(\varepsilon_{\perp})$, различна в трех областях $\varepsilon_{\perp}$, соответствующих каналированию, квазиканалированию и хаотическому движению частиц. Более того, показано, что диффузионная функция имеет излом при поперечной энергии, равной вершине потенциального барьера канала.

В теоретических исследованиях неравновесных процессов, сопровождающих прохождение быстрых частиц через кристалл, выделилось самостоятельное направление – локальная теория каналирования. В работах этого направления [1–7] основное внимание уделяется построению локальных кинетических уравнения и вычислению на их основе кинетических характеристик системы, т.е. диффузионных функций и энергетических потерь частиц. Однако эти исследования, как показывает анализ, в большинстве случаев представляют весьма ограниченный интерес, с одной стороны, из-за крайне упрощенных моделей, в которых фиксируются два постоянных независимых пучка частиц (канализованный и хаотический), с другой, – из-за неадекватных аппроксимаций, используемых в ходе вывода. Новый и, по-видимому, более последовательный подход к решению задач локальной теории ориентационных эффектов предлагается в настоящей статье. В основу его положены идеи кинетической теории Боголюбова [8]. Этот подход позволяет получить локальное кинетическое уравнение для разреженного газа быстрых частиц, взаимодействующих с тепловыми колебаниями решетки и валентными электронами, на основе цепочки уравнений Боголюбова–Борна–Грина–Кирквуда–Ивона (ББГКИ). А это, как будет показано, позволяет дать анализ кинетических эффектов с учетом всех возможных режимов движения частиц. При этом мы ограничимся рассмотрением плоскостного каналирования.

* Институт металлургии им. А. А. Байкова Российской академии наук, Москва, Россия

† Актауский университет им. Ш. Е. Есенова, Актау, Республика Казахстан

1. Согласно основной идее Боголюбова [8] функция распределения F_{1r} для комплекса из одной частицы и r атомов решетки (или r электронов) функционально зависит от распределений $F_{10}, F_{01}, \dots, F_{0r}$ и в эти функции распределения полностью включается временная зависимость F_{1r} . Поэтому можно записать

$$F_{1r}(x_1^g; x_1^c, \dots, x_r^c; t) \rightarrow F_{1r}(x_1^g; x_1^c, \dots, x_r^c; F_{10}(t), F_{01}(t), \dots, F_{0r}(t)),$$

где $x_r^c = \{\mathbf{q}_r^c, \mathbf{p}_r^c\}$, $x_1^g = \{\mathbf{q}_1^g, \mathbf{p}_1^g\}$; $\mathbf{q}^g$ и $\mathbf{p}^g$ ($\mathbf{q}^c$ и $\mathbf{p}^c$) – координата и импульс частицы (атома решетки или электрона). Временная эволюция функций распределения описывается цепочкой ББГКИ

$$\begin{aligned} \frac{\partial F_{1r}}{\partial t} = & [H_{1r}; F_{1r}] + n_c \int dx_{r+1}^c [\Phi_{1,r+1}; F_{1,r+1}] + \\ & + n_c \sum_{1 \leq m \leq r} dx_{r+1}^c [\Phi_{m,r+1}^c; F_{1,r+1}], \end{aligned} \quad (1)$$

$$\frac{\partial F_{0r}}{\partial t} = [H_{0r}; F_{0r}] + n_c \sum_{1 \leq m \leq r} dx_{r+1}^c [\Phi_{m,r+1}^c; F_{0,r+1}], \quad (2)$$

здесь

$$\begin{aligned} H_{0r} = & \sum_{1 \leq n \leq r} (p_n^c)^2 / 2M + U_r^c, \quad U_r^c = \sum_{1 \leq m < n \leq r} \Phi_{mn}^c, \\ H_{1r} = & (p_1^g)^2 / 2m + \sum_{1 \leq n \leq r} (p_n^c)^2 / 2M + \sum_{1 \leq n \leq r} \Phi_{1n} + U_r^c \end{aligned}$$

– гамильтониан системы; m – масса частицы, параметр M может принимать два значения: M_c – масса атома решетки (тепловое рассеяние) или m_e – масса электрона (электронное рассеяние), Φ_{1r} – потенциал взаимодействия частицы с атомом решетки (электроном); Φ_{mr}^c – потенциал взаимодействия атомов решетки (электронов) между собой; $[A; B]$ – классические скобки Пуассона, n_c – плотность атомов решетки (электронов).

Ограничиваясь случаем, когда потенциал Φ_{1r} является короткодействующим с эффективным радиусом r_0 , можно ввести безразмерный параметр $\beta = n_c r_0^3 (\varepsilon_0 / 2E_0) \ll 1$, где E_0 – энергия частицы, ε_0 – характерная энергия взаимодействия. Если в (1), (2) перейти к безразмерным переменным

$$\tilde{\mathbf{q}}_1^g = \mathbf{q}_1^g / r_0, \quad \tilde{\mathbf{q}}_r^c = \mathbf{q}_r^c / r_0, \quad \tilde{\mathbf{p}}_1^g = \mathbf{p}_1^g / v^g m, \quad \tilde{\mathbf{p}}_r^c = \mathbf{p}_r^c / v^c M \quad (\mathbf{v}^g = \dot{\mathbf{q}}^g, \quad \mathbf{v}^c = \dot{\mathbf{q}}^c),$$

а затем преобразовать правую часть (1), (2) так, чтобы область интегрирования порядка единицы вносила основной вклад, то в уравнениях появятся члены, включающие малый параметр β . Однако можно поступить проще, избежав лишних преобразований переменных, а именно, считать β формальным параметром и ввести его в уравнения, для того чтобы дать представление о порядке величины каждого члена. Тогда

$$\begin{aligned} \frac{\partial F_{1r}}{\partial t} = & [H'_{1r}; F_{1r}] + \beta n_c \int dx_{r+1}^c [\Phi_{1,r+1}; F_{1,r+1}], \\ H'_{1r} = & H_{1r} - U_r^c. \end{aligned} \quad (3)$$

Воспользуемся разложением функции F_{1r} по степеням параметра β

$$F_{1r} = F_{1r}^{(0)} + \beta F_{1r}^{(1)} + \beta^2 F_{1r}^{(2)} + \dots \quad (4)$$

Подставляя (4) в уравнение (3), для $r = 0$ получим искомое уравнение

$$\begin{aligned} \frac{\partial F_{10}}{\partial t} = & [H_{10}; F_{10}] + \beta n_c \int dx_1^c [\Phi_{11}; F_{11}^{(0)}] + \\ & + \beta^2 n_c \int dx_1^c [\Phi_{11}; F_{11}^{(1)}] + \dots \end{aligned} \quad (5)$$

Чтобы начальное условие соответствовало реальным физическим условиям, учтем, как и в [8], свойство ослабления корреляции между динамическими состояниями частиц и центров рассеяния. Известно [9], что частица захватывается в режим каналирования только в том случае, если она не подходит к плоскости ближе чем на расстояние $r_0 + \sigma_T$ ¹⁾. Здесь σ_T – среднее тепловое отклонение атома кристалла в направлении, перпендикулярном кристаллографической плоскости. Основываясь на результатах [8], можно утверждать, что в первом приближении комплекс из одной частицы и r центров рассеяния движется так, как если бы он был изолирован. Предположим, что в начальный момент рассматриваемый комплекс находится в состоянии

$$S_{-\tau}^{10} x_1^g, \quad S_{-\tau}^{01} x_1^c, \quad S_{-\tau}^{02} x_2^c, \quad \dots, \quad S_{-\tau}^{0r} x_r^c,$$

где $(n_c r_0^3)^{-1} \tau_g \gg \tau \gg \tau_g$, $\tau_g = r_0 / v^g$ – время прохождения частицей области взаимодействия, $S_{-\tau}^{10}, S_{-\tau}^{01}, \dots, S_{-\tau}^{0r}$ – операторы сдвига состояний на интервал τ . В частности,

$$\begin{aligned} S_{-\tau}^{11} = & \exp \left\{ -\tau \left(\frac{1}{m} \mathbf{p}_1^g \frac{\partial}{\partial \mathbf{q}_1^g} + \frac{\mathbf{p}_1^c}{M} \frac{\partial}{\partial \mathbf{q}_1^c} - \frac{\partial \Phi_{11}}{\partial \mathbf{q}_1^g} \frac{\partial}{\partial \mathbf{p}_1^g} - \frac{\partial \Phi_{11}}{\partial \mathbf{q}_1^c} \frac{\partial}{\partial \mathbf{p}_1^c} \right) \right\}, \\ S_{-\tau}^{10} = & \exp \left\{ -\tau \frac{1}{m} \mathbf{p}_1^g \frac{\partial}{\partial \mathbf{q}_1^g} \right\}, \quad S_{-\tau}^{01} = \exp \left\{ -\tau \frac{1}{M} \mathbf{p}_1^c \frac{\partial}{\partial \mathbf{q}_1^c} \right\}. \end{aligned}$$

Поскольку в начальный момент частица находилась от центра рассеяния на расстоянии, большем r_0 , то корреляцией между их динамическими состояниями можно пренебречь. Тогда корреляционное отклонение

$$\begin{aligned} & F_{1r} (S_{-\tau}^{10} x_1^g, S_{-\tau}^{01} x_1^c, S_{-\tau}^{02} x_2^c, \dots, S_{-\tau}^{0r} x_r^c; 0) - \\ & - F_{10} (S_{-\tau}^{10} x_1^g; 0) F_{0r} (S_{-\tau}^{01} x_1^c, S_{-\tau}^{02} x_2^c, \dots, S_{-\tau}^{0r} x_r^c; 0) \end{aligned}$$

пренебрежимо мало. С учетом этого обстоятельства и разложения (4) запишем начальное условие для рассматриваемой системы в виде

$$\begin{aligned} \lim_{\tau \rightarrow \infty} S_{-\tau}^{1r} \{ F_{1r}^{(0)} (x_1^g; x_1^c, \dots, x_r^c; S_{-\tau}^{10} F_{10}, \dots) - S_{-\tau}^{10} F_{10} S_{-\tau}^{0r} F_{0r} \} = 0, \\ \lim_{\tau \rightarrow \infty} S_{-\tau}^{1r} F_{1r}^{(1)} (x_1^g; x_1^c, \dots, x_r^c; S_{-\tau}^{10} F_{10}, S_{-\tau}^{01} F_{01}, \dots, S_{-\tau}^{0r} F_{0r}) = 0. \end{aligned} \quad (6)$$

¹⁾ Имеется в виду не только плоскость, но и локальные электроны. Принятое нами разделение электронов на группы аналогично используемому в [10].

Запишем производную $\partial F_{10}/\partial t$ в (5) через вариационные производные $\delta F_{1r}/\delta F_{10}$, $\delta F_{1r}/\delta F_{01}$, $\delta F_{1r}/\delta F_{02}$, $\dots$, а затем подставим в это уравнение разложение (4) и приравняем члены при одинаковых степенях параметра β . В результате получим систему уравнений для функций $F_{1r}^{(0)}$, $F_{1r}^{(1)}$, $F_{1r}^{(2)}$, определенных как функционалы от F_{10} , F_{01} , F_{02} , $\dots$. Для $i = 0, 1$ имеем

$$\begin{aligned} \frac{\delta F_{1r}^{(i)}}{\delta F_{10}} [H_{10}; F_{10}^{(0)}] + \frac{\delta F_{1r}^{(i)}}{\delta F_{01}} [H_{01}; F_{01}] + \dots + \frac{\delta F_{1r}^{(i)}}{\delta F_{0r}} [H_{0r}; F_{0r}] + \delta_{1i} \frac{\delta F_{1r}^{(0)}}{\delta F_{10}} [H_{10}; F_{10}^{(i)}] = \\ = [H'_{1r}; F_{1r}^{(i)}] - \delta_{1i} n_c \left\{ \frac{\delta F_{1r}^{(0)}}{\delta F_{10}} \int dx_1^c [\Phi_{11}; F_{11}^{(0)}] - \int dx_{r+1}^c [\Phi_{1,r+1}; F_{1,r+1}^{(0)}] \right\}. \quad (7) \end{aligned}$$

Метод решения уравнений вида (7) с начальными условиями (6) предложен в [8]. Опуская громоздкие выкладки, представим решение (7) при $i = 0$ в виде

$$F_{11}^{(0)}(x_1^g, x_1^c, t) = F_{10}(X_1^g(x_1^g, x_1^c), t) F_{01}(X_1^c(x_1^g, x_1^c), t). \quad (8a)$$

Аргументами функции F_{01} являются динамические переменные выделенного атома решетки (электрона), взаимодействующего с частицей:

$$\begin{aligned} X_k^c(x_1^g; x_1^c, \dots, x_r^c) &= \{\mathbf{P}_k^c(x_1^g; x_1^c, \dots, x_r^c), \mathbf{Q}_k^c(x_1^g; x_1^c, \dots, x_r^c), \\ \mathbf{P}_k^c(x_1^g; x_1^c, \dots, x_r^c) &= \lim_{\tau \rightarrow \infty} S_{-\tau}^{1r} \mathbf{P}_k^c, \\ \mathbf{Q}_k^c(x_1^g; x_1^c, \dots, x_r^c) &= \lim_{\tau \rightarrow \infty} \left\{ S_{-\tau}^{1r} \mathbf{q}_k^c + \frac{1}{M} S_{-\tau}^{1r} \mathbf{p}_k^c \tau \right\}. \end{aligned} \quad (8b)$$

Аналогично определяются переменные X^g . Решение уравнения (7) в случае $i = 1$ имеет более сложный вид, в частности,

$$\begin{aligned} F_{11}^{(1)}(x_1^g, x_1^c, t) &= \int_0^\infty d\tau S_{-\tau}^{11} \Psi(x_1^g; x_1^c; S_\tau^{10} F_{10}, S_\tau^{01} F_{01}, S_\tau^{02} F_{02}), \\ \Psi(x_1^g; x_1^c; S_\tau^{10} F_{10}, S_\tau^{01} F_{01}, S_\tau^{02} F_{02}) &= n_c \int dx_2^c \left[\Phi_{12}; S_\tau^{10} F_{10}(X_1^g(x_1^g; x_1^c, x_2^c), t) \times \right. \\ &\times S_\tau^{02} F_{02}(X_1^c(x_1^g; x_1^c, x_2^c), X_2^c(x_1^g; x_1^c, x_2^c), t) \left. \right] - n_c S_\tau^{01} F_{01}(X_1^c(x_1^g; x_1^c), t) \times \\ &\times \int dx_2^c \left[\Phi_{12}; S_\tau^{10} F_{10}(X_1^g(x_1^g; x_1^c, x_2^c), t) S_\tau^{01} F_{01}(X_2^c(x_1^g; x_2^c), t) \right]. \end{aligned} \quad (8b)$$

Используя (5) и полученные решения (8), находим локальное уравнение Больцмана, линейное относительно функции распределения F_{10} ,

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} F_{10}(x_1^g, t) &= [H_{10}; F_{10}] + \left(\frac{\partial F_{10}}{\partial t} \right)_{\text{st}}, \\ \left(\frac{\partial F_{10}}{\partial t} \right)_{\text{st}} &= \beta n_c \int dx_1^c \left[\Phi_{11}; F_{10}(X_1^g(x_1^g, x_1^c), t) F_{01}(X_1^c(x_1^g, x_1^c), t) \right] + \\ &+ \beta^2 n_c \int dx_1^c \left[\Phi_{11}; \int_0^\infty d\tau S_{-\tau}^{11} \Psi(x_1^g; x_1^c; S_\tau^{10} F_{10}, S_\tau^{01} F_{01}, S_\tau^{02} F_{02}) \right]. \end{aligned} \quad (9)$$

2. Движение частиц вдоль кристаллографической плоскости (точнее, под малыми углами к ней) сопровождается большим числом коррелированных столкновений, при которых частица в каждом акте столкновения лишь незначительно отклоняется от первоначального направления. Чтобы получить кинетическое уравнение в условиях скользящих столкновений, вычислим на основе уравнений динамики переменные (8б), аппроксимируя траектории частиц между двумя последовательными столкновениями прямыми:

$$\begin{aligned} X_1^g &= \{\tilde{\mathbf{Q}}_1^g, \tilde{\mathbf{P}}_1^g\}, & X_1^c &= \{\tilde{\mathbf{Q}}_1^c, \tilde{\mathbf{P}}_1^c\}, & \tilde{\mathbf{Q}}_1^g &= \mathbf{q}_1^g + \boldsymbol{\xi}^g, & \tilde{\mathbf{P}}_1^g &= \mathbf{p}_1^g + \boldsymbol{\zeta}^g, \\ \tilde{\mathbf{Q}}_1^c &= \mathbf{q}_1^c + \boldsymbol{\xi}^c, & \tilde{\mathbf{P}}_1^c &= \mathbf{p}_1^c + \boldsymbol{\zeta}^c, & \boldsymbol{\zeta}^g &= \int_0^\infty d\tau \nabla_{q^g} \Phi(|\mathbf{q}^g - \mathbf{q}^c - (\mathbf{v}^g - \mathbf{v}^c)\tau|), \\ \boldsymbol{\xi}^g &= \frac{1}{m} \int_0^\infty d\tau \tau \nabla_{q^g} \Phi(|\mathbf{q}^g - \mathbf{q}^c - (\mathbf{v}^g - \mathbf{v}^c)\tau|), & \boldsymbol{\zeta}^g &= -\boldsymbol{\zeta}^c, & \boldsymbol{\xi}^g &= -\left(\frac{M_c}{m}\right)\boldsymbol{\xi}^c. \end{aligned}$$

Теперь вычислим член при β^2 в правой части (9) с точностью до второго порядка по потенциалу взаимодействия. В этом приближении переменные X^g и X^c в аргументе функции Ψ достаточно заменить на x^g и x^c . Раскроем после этого скобки Пуассона в (9). Поскольку скорости теплового движения атомов решетки малы, можно считать, что быстрая частица движется в замороженной решетке с фиксированным тепловым разбросом атомов σ_T . С учетом этого обстоятельства уравнение Больцмана может быть записано следующим образом:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} F_{10}(x^g, t) + \sum_i \frac{1}{m} p_i^g \frac{\partial}{\partial q_i^g} F_{10}(x^g, t) &= \left(\frac{\partial F_{10}}{\partial t} \right)_{\text{st}}, \quad (10a) \\ \left(\frac{\partial F_{10}}{\partial t} \right)_{\text{st}} &= n_c \beta \sum_i \int dx_1^c \frac{\partial}{\partial q_i^g} \Phi(|\mathbf{q}^g - \mathbf{q}_1^c|) \frac{\partial}{\partial p_i^g} \{ F_{10}(\tilde{\mathbf{Q}}^g, \tilde{\mathbf{P}}^g, t) F_{01}(\tilde{\mathbf{Q}}_1^c, \tilde{\mathbf{P}}_1^c) \} + \\ &+ n_c^2 \beta^2 \sum_{ij} \int dx_1^c \frac{\partial}{\partial q_i^g} \Phi(|\mathbf{q}^g - \mathbf{q}_1^c|) \int dx_2^c \frac{\partial}{\partial p_j^g} \left\{ \frac{\partial}{\partial p_j^g} F_{10}(x^g, t) [F_{02}(x_1^c, x_2^c) - \right. \\ &\left. - F_{01}(x_1^c) F_{01}(x_2^c)] \right\} \int_0^\infty d\tau \frac{\partial}{\partial q_j^g} \Phi(|\mathbf{q}^g - \mathbf{q}_2^c - (\mathbf{v}^g - \mathbf{v}_2^c)\tau|), \quad (10б) \end{aligned}$$

где $i, j = 1, 2, 3$; $q^g = \{q_x^g, q_y^g, q_z^g\}$, $q_x^g \equiv q_1^g$, $q_y^g \equiv q_2^g$, $q_z^g \equiv q_3^g$.

Принимая во внимание близость кристалла к термодинамическому равновесию при температуре T , стационарные функции кристалла запишем в виде

$$n_c F_{01}(x^c) = \tilde{F}_{01}(\mathbf{q}^c) \varphi(p^c), \quad n_c^2 F_{02}(x_1^c, x_2^c) = \tilde{F}_{02}(\mathbf{q}_1^c, \mathbf{q}_2^c) \varphi(p_1^c) \varphi(p_2^c),$$

где $\varphi(p) = (2\pi M_c T)^{-3/2} \exp\{-(p^2/2M_c T)\}$. Здесь и далее используется система единиц, в которой постоянная Больцмана и постоянная Планка равны единице. Учитывая, что в случае скользящих ударов $\boldsymbol{\zeta}^g$ и $\boldsymbol{\xi}^g$, а также $\boldsymbol{\zeta}^c$ и $\boldsymbol{\xi}^c$ малы, разложим (10б) по степеням $\boldsymbol{\zeta}$ и $\boldsymbol{\xi}$ и в полученном разложении сохраним только старшие члены. Теперь выберем систему координат таким образом, чтобы ось x была направлена перпендикулярно кристаллографическим плоскостям, образующим стенки плоскостного канала, а ось z

направим вдоль траектории влета частиц в канал. Будем считать распределение частиц однородным по y , поскольку это соответствует условиям плоскостного каналирования [11]. Кроме того, исключая исследование распыления пучка частиц вдоль оси y , усредним (106) по p_y . В результате получаем

$$\begin{aligned} (\partial F_{10}/\partial t)_{\text{st}} &= \nabla_{p_x^g} L F_{10}(x^g, t), \\ L &= K_{xx} \nabla_{p_x^g} + R_{xx}^{(1)} + R_{xx}^{(2)}. \end{aligned} \quad (11)$$

Коэффициенты из (11) по-разному зависят от скорости частицы:

$$K_{xx} \sim (v^g)^{-1}, \quad R_{xx}^{(1)} \sim (v^g)^{-2}, \quad R_{xx}^{(2)} \sim (v^g)^{-2}.$$

Поэтому в случае высоких скоростей достаточно сохранить первый член в (11). Коэффициент, вошедший в первый член, запишем в явном виде:

$$\begin{aligned} K_{xx} &= K^{(1)}(q_x^g) - \Delta K^{(1)}(q_x^g), \\ K^{(1)}(q_x^g) &= \int d\mathbf{q}^c \tilde{F}_{01}(\mathbf{q}^c) \nabla_{q_x^g} \Phi(|\mathbf{q}^g - \mathbf{q}^c|) \times \\ &\quad \times \int_0^\infty d\tau \nabla_{q_x^g} \Phi(|\mathbf{q}^g - \mathbf{q}^c - (\mathbf{v}^g - \mathbf{v}^c)\tau|), \quad (12a) \\ -\Delta K^{(1)}(q_x^g) &= \int d\mathbf{q}_1^c d\mathbf{q}_2^c g(\mathbf{q}_1^c, \mathbf{q}_2^c) \nabla_{q_x^g} \Phi(|\mathbf{q}^g - \mathbf{q}_1^c|) \times \\ &\quad \times \int_0^\infty d\tau \nabla_{q_x^g} \Phi(|\mathbf{q}^g - \mathbf{q}_2^c - (\mathbf{v}^g - \mathbf{v}^c)\tau|), \quad (12b) \end{aligned}$$

где

$$g(\mathbf{q}_1^c, \mathbf{q}_2^c) = \tilde{F}_{02}(\mathbf{q}_1^c, \mathbf{q}_2^c) - \tilde{F}_{01}(\mathbf{q}_1^c) \tilde{F}_{01}(\mathbf{q}_2^c)$$

— парная корреляционная функция кристалла. Кроме того, в окончательных выражениях параметр β положен равным единице (см. [8]).

Если ввести статический формфактор, определяющий пространственные корреляции между атомами решетки,

$$S(\mathbf{q}_1^c, \mathbf{q}_2^c) = \tilde{F}_{01}(\mathbf{q}_1^c) \delta(\mathbf{q}_1^c - \mathbf{q}_2^c) + g(\mathbf{q}_1^c, \mathbf{q}_2^c), \quad (13)$$

то величину

$$K_{xx} \equiv K(q_x^g) = \int d\lambda_x A(\lambda_x, q_x^g)$$

можно представить в симметризованной форме, записав $A(\lambda_x, q_x^g)$ в виде

$$A(\lambda_x, q_x^g) = \frac{1}{v_0} \int d\mathbf{q}_1^c d\mathbf{q}_2^c G\left(-\mathbf{q}_1^c + \frac{\lambda_x}{2}, \mathbf{q}_2^c + \frac{\lambda_x}{2}, q_x^g\right), \quad (14a)$$

$$G(\mathbf{q}_1^c, \mathbf{q}_2^c, q_x^g) = -S(\mathbf{q}_1^c, \mathbf{q}_2^c) \nabla_{q_x^g} \Phi(|\mathbf{q}^g - \mathbf{q}_1^c|) \nabla_{q_x^g} \Phi(|\mathbf{q}^g - \mathbf{q}_2^c|). \quad (14b)$$

Здесь учтено, что продольная скорость много больше поперечной, т.е. $v^g \simeq v_z^g \simeq v_0$, где $v_0 = (2E_0/m)^{1/2}$ — начальная скорость частицы.

При высоких температурах $T \geq 300\text{ К}$ решения уравнения (2) при $s = 1, 2$ в квази-гармоническом приближении имеют вид

$$\begin{aligned}\tilde{F}_{01}(\mathbf{q}_1^c) &= \sum_m w(|\mathbf{q}_1^c - \mathbf{R}_m|; \sigma_T^2), \\ \tilde{F}_{02}(\mathbf{q}_1^c, \mathbf{q}_2^c) &= \sum_{mn}' w(|\mathbf{q}_1^c - \mathbf{R}_m|; \sigma_T^2) w(|\mathbf{q}_2^c - \mathbf{R}_n|; \sigma_T^2),\end{aligned}\quad (15)$$

где $\mathbf{R}_m$ – радиус-вектор m -го узла решетки, $w(\mathbf{q}^c; \sigma_T^2)$ – нормальное распределение с дисперсией $\sigma_T^2 \sim T$. Подставляя (15) в (12) и принимая в качестве Φ экранированный кулоновский потенциал с радиусом действия a_0 , преобразуем основной член (12а) к виду, удобному для численного интегрирования. В результате получаем

$$K^{(1)}(q_x^g) = \frac{1}{v_0} (Z_1 Z_2 e^2)^2 \sum_{h_n} B^{(1)}(h_n) P(h_n) \cos(h_n q_x^g), \quad (16a)$$

где

$$B^{(1)}(h_n) = \int_0^{\Lambda_1} dk k^3 [\beta_n(k)(\beta_n(k) + \eta_n(k))]^{-1}, \quad (16b)$$

$h_n \equiv h_x = (2\pi/2l)n$ – вектор обратной решетки, перпендикулярный плоскости канала, n – целое число, l – полуширина канала,

$$\begin{aligned}P(h_n) &= 2\pi n_c \exp\{-h_n^2 \sigma_T^2/2\}, \quad \beta_n(k) = \{\eta_n^2(k) - 4k^2 h_n^2\}^{1/2}, \\ \eta_n(k) &= k^2 + \varkappa^2 + h_n^2, \quad \varkappa = 1/a_0, \quad \Lambda_1(Z_1 Z_2 e^2) \frac{1}{E_0} \frac{M_c}{M_c + m}.\end{aligned}$$

Что же касается величины $-\Delta K^{(1)}(q_x^g)$ (12б), характеризующей вклад корреляционных эффектов, то ее окончательное выражение имеет громоздкий вид. Поэтому корреляционная поправка будет показана только графически.

3. Перейдем к изучению движения частиц в условиях электронного рассеяния. В процессах рассеяния частиц на электронах существенную роль играют временные корреляции [12]. Теперь необходимо учитывать пространственно-временные корреляции, когда значение электронной плотности ρ в точке $\mathbf{q}$ в момент t оказывает влияние на плотность в точке $\mathbf{q}'$ в момент $t + \tau$. Динамический формфактор $\tilde{S}(\mathbf{q}, \mathbf{q}'; \tau)$, характеризующий пространственно-временную корреляцию между электронами [2, 13], может быть выражен через двухвременную запаздывающую функцию Грина [14]

$$\langle\langle \rho(\mathbf{q}', t + \tau) \rho(\mathbf{q}, t) \rangle\rangle = -i\Theta(\tau) \langle[\rho(\mathbf{q}', t + \tau), \rho(\mathbf{q}, t)]_-\rangle, \quad (17)$$

где усреднение $\langle \dots \rangle$ выполняется по равновесному распределению электронов, $[A, B]_- = AB - BA$. Действительно, переходя к фурье-компонентам по пространственным и временным переменным, имеем [2]

$$\tilde{S}(\mathbf{k}, \mathbf{k}'; \omega) = (1/\pi) \text{Im} \langle\langle \rho_{\mathbf{k}} | \rho_{\mathbf{k}'} \rangle\rangle_{\omega}, \quad (18)$$

где $\rho_{\mathbf{k}}$ – фурье-компонента флуктуаций плотности электронного газа. Здесь следует подчеркнуть, что после введения определений (17), (18) мы перешли к полуклассическому описанию, когда частицы по-прежнему рассматриваются как классическая подсистема, а электроны – как квантовая [7].

Для того чтобы воспользоваться общим видом формфактора (18), коэффициент $K(q_x^g)$ из (11) разложим в ряд Фурье. Фурье-компоненту этого коэффициента обозначим $\tilde{A}(h_x)$ и, принимая во внимание (14), запишем

$$\tilde{A}(h_x) = \int d\omega \frac{1}{v_0} \int d\mathbf{k} \tilde{G}\left(-\mathbf{k} + \frac{h_x}{2}, \mathbf{k} + \frac{h_x}{2}; \omega\right) \delta\left(\frac{\omega}{v_0} + k \cos \tilde{\Theta}\right), \quad (19a)$$

$$\tilde{G}(\mathbf{k}, \mathbf{k}'; \omega) = -\tilde{S}(\mathbf{k}, \mathbf{k}'; \omega) k_x k'_x \Phi(|\mathbf{k}|) \Phi(|\mathbf{k}'|). \quad (19b)$$

Как следует из (19a), учет пространственно-временных корреляций (в (14) рассматривались только пространственные корреляции, описываемые с помощью (13)) дает дополнительное интегрирование по переданным энергиям. Естественно, что при интегрировании по переданным энергиям и переданным импульсам учитывается и закон сохранения $\delta(\omega + \mathbf{k}\mathbf{v}_0)$. В (19a) этот закон ($\tilde{\Theta}$ – угол между $\mathbf{k}$ и $\mathbf{v}_0$) записан таким образом, что зависимость $\tilde{A}$ от скорости (в случае высоких скоростей) выделяется в явном виде. Действительно, анализ показывает, что при $kv_0 \gg \omega$ в интеграле по $d\mathbf{k}$ (19a) достаточно ограничиться старшим членом, который от v_0 не зависит, так что $\tilde{A}(h_x) \sim (1/v_0)$.

Преобразуем $K(h_x)$ (19). Во-первых, ограничиваясь членами второго порядка по экранированному кулоновскому потенциалу Φ , заменим функцию Грина в (18) функцией Грина нулевого порядка по взаимодействию. Во-вторых, в соответствии с традиционными представлениями теории каналирования [2] будем считать, что электронный газ изотропен. В этом случае мнимая часть функции Грина плотность-плотность зависит только от $|\mathbf{k}|$. Принимая во внимание это обстоятельство, выполним в (19a) интегрирование по угловым переменным. В-третьих, при интегрировании в (19a) по ω воспользуемся правилом сумм для запаздывающей функции Грина [14]. В результате получаем

$$K(q_x^g) = \frac{1}{v_0} (Z_1 e^2)^2 \sum_{h_n \geq 0} B^{(2)}(h_n) \langle \rho_{h_n} \rangle^{(0)} \cos(h_n q_x^g), \quad (20)$$

где

$$B^{(2)}(h_n) = \frac{1}{n_0} \int_{k_c}^{\Lambda_2} dk [k^3 - (1/4)kh_n^2] [\gamma_n^2(k) - k^2 h_n^2]^{-1} \{n_0 - \mathcal{P}_n(k)\}, \quad (21)$$

$\gamma_n(k) = k^2 + \kappa^2 + (1/4)h_n^2$, $\Lambda_2 = 2m_e v_0$, $\langle \dots \rangle$ – усреднение по равновесному состоянию невзаимодействующих электронов,

$$\mathcal{P}_n(k) = \langle \rho_{h_n+k} \rho_{-k} \rangle^{(0)} / n_{\text{loc}}(h_n), \quad n_0 = \langle \rho(h_n = 0) \rangle^{(0)}, \quad n_{\text{loc}}(h_n) = \langle \rho_{h_n} \rangle^{(0)}.$$

Минимальное значение k в интеграле (21) определено как $k_c = \omega_p / v_F$, где ω_p – частота плазменных колебаний и v_F – скорость Ферми, поскольку для процессов диффузионного типа достаточно учесть вклад близких столкновений с индивидуальными возмущениями электронного газа²⁾. На основе (20) и (21) искомую величину можно записать в

²⁾ Те же модельные представления используются во всех известных нам работах по диффузионному деканалированию (см., например, [4]).

виде $\tilde{K}_{xx} = K^{(2)}(q_x^g) - \Delta K^{(2)}(q_x^g)$, где первое слагаемое, включающее n_0 из фигурных скобок в (21), дает член $K^{(2)}(q_x^g)$, а второе слагаемое, включающее $\mathcal{P}_n(k)$, дает корреляционную часть функции $-\Delta K^{(2)}(q_x^g)$.

Найдем окончательный вид $\tilde{K}_{xx}$ в условиях электронного рассеяния. Прежде всего ограничимся вычислением $B^{(2)}(h_n)$ (21) в приближении хаотических фаз [13], поскольку в этом приближении анализ выражения значительно упрощается по сравнению с анализом в приближении Хартри–Фока. Итак, подставим в $B^{(2)}$ выражение для $\mathcal{P}_n(k)$ в приближении хаотических фаз и выполним интегрирование по k . Далее, используя уравнение Пуассона, вычислим плотность локальных валентных электронов $n_{\text{loc}}(q_x^g)$ так же, как это сделано в [10]. Если в выражении для плоскостного потенциала, входящего в уравнение Пуассона, ограничиться ангармонизмом четвертого порядка

$$U_{\text{pl}}(q_x^g) = k_1 (q_x^g)^2 + k_2 (q_x^g)^4,$$

то получим

$$n_{\text{loc}}(q_x^g) = n_c Z_{\text{loc}}^{(2)}(q_x^g)^2 = (3k_2/\pi e)(q_x^g)^2,$$

где $Z_{\text{loc}}^{(2)}$ — число локальных электронов, приходящихся на атом решетки. Соответственно плотность однородного электронного газа равна [10] $n_0 = n_c Z_{\text{loc}}^{(0)} = (2k_1/2\pi e)$. С учетом явного вида $B^{(2)}(h_n)$, n_0 и $n_{\text{loc}}(q_x^g)$ (точнее, фурье-компоненты функции $n_{\text{loc}}(q_x^g)$) выполним суммирование по h_n в (20). Известно [15], что в случае высоких скоростей частиц вклад эффекта экранирования в кинетические коэффициенты пренебрежимо мал. Поэтому, пренебрегая для простоты экранированием, окончательное выражение для $\tilde{K}_{xx}$ запишем в виде

$$K^{(2)}(q_x^g) = \frac{1}{v_0} (Z_1 e^2)^2 \left\{ n_c Z_{\text{loc}}^{(0)} \ln \left(\frac{2m_e v_0 v_F}{\omega_p} \right) + \frac{1}{2} n_c Z_{\text{loc}}^{(2)} \ln \left| \frac{(2m_e v_0)^2}{9(\pi/4l)^2 - k_c^2} \right| (2l/\pi)^2 u^2 \right\}, \quad (22a)$$

$$-\Delta K^{(2)}(q_x^g) = -\frac{1}{v_0} (Z_1 e^2)^2 n_c Z_{\text{loc}}^{(2)} \frac{8}{3} (4l/\pi)^2 f(u), \quad (22b)$$

где $u = (\pi/2)(q_x^g/l)$, $f(u) = (1/3) \cos u - (\pi/8) \cos^2 u$.

4. Перейдем к обсуждению полученных результатов. Если в уравнении (10) отбросить член порядка β^2 , то формально оно сводится к уравнению Больцмана теории газов [8]. Необходимость учета в (10) члена порядка β^2 связана с тем, что он содержит двухчастичную функцию распределения кристалла F_{02} . Благодаря этому члену не реализуются кинетические процессы в отсутствие рассеяния, т.е. при нулевой температуре. Обратим внимание и на то, что после перехода к оператору столкновений в дифференциальной форме (11) физический смысл последнего уже не тот, что в (106). Действительно, (106) характеризует изменение распределения в условиях более традиционного элементарного акта — бинарного столкновения, тогда как (11) нужно интерпретировать как изменение в условиях многократного рассеяния: многочастичное взаимодействие является в данном случае результатом суперпозиции многих парных взаимодействий частицы с атомами плоскости одновременно.

Кинетическое уравнение (10а) с членом столкновений в дифференциальной форме (11) описывает дальнейшую эволюцию распределения частиц после установления линдхардовского [11] (или в терминологии [16] динамического) равновесия. Поясним это утверждение. На самых малых глубинах проникновения быстрые частицы можно исследовать на основе стохастического уравнения движения для двумерного марковского процесса $(q_x^g, \varepsilon_\perp)$:

$$\begin{aligned}\dot{q}_x^g &= \left\{ \frac{2}{m} (\varepsilon_\perp - U_{\text{pl}}(q_x^g)) \right\}^{1/2}, \\ \dot{\varepsilon}_\perp &= \left\{ \frac{2}{m} (\varepsilon_\perp - U_{\text{pl}}(q_x^g)) \right\}^{1/2} f(q_x^g, t).\end{aligned}\quad (23)$$

Здесь $\varepsilon_\perp = (1/2m)(p_x^g)^2 + U_{\text{pl}}(q_x^g)$ – поперечная энергия, а случайные толчки, которые испытывает частица, описываются с помощью локальной стохастической силы $f(q_x^g, t)$. Поскольку взаимодействие быстрых частиц с тепловыми колебаниями атомов решетки (электронами) мало, из второго уравнения системы (23) следует, что в условиях динамического равновесия поперечная энергия медленно меняется со временем. Время пребывания процесса в малой окрестности заданного значения q_x^g обратно пропорционально скорости $v_x^g = \dot{q}_x^g$. Поэтому для фиксированной поперечной энергии условное распределение частиц по координате может быть записано в следующем виде:

$$P(q_x^g | \varepsilon_\perp) = \begin{cases} \frac{1}{2\kappa(\varepsilon_\perp)} \left\{ (\varepsilon_\perp - U_{\text{pl}}(q_x^g)) \frac{1}{m} \right\}^{-1/2} & \text{при } U_{\text{pl}}(q_x^g) < \varepsilon_\perp, \\ 0 & \text{при } U_{\text{pl}}(q_x^g) \geq \varepsilon_\perp, \end{cases}\quad (24)$$

где

$$\kappa(\varepsilon_\perp) = \frac{1}{2} \int dq_x^g \left\{ (\varepsilon_\perp - U_{\text{pl}}(q_x^g)) \frac{1}{m} \right\}^{-1/2}$$

– нормировочная функция.

Системе стохастических уравнений (23) соответствует уравнение движения для совместной плотности вероятности $P_1(q_x^g, \varepsilon_\perp, t)$ [17]. Подставляя в это уравнение плотность, записанную в форме

$$P_1(q_x^g, \varepsilon_\perp, t) = \tilde{P}(\varepsilon_\perp, t) P(q_x^g | \varepsilon_\perp),$$

с учетом (24) можно получить уравнение типа Фоккера–Планка для $\tilde{P}(\varepsilon_\perp, t)$. Последнее, как показывает анализ, совпадает с кинетическим уравнением (10а), (11), если (10а) и (11) перевести в $\varepsilon_\perp$ -представление и в члене столкновений сохранить только старший член. В полученном таким образом уравнении в качестве диффузионной функции в пространстве поперечных энергий фигурирует величина

$$B(\varepsilon_\perp) = (2/m) \int dq_x^g \{ \varepsilon_\perp - U_{\text{pl}}(q_x^g) \} P(q_x^g | \varepsilon_\perp) K(q_x^g). \quad (25)$$

Такое же выражение для диффузионной функции дает теория уравнения Больцмана в условиях скользящих столкновений [8], если в члене столкновений заменить F_{10} на

$P(q_x^g|\varepsilon_\perp)$ (24). В классической теории переход от распределения $P_1(q_x^g, \varepsilon_\perp, t)$ к функции $\tilde{P}(\varepsilon_\perp, t)$ принято рассматривать как процесс “сглаживания” одночастичного распределения. В квантовой теории ему соответствует затухание недиагональных элементов матрицы плотности [19]. Затухание завершается на глубине проникновения порядка длины когерентности ($10^4 \text{ \AA}$), и начиная с этих глубин, как следует из сказанного выше, можно использовать уравнение (10а) с членом столкновений в форме (11).

Рис. 1

Величина $K_{xx} \equiv K(q_x^g)$ (12) представляет собой диагональный элемент корреляционной матрицы сил (точнее, $f_x(q_x^g, t)$ – составляющих сил вдоль оси x), действующих на частицу. Результаты численного расчета (16) в условиях фононного рассеяния представлены на рис. 1а. Здесь кривая μ_1 – функция $K^{(1)}(q_x^g)/K_3$, $\mu_2 = \Delta K^{(1)}(q_x^g)/K_3$, $\mu_3 = K_{xx}/K_3$, $K_3 = 8\pi n_c(Z_1 Z_2 e^2)^2/v_0$. Расчеты выполнены для ионов гелия в плоскостном канале (100) кристалла германия при $T = 300 \text{ K}$. Как видно из рисунка, K_{xx} имеет вид гауссовой кривой, что обусловлено тепловым размазыванием атомов плоскости. Корреляционная часть – кривая μ_2 дает отрицательную поправку (та же картина и в случае электронного рассеяния) в диагональный элемент полной матрицы $K_{xx} = K^{(1)}(q_x^g) - \Delta K^{(1)}(q_x^g)$. Графики матрицы воздействий в условиях электронного рассеяния $K_{xx} = K^{(2)}(q_x^g) - \Delta K^{(2)}(q_x^g)$ (22) при нулевой температуре показаны на рис. 1б, где кривая μ_4 – функция $K^{(2)}(q_x^g)/K^{(2)}(0)$, $\mu_5 = \Delta K^{(2)}(q_x^g)/K^{(2)}(0)$,

$\mu_6 = \tilde{K}_{xx}/K^{(2)}(0)$. В отличие от рассеяния на тепловых колебаниях решетки, воздействие электронов оказывается значительным по всей ширине канала, в том числе в центре канала. Следует иметь в виду, что кривые на рис. 1б относятся к случаю каналирования легких атомных частиц средних энергий $E_0 \lesssim 1$ МэВ, т.к. при выводе (22) мы учли только вклад валентных электронов. Естественно, что при более высоких энергиях необходимо учитывать и вклад электронов атомных ядер (соответствующий расчет будет представлен).

Рис. 2

Методами численного интегрирования вычислим диффузионную функцию (25) в случае фононного рассеяния при трех температурах $T_1 = 300$ К, $T_2 = 500$ К, $T_3 = 700$ К. При вычислении $B(\varepsilon_{\perp})$ нами использованы формулы (24), (25), (16) (в том числе кривые на рис. 1а), а также выражение

$$U_{pl}(q_x^g) = \int dq_{1x}^c \tilde{F}_{01}(q_{1x}^c) n_c 2l \int d\rho^c \Phi \left(\sqrt{(q_x^g - q_{1x}^c)^2 - |\rho^c|^2} \right), \quad \mathbf{q}^c = (q_x, \rho^c).$$

Результаты численного расчета представлены на рис. 2, где

$$\nu = B(\varepsilon_{\perp})/D, \quad D = 4\pi n_c (Z_1 Z_2 e^2)^2 (2\varepsilon_{\perp}^{cr}/mv_0), \quad \chi_i = U_0(T_i)/\varepsilon_{\perp}^{cr},$$

здесь $i = 1, 2, 3$, $U_0(T)$ – вершина потенциального барьера плоскости при температуре T [9, 20], $\varepsilon_{\perp}^{\text{cr}} = E_0 \psi_{\text{cr}}^2$ – критическая поперечная энергия [9]. Согласно первоначальному варианту классической теории Линдхарда [11] при углах падения, меньших критического ψ_{cr} , пучок быстрых частиц распадается на две части: каналированную и хаотическую. Канализованные частицы движутся в центре канала, периодически отражаясь от кристаллографических плоскостей, образующих его стенки. Что же касается частиц хаотической части пучка, то они движутся по прямым траекториям под произвольными углами к плоскости канала. На рис. 2 этим частям пучка соответствуют две области: $\varepsilon_{\perp} < U_0(T)$ для каналированных частиц, $\varepsilon_{\perp} \geq \varepsilon_{\perp}^{\text{cr}}$ для хаотических. Причем наименьшие значения диффузионной функции соответствуют режиму каналирования. Кроме того, из рис. 2 следует, что в случае хаотического движения функция $B(\varepsilon_{\perp})$ растет линейно с ростом $\varepsilon_{\perp}$.

Однако наиболее интересный результат наблюдается (см. рис. 2) в области $\varepsilon_{\perp} \simeq U_0(T)$. Действительно, диффузионная функция имеет излом при $\varepsilon_{\perp} = U_0(T)$. Дело в том, что состояниям частиц, энергетически примыкающих к вершине барьера, соответствует зона квазиканализованности [21]. Другими словами, в рассматриваемой здесь области поперечных энергий возможна реализация еще одного режима движения – квазиканализованности. Этого режима нет в классической теории [11]. В режиме квазиканализованности частицы движутся вдоль кристаллографической плоскости в непосредственной близости от стенки канала, совершая случайным образом переходы от одной стенки к соседней (если кристаллографические плоскости пронумеровать слева направо, то наблюдается переход от первой стенки ко второй, через некоторый промежуток времени от второй к третьей и т.д.). Локальная теория, развитая в настоящей работе, позволяет учесть различие вкладов в кинетические процессы, которые дают частицы, движущиеся в режимах каналирования, квазиканализованности и хаотического движения. Отсюда возникает сложная функциональная зависимость, в том числе появление особенности (излома) функции $B(\varepsilon_{\perp})$. В то же время нелокальные теории (см., например, [22]) дают гладкие, монотонно возрастающие функции $\varepsilon_{\perp}$, не имеющие никаких особенностей. Отметим также, что в области $U_0(T) < \varepsilon_{\perp} < \varepsilon_{\perp}^{\text{cr}}$ (см. рис. 2) происходит переход от квазиканализованности к хаотическому движению. При этом, как показал анализ, ломанные траектории квазиканализованных частиц с увеличением $\varepsilon_{\perp}$ непрерывно переходят в прямые траектории, соответствующие частицам хаотического пучка.

На рис. 2 хорошо видно, что потенциальный барьер канала $U_0(T)$ уменьшается с ростом температуры. Этот факт удовлетворительно согласуется с результатом аналитического расчета вершины потенциального барьера [20], где плоскость канала рассматривалась как непрерывный набор гармонических осцилляторов, а потенциал плоскости вычислялся путем суммирования отдельных слоев, образуемых осцилляторами.

Список литературы

- [1] *M. T. Robinson.* Phys. Rev. B. 1971. V. 4. P. 1461.
- [2] *M. Kitagawa, Y. H. Ohtsuki.* Phys. Rev. B. 1973. V. 8. P. 3117.
- [3] *Y. H. Ohtsuki, M. Kitagawa, T. Waho.* Nucl. Inst. and Methods. 1976. V. 132. P. 149.
- [4] *Y. H. Ohtsuki, H. Nitta.* Phys. Lett. A. 1982. V. 93. P. 95.
- [5] *M. Ichikawa, Y. H. Ohtsuki.* Phys. Rev. B. 1974. V. 10. P. 1128.
- [6] *H. Nitta, Y. H. Ohtsuki, K. Kubo.* Phys. Rev. B. 1986. V. 34. P. 7549.
- [7] *H. Nitta.* Phys. Stat. Sol. B. 1985. V. 131. P. 75.

- [8] *Н. Н. Боголюбов*. Проблемы динамической теории в статистической физике. М.–Л.: ГИТТЛ, 1946.
- [9] *D. S. Gemmel*. Rev. Mod. Phys. 1974. V. 46. № 1. P. 129.
- [10] *J. D. Melvin, T. Tombrello*. Rad. Eff. 1975. V. 26. P. 113.
- [11] *J. Lindhard*. Kong. Danske Vid. Selsk. mat. fys. Medd. 1965. V. 34. P. 14.
- [12] *А. Мюнстер*. В кн.: Термодинамика необратимых процессов. М.: ИЛ, 1962. С. 36.
- [13] *Д. Пайнс, Ф. Нозьер*. Теория квантовых жидкостей. М.: Мир, 1967. С. 293.
- [14] *Д. Н. Зубарев*. Неравновесная статистическая термодинамика. М.: Наука, 1971. С. 153.
- [15] *K. Dettmann, M. N. Khan, M. W. Lucas*. J. Phys. C: Solid State Phys. 1976. V. 9. P. 1879.
- [16] *В. В. Рожков*. Эффекты, индуцированные коллективными коррелированными взаимодействиями заряженных частиц с твердым телом: Автореф. дис. на соискание уч. ст. доктора физ.-матем. наук. М.: МИЭМ, 1989.
- [17] *Ю. А. Кашлев, Н. М. Садыков*. ТМФ. 1983. Т. 54. № 3. С. 456.
- [18] *К. Черчиньяни*. Теория и приложения уравнения Больцмана. М.: Мир, 1978. С. 86.
- [19] *И. П. Калашников, В. С. Ремизович, М. И. Рязанов*. Столкновения быстрых заряженных частиц в твердых телах. М.: Атомиздат, 1980. С. 186.
- [20] *И. Н. Шемаева, Ю. А. Кашлев*. В кн.: Тр. 9-го совещ. по физике взаимодейств. заряженных частиц с кристаллами. М.: МГУ, 1982. С. 203.
- [21] *L. T. Chadderton*. Rad. Eff. 1975. V. 27. № 1. P. 12.
- [22] *T. Oshiyama, N. Mannami*. J. Phys. Soc. Japan. 1982. V. 51. № 7. P. 2255.

Поступила в редакцию 28.XI.1996 г.

Yu. A. Kashlev, N. M. Sadykov
STATISTICAL THEORY OF RAPID PARTICLES
CHANNELLING BASED ON THE LOCAL BOLTZMANN
EQUATION. CORRELATION MATRIX OF INTERACTIONS
AND DIFFUSION FUNCTION OF PARTICLES

Based on Bogoliubov's chain of equations the kinetic theory of rapid particles in crystal is developed. For one-particle distribution function under interaction of particles with thermal oscillations and valent electrons a local kinetic equation is obtained. With the account of the explicit form of the collision term in the kinetic equation the basic characteristic of a subsystem of particles in the dechannelling problem – diffusion function $B(\varepsilon_{\perp})$ in the space of transversal energies is found. It is shown that the functional dependence provided by $B(\varepsilon_{\perp})$ is different in three regions of $\varepsilon_{\perp}$, corresponding to channelling, quasichannelling and chaotic motion of particles. It is also shown that the diffusion function has a break when the transversal energy equals to the top of the potential barrier of a channel.