Math-Net.Ru

Общероссийский математический портал

Ю. А. Кашлев, Зависимость равновесных свойств каналированных частиц от поперечной квазitemпературы, *ТМФ*, 2006, том 146, номер 3, 509–524

DOI: <https://doi.org/10.4213/tmf2051>

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: 54.237.206.68

26 апреля 2023 г., 15:43:28

© 2006 г.

Ю. А. Кашлев*

ЗАВИСИМОСТЬ РАВНОВЕСНЫХ СВОЙСТВ КАНАЛИРОВАННЫХ ЧАСТИЦ ОТ ПОПЕРЕЧНОЙ КВАЗИТЕМПЕРАТУРЫ

Методами неравновесной статистической термодинамики исследованы квазиравновесные и кинетические характеристики каналированных частиц, которые рассматриваются как самостоятельная термодинамическая подсистема. Дан вывод уравнения баланса энергии-импульса каналированных частиц в сопровождающей системе координат. Показано, что решение уравнения баланса дает выражение для основного термодинамического параметра – поперечной квазitemпературы подсистемы каналированных частиц. Исследованы квазиравновесное угловое распределение частиц после прохождения тонкого монокристалла, квазиравновесное распределение по углам выхода частиц в условиях обратного рассеяния, а также константа скорости неравновесного процесса (деканалирования) в условиях большого отклонения системы в целом от термодинамического равновесия. Обсуждается способ измерения поперечной квазitemпературы пучка по высоте пика углового распределения частиц, полученного в рамках эксперимента “на прострел”.

Ключевые слова: неравновесная статистическая термодинамика, каналированные частицы, кристалл, квазиравновесие, поперечная квазitemпература, угловое распределение, минимальный выход.

1. ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИЕ ПАРАМЕТРЫ ПОДСИСТЕМЫ КАНАЛИРОВАННЫХ ЧАСТИЦ

Согласно работе [1] при углах падения быстрых частиц на кристалл, меньших критического угла, пучок частиц, движущихся вдоль кристаллографических плоскостей (осей), распадается на две фракции: каналированную и хаотическую. Образование двух фракций частиц происходит на глубине проникновения L порядка длины когерентности $L_{\text{coh}} \sim 10^4 \text{ \AA}$ [2]. Поэтому аналитические расчеты, как правило, основываются на том, что на глубине $\sim L_{\text{coh}}$ в подсистеме каналированных частиц (КЧ) устанавливается квазиравновесное распределение по поперечным энергиям. На этой глубине в уравнении для матрицы плотности КЧ затухают амплитуды вероятности, но сохраняются диагональные матричные элементы, характеризующие

*Институт металлургии и материаловедения им. А. А. Байкова РАН, Москва, Россия.
E-mail: pm@ultra.imet.ac.ru

заселенность уровней поперечной энергии. Так что на глубине $\sim L_{\text{coh}}$ можно ввести квазиравновесный статистический оператор ρ_l [3], [4] и квазиравновесное распределение КЧ.

Если для простоты исключить из рассмотрения хаотическую часть пучка, то остальную часть системы следует разделить еще на две части: $\{i = 1\}$ – термостат, включающий кристаллическую решетку и электронный газ, и $\{i = 2\}$ – легкие атомные частицы, движущиеся в режиме каналирования. В качестве переменных P_{mi} удобно выбрать гамильтонианы двух подсистем $P_{1i} = H_i$, полные импульсы $P_{2i} = \mathcal{P}_i$ и числа частиц $P_{3i} = N_i$. Поскольку столкновения КЧ с электронами происходят наиболее часто [1], ограничимся учетом электронных столкновений. Тогда гамильтониан КЧ запишется в виде $P_{21} = H_2 = H_0^{(2)} + H_{\text{int}}^{(2)} + \tilde{H}_{\text{int}}^{(2)}$, где $H_0^{(2)}$ включает непрерывный потенциал атомной цепочки U_a (или плоскости), описывающий воздействие на КЧ регулярной решетки в условиях коррелированных столкновений [1]. Полный гамильтониан системы равен $H = H_1 + H_2$. Нами использованы обозначения: $H_1 = H_e$ – гамильтониан свободных электронов, $H_{\text{int}}^{(2)} = W_c^{(2)}$ – оператор взаимодействия КЧ с одночастичными возбуждениями электронного газа, $\tilde{H}_{\text{int}}^{(2)} = W_p^{(2)}$ – взаимодействие КЧ с плазмонами. В работе используется система единиц, в которой $\hbar = k_B = 1$, а объем системы считается равным единице.

Предположим, что быстрые частицы первоначально двигались со скоростью V вдоль кристаллографической оси в направлении z (или плоскости). Чтобы исключить направленное движение частиц, перейдем в систему координат, сопровождающую частицы.

В соответствии с определениями неравновесной статистической термодинамики [3] оператор энтропии и оператор произведения энтропии соответственно равны

$$\begin{aligned} S(t, 0) &= \Phi + \sum_{mi} P_{mi} F_{im}(t), \\ \dot{S}(t, 0) &= \sum_{mi} \{ \dot{P}_{mi} F_{im}(t) + (P_{mi} - \langle P_{mi} \rangle_l^t) \dot{F}_{im}(t) \}. \end{aligned} \quad (1)$$

Здесь Φ – функционал Массье–Планка,

$$\langle P_{mi} \rangle_l^t = \text{Sp}(\rho_l P_{mi}), \quad \rho_l = e^{-S(t, 0)}.$$

Неоператорные величины $F_{im}(t)$, вошедшие в формулы (1), выбираются таким образом, что функции $F_{im}(t)$ и средние значения $\langle P_{mi} \rangle^t = \text{Sp}(\rho(t) P_{mi})$, вычисленные с использованием неравновесного статистического оператора

$$\rho(t) = \exp \left\{ -S(t, 0) + \int_{-\infty}^0 dt' e^{\epsilon t'} \dot{S}(t + t', t') \right\}, \quad \epsilon \rightarrow +0, \quad (2)$$

имеют смысл сопряженных термодинамических параметров. Для этого достаточно потребовать выполнения условия соответствия

$$\langle P_{mi} \rangle^t = \langle P_{mi} \rangle_l^t.$$

Исключим из $\dot{S}(t, 0)$ (1) временные производные $F_{im}(t)$, используя уравнения

$$\sum_n \frac{\delta^2 S}{\delta \langle P_{mi} \rangle_l^t \delta \langle P_{ni} \rangle_l^t} \langle \dot{P}_{ni} \rangle_l^t = \dot{F}_{im}(t), \quad (3)$$

где $S = \langle S(t, 0) \rangle^t$ – энтропия. Тогда, вводя в $\dot{S}(t, 0)$ (1) потоки энергии и импульса КЧ, с учетом выражений (2) и (3) получим

$$\begin{aligned} \dot{S}(t, 0) = \Delta \left\{ (F_{21} - \beta_1) \dot{H}_2 - \sum_{\alpha} F_{21} V^{\alpha} \dot{P}_2^{\alpha} - \frac{F_{21}}{m N_2} \sum_{\alpha} [\mathcal{P}_2^{\alpha} - m N_2 V^{\alpha}] \langle \dot{P}_2^{\alpha} \rangle_l^t \right\} - \\ - \Delta \left\{ \left[\tilde{H}_2 - \mu_2 N_2 - \frac{N_2 (N_2, \tilde{H}_2 - \mu_2 N_2)^t}{(N_2, N_2)^t} \right] \left\langle \dot{H}_2 - \sum_{\alpha} V^{\alpha} \dot{P}_2^{\alpha} \right\rangle^t \frac{F_{21}^2}{C_2} \right\}. \quad (4) \end{aligned}$$

Здесь использованы следующие обозначения: $\Delta A = A - \langle A \rangle_l^t$, m – масса КЧ, μ_2 – квазихимический потенциал КЧ,

$$\tilde{H}_2 = H_2 - \sum_{\alpha} V^{\alpha} \mathcal{P}^{\alpha} + \frac{1}{2} m V^2 N_2, \quad C_2 = F_{21}^2 (\tilde{H}_2 - \mu_2 N_2; \tilde{H}_2 - \mu_2 N_2)^t$$

– теплоемкость КЧ, $1/\beta_1$ – температура термостата,

$$(P_{mi}, P_{nj})^t = \int_0^1 d\tau \operatorname{Sp} \{ P_{mi} e^{-\tau S_0(t, 0)} [P_{nj} - \langle P_{nj} \rangle_l^t] e^{(\tau-1) S_0(t, 0)} \} \quad (5)$$

– корреляционная функция, $i\dot{P}_{mi} = [P_{mi}, H]$.

Предполагая, что взаимодействие КЧ с электронами является слабым, разложим оператор $\rho(t)$ по степеням потенциала этого взаимодействия, учитывая при этом вид $\dot{S}(t, 0)$ (4). Сохраняя в полученном разложении члены первого порядка, запишем статистический оператор в виде

$$\begin{aligned} \rho(t) = \rho_l(t) + \int_{-\infty}^0 dt' e^{\epsilon t'} \int_0^1 d\tau e^{-\tau S_0(t, 0)} \Delta \left\{ [F_{21}(t+t') - \beta_1] \dot{H}_2(t') - \right. \\ \left. - \sum_{\alpha} F_{21}(t+t') V^{\alpha}(t+t') \dot{P}_2^{\alpha}(t') \right\} e^{(\tau-1) S_0(t, 0)} - \\ - \int_0^1 d\tau e^{-\tau S_0(t, 0)} \Delta [\beta_1 (W_c^{(2)} + W_p^{(2)})] e^{(\tau-1) S_0(t, 0)}, \quad (6) \end{aligned}$$

где

$$\begin{aligned} S_0(t, 0) = \Phi_0 + F_{21} \left(H_2 - \sum_{\alpha} V^{\alpha} \mathcal{P}_2^{\alpha} - \tilde{\mu}_2 N_2 \right) + \tilde{B}, \\ \Phi_0 = \ln \operatorname{Sp} \exp \left\{ -F_{21} \left(H_2 - \sum_{\alpha} V^{\alpha} \mathcal{P}_2^{\alpha} - \tilde{\mu}_2 N_2 \right) - \tilde{B} \right\}, \\ \tilde{\mu}_2 = \mu_2 - \frac{1}{2} m V^2, \quad \tilde{B} = \beta_1 (H_1 - \mu_1 N_1), \end{aligned}$$

μ_1 – химический потенциал электронов.

Запишем уравнение баланса для подсистемы $\{2\}$. Изменение направленного импульса КЧ в результате электронных столкновений и, как следствие, рост поперечного импульса происходит за время порядка длительности одного столкновения. За столь короткое время поперечная энергия КЧ не меняется, поскольку ее рост возможен только в результате большого числа столкновений. Рост поперечной энергии

происходит за время порядка времени релаксации в подсистеме $\{2\}$. Уравнения движения для операторов H_2 и P_2 , которые в сопровождающей системе координат включают поперечные составляющие физических величин, могут быть записаны в форме

$$\begin{aligned}\dot{H}_2 &= \dot{H}_{2(c)} + n_2 \sum_{\alpha} \mathcal{F}^{\alpha} V^{\alpha}, & \dot{H}_1 &= -\dot{H}_2, \\ \dot{P}_2^{\alpha} &= \dot{P}_{2(c)}^{\alpha} + n_2 \mathcal{F}^{\alpha}, & \dot{P}_1 &= 0, & \dot{N}_1 &= 0,\end{aligned}\tag{7}$$

где n_2 – плотность КЧ, $\alpha = \{x, y\}$,

$$\dot{H}_{2(c)} = -i[H_0^{(2)}, W_c^{(2)}], \quad \dot{P}_{2(c)} = -i[P_2, W_c^{(2)}].$$

Индекс “с” в выражениях (7) указывает на то, что изменение величин обусловлено столкновениями КЧ с одночастичными возбуждениями электронного газа. Что же касается взаимодействия с плазмонами, то его можно описать в терминах силы [5]:

$$\mathcal{F}^{\alpha} = \frac{2e^2}{\pi^2} \int d\omega \int d\mathbf{q} \frac{1}{q^2} q^{\alpha} \text{Im} \mathcal{E}^{-1}(\mathbf{q}, \omega) \frac{1}{2} \delta\left(\omega - (\mathbf{q}\mathbf{V}) - \frac{q^2}{2m}\right),$$

где $\mathcal{E}(\mathbf{q}, \omega)$ – диэлектрическая функция электронов.

В условиях слабого взаимодействия КЧ с электронами квазitemпература КЧ и температура термостата изменяются настолько медленно, что можно ограничиться стационарным вариантом теории. В этом случае для получения уравнений достаточно усреднить (7) по распределению (6) в условиях стационарности. После усреднения находим уравнение баланса поперечной энергии быстрых частиц и уравнение баланса поперечного импульса частиц:

$$\begin{aligned}& \int_{-\infty}^0 dt' e^{\epsilon t'} (\dot{H}_{2(c)}, \dot{H}_{2(c)}(t')) (F_{21} - \beta_1) + \sum_{\alpha} n_2 \mathcal{F}^{\alpha} V^{\alpha} - \\ & - \sum_{\alpha} F_{21} V^{\alpha} \int_{-\infty}^0 dt' e^{\epsilon t'} (\dot{H}_{2(c)}, \dot{P}_{2(c)}^{\alpha}(t')) = 0, \\ & \int_{-\infty}^0 dt' e^{\epsilon t'} (\dot{P}_{2(c)}^{\alpha}, \dot{H}_{2(c)}(t')) (F_{21} - \beta_1) + \mathcal{F}^{\alpha} n_2 - \\ & - \sum_{\beta} F_{21} V^{\beta} \int_{-\infty}^0 dt' e^{\epsilon t'} (\dot{P}_{2(c)}^{\alpha}, \dot{P}_{2(c)}^{\beta}(t')) = 0.\end{aligned}\tag{8}$$

В соответствии с общими принципами кинетической теории [6] отбросим в уравнениях (8) “недиагональные” корреляционные функции, так как они дают вклад более высокого порядка по потенциалу взаимодействия, чем вклад “диагональных” функций. Вместе с тем вклад “диагональных” функций (5) в условиях слабого взаимодействия достаточно вычислить в борновском приближении. С учетом этих приближений на основе уравнений (8), исключая из них силу торможения, находим уравнение баланса энергии-импульса:

$$n_2 F_{21} \sum_{\alpha\beta} \langle (V^{\alpha} V^{\beta}) \rangle_0 \mathcal{D}_{p_{\alpha} p_{\beta}} + (F_{21} - \beta_1) \langle (H_2)^2 \rangle_0 \nu_{E_{\perp}} = 0.\tag{9}$$

Здесь

$$\begin{aligned} \langle \dots \rangle_0 &= \text{Sp}(\rho_0 \dots), \quad \rho_0 = e^{-S_0(0,0)}, \\ \mathcal{D}_{p_\alpha p_\beta} &= \frac{1}{n_2} \int_{-\infty}^0 dt' e^{\epsilon t'} (\dot{P}_{2(c)}^\alpha, \dot{P}_{2(c)}^\beta(t')) \end{aligned} \quad (10)$$

– диффузионная функция КЧ в пространстве поперечных импульсов,

$$\nu_{E_\perp} = \frac{Q}{\langle (H_2)^2 \rangle_0}, \quad Q = \int_{-\infty}^0 dt' e^{\epsilon t'} (\dot{H}_{2(c)}, \dot{H}_{2(c)}(t')) \quad (11)$$

– частота релаксации поперечной энергии и диссипативная функция КЧ, соответственно. Поскольку уравнение (9) получено в сопровождающей системе координат, вошедший в него параметр $1/F_{21}$ следует интерпретировать как поперечную квазitemпературу КЧ, т.е. параметр, сопряженный поперечной энергии КЧ.

Стационарная квазitemпература в подсистеме $\{2\}$ устанавливается в результате совместного воздействия, во-первых, диффузии КЧ в пространстве поперечной энергии, во-вторых, диссипативного процесса, обусловленного увлечением электронов частицами, колеблющимися в канале, и, в-третьих, внутренней термализацией подсистемы $\{2\}$, связанной с ангармонизмом колебания частиц [7]. Уравнение баланса (9) включает вклад диффузии (первый член) и диссипации (второй), но полностью не учитывает вклад термализации. Последнее определяется тем, что вклад ангармонизма является настолько малым, что теории каналирования, как правило, строятся в гармоническом приближении. Такая аппроксимация аналогична традиционному приближению теории броуновского движения и теории газов малой плотности, в которых изучаются частицы, взаимодействующие только с атомами среды, но не друг с другом.

Если считать, что частицы падают на решетку под малым углом к цепочке атомов, ориентированной в z -направлении, то в режиме каналирования их движение сопровождается осцилляциями в поперечном направлении. Если рассматривать осцилляции в x -направлении, то имеется одна диффузионная функция $\mathcal{D}(p_x)$, соответствующая $\alpha = \beta = x$. В этой упрощенной геометрии кинетические функции (10) и (11) были вычислены нами в работе [4]. Подставляя полученные там выражения в уравнение (9), находим окончательный вид уравнения баланса энергии-импульса:

$$\begin{aligned} 2\pi n_2 \langle E_\perp^k \rangle_0 4F_{21} \int_0^\infty d\omega \int d\mathbf{q} q_x^2 |U(q)|^2 \text{Im} \langle \rho_{\mathbf{q}} | \dot{\rho}_{\mathbf{q}}^+ \rangle_\omega \delta((\mathbf{q}\mathbf{V}) - \omega) + \\ + \frac{1}{4\pi} (F_{21} - \beta_1) \langle E_\perp^2 \rangle_0 \int_0^\infty d\omega \int d\mathbf{q} \frac{1}{\omega} \text{Im} \langle f_{\mathbf{q}} | \dot{f}_{\mathbf{q}}^+ \rangle_\omega \delta((\mathbf{q}\mathbf{V}) - \omega) = 0. \end{aligned} \quad (12)$$

Здесь $E_\perp^k$ и $E_\perp$ – поперечная кинетическая энергия и полная поперечная энергия КЧ, $U(q) = e^2 Z_1 / q^2$, $\rho_{\mathbf{q}}$ – фурье-компонента флуктуации электронной плотности,

$$f_{\mathbf{q}} = i \frac{1}{q} \sum_{\mathbf{k}\mathbf{q}'} (\mathbf{q}\mathbf{q}') U(q') e^{i\mathbf{q}'\mathbf{R}} \dot{a}_{\mathbf{k}-\mathbf{q}-\mathbf{q}'}^+ a_{\mathbf{k}}$$

– фурье-компоненты флуктуационной составляющей силы, действующей на электрон со стороны осциллирующей КЧ [4], $\mathbf{R}$ – радиус-вектор КЧ, $\dot{a}_{\mathbf{k}}^+$ и $a_{\mathbf{k}}$ – операторы

ры Ферми, $\langle \langle \rho_{\mathbf{q}} | \rho_{\mathbf{q}}^+ \rangle \rangle_{\omega}$ и $\langle \langle f_{\mathbf{q}} | f_{\mathbf{q}}^+ \rangle \rangle_{\omega}$ – фурье-компоненты двухвременных функций Грина плотность-плотность и сила-сила [3].

Теперь выполним в уравнении (12) интегрирование по угловым переменным вектора q и разрешим преобразованное таким образом уравнение относительно $1/F_{21}$. В результате (после ряда громоздких преобразований) получаем искомое выражение:

$$\frac{1}{F_{21}} = \frac{1}{\beta_1} \left[1 + (2\pi)^2 K \frac{a}{b} \right]. \quad (13)$$

Здесь

$$\begin{aligned} a &= \int d\sigma(k) k \int d\omega \left[1 - \left(\frac{\omega}{kv_0} \right)^2 \right] \frac{4v_F}{v_0} \int_0^\infty dE \left\{ n_e(E + \omega) - n_e(E) \right\}, \\ b &= \frac{1}{(2\pi)^2} \int d\omega \frac{1}{2\pi\omega} \frac{1}{v_F} \int_0^\infty dE \left\{ n_e(E + \omega) - n_e(E) \right\} \times \\ &\quad \times \int d\mathbf{k}' \int d\mathbf{k}'' |U(k'')|^2 \frac{(\mathbf{k}'\mathbf{k}'')^2}{(k')^2 |\mathbf{k}' + \mathbf{k}''|^2} \delta \left((\mathbf{k}'\mathbf{v}_0) + \frac{(k')^2}{2m} - \omega \right). \end{aligned} \quad (14)$$

Кроме того, при записи выражений (13), (14) использованы следующие обозначения:

$$\begin{aligned} K &= \frac{\langle E_{\perp} \rangle_0}{\langle E_{\perp}^2 \rangle_0}, \\ d\sigma(k) &= \frac{1}{2\pi} |U(k)|^2 \frac{1}{v_F^2} k dk \end{aligned}$$

– сечение упругого рассеяния, v_F – скорость Ферми, $n_e(E)$ – функция распределения Ферми, v_0 – скорость КЧ в z -направлении.

Будем рассматривать электроны как вырожденный газ при нулевой температуре. В этой модели при $v_0 > v_F$ после интегрирования в выражениях (14) по $d\omega$, dE , $d\mathbf{k}'$ и подстановки полученных выражений в (13) имеем

$$\frac{1}{F_{21}} = \frac{1}{\beta_1} \left(1 + 20\pi^2 K \frac{\varepsilon_F}{k_F^3} \frac{I_1}{I_2} \right), \quad (15)$$

где

$$\begin{aligned} I_1 &= \int d\sigma(\theta) \left(\sin \frac{\theta}{2} \right)^3, \quad I_2 = \int d\sigma(\theta) \left(\sin \frac{\theta}{2} \right)^{5/2} I_3(\theta), \quad \varepsilon_F = \frac{1}{2} m v_F^2, \\ I_3(\theta) &= \int d\cos \varphi \left(\cos^2 \varphi + \frac{4}{3} \right) \left(\cos \varphi + \sin \frac{\theta}{2} \right)^{-1/2}, \quad \cos \theta = \frac{(\mathbf{k}'\mathbf{k}'')}{k'k''}, \quad k_F = m v_F. \end{aligned}$$

2. УГЛОВОЕ РАСПРЕДЕЛЕНИЕ КЧ ПОСЛЕ ПРОХОЖДЕНИЯ ЧЕРЕЗ ТОНКИЙ КРИСТАЛЛ И ЕГО ЗАВИСИМОСТЬ ОТ ПОПЕРЕЧНОЙ КВАЗИТЕМПЕРАТУРЫ КЧ

При движении быстрых частиц в осевом канале их скорость направлена под малым углом к кристаллографической оси. Поперечную кинетическую энергию частиц на входе и выходе из тонкого кристалла обозначим $\tau_{\perp}^{\text{in}}$ и $\tau_{\perp}^{\text{out}}$. Пусть площадь

базисной ячейки канала, которая лежит внутри контура поперечной потенциальной энергии $\Phi_{\perp}$, равна $f(\Phi_{\perp})$, причем энергия $\Phi_{\perp}$ не превышает критического значения Φ_h , а контур критической потенциальной энергии Φ_h проходит через седловую точку потенциального рельефа канала. Долю площади ячейки в поперечной плоскости внутри контура Φ_h обозначим f_h .

Предположим, что толщина кристалла $\sim L_{\text{coh}}$. Тогда нормированная доля состояний КЧ с полной поперечной энергией на выходе $E_{\perp}^{\text{out}}$ и поперечной кинетической энергией в интервале $(\tau_{\perp}^{\text{out}}, \tau_{\perp}^{\text{out}} + d\tau_{\perp}^{\text{out}})$ равна

$$\frac{1}{f(E_{\perp}^{\text{out}})} f'(E_{\perp}^{\text{out}} - \tau_{\perp}^{\text{out}}) d\tau_{\perp}^{\text{out}}.$$

Здесь использовано обозначение

$$f'(E_{\perp}^{\text{out}} - \tau_{\perp}^{\text{out}}) = \left. \frac{d}{d\Phi_{\perp}} f(\Phi_{\perp}) \right|_{\Phi_{\perp} = E_{\perp}^{\text{out}} - \tau_{\perp}^{\text{out}}}.$$

Будем считать, что при прохождении через кристалл поперечная энергия КЧ возрастает на $\varepsilon_{\perp}$ за счет электронного рассеяния. Тогда доля состояний частиц с начальной энергией $\tau_{\perp}^{\text{in}}$, которые получили дополнительную энергию $\varepsilon_{\perp}$ и вышли из кристалла, имея энергии в интервалах $(\tau_{\perp}^{\text{out}}, \tau_{\perp}^{\text{out}} + d\tau_{\perp}^{\text{out}})$ и $(E_{\perp}^{\text{out}}, E_{\perp}^{\text{out}} + dE_{\perp}^{\text{out}})$, равна

$$G(E_{\perp}^{\text{out}}, \tau_{\perp}^{\text{out}}, \tau_{\perp}^{\text{in}}, \varepsilon_{\perp}) d\tau_{\perp}^{\text{out}} dE_{\perp}^{\text{out}} = \frac{f'(E_{\perp}^{\text{out}} - \tau_{\perp}^{\text{out}})}{f(E_{\perp}^{\text{out}})} f'(E_{\perp}^{\text{out}} - \tau_{\perp}^{\text{in}} - \varepsilon_{\perp}) d\tau_{\perp}^{\text{out}} dE_{\perp}^{\text{out}}.$$

Когда подсистема КЧ достигает квазиравновесия на глубине $\sim L_{\text{coh}}$, вероятность того, что дополнительная энергия $\varepsilon_{\perp}$ лежит в интервале $(\varepsilon_{\perp}, \varepsilon_{\perp} + d\varepsilon_{\perp})$, имеет вид [8]

$$p(\varepsilon_{\perp}) = g(\varepsilon_{\perp}) n(\varepsilon_{\perp}),$$

где

$$\begin{aligned} n(\varepsilon_{\perp}) &= \lambda e^{-F_{21}\varepsilon_{\perp}}, \\ g(\varepsilon_{\perp}) &= f'(\varepsilon_{\perp} - \tau_{\perp}) \end{aligned} \quad (16)$$

– плотность состояний КЧ, $\lambda = e^{F_{21}\mu_2}$ – абсолютная активность КЧ. Абсолютная активность при высоких квазitemпературах КЧ (см. таблицу в приложении) является слабо меняющейся функцией и, если распределение (16) нормировано на единицу, ее можно заменить предельным значением $\lambda = 1$ при $1/F_{21} \rightarrow \infty$. Усредняя нормированную долю состояний по распределению (16), получаем

$$\begin{aligned} \left\langle G\left(E_{\perp}^{\text{out}}, \tau_{\perp}^{\text{out}}, \tau_{\perp}^{\text{in}}; \frac{1}{F_{21}}\right) \right\rangle d\tau_{\perp}^{\text{out}} dE_{\perp}^{\text{out}} &= \frac{f'(E_{\perp}^{\text{out}} - \tau_{\perp}^{\text{out}})}{f(E_{\perp}^{\text{out}})} \times \\ &\times \int_0^{\infty} d\varepsilon_{\perp} p(\varepsilon_{\perp}) f'(E_{\perp}^{\text{out}} - \tau_{\perp}^{\text{in}} - \varepsilon_{\perp}) d\tau_{\perp}^{\text{out}} dE_{\perp}^{\text{out}}. \end{aligned} \quad (17)$$

Теперь введем интегральное распределение КЧ. Будем считать, что эксперимент “на прострел” выполняется в условиях $\tau_{\perp}^{\text{out}} = \tau_{\perp}^{\text{in}}$. Кроме того, будем использовать линейное приближение, записывая часть площади базисной ячейки в виде $f(\Phi_{\perp}) =$

$(f_h/\Phi_h)\Phi_\perp$ [9], [10]. В этом приближении с учетом (16) интегральное распределение частиц равно

$$\begin{aligned} \frac{1}{\Phi_h} \mathcal{F}\left(\Phi_h, \tau_\perp^{\text{out}}; \frac{1}{F_{21}}\right) &\equiv \int_0^{\Phi_h} dE'_\perp \left\langle G\left(E'_\perp, \tau_\perp^{\text{out}}, \tau_\perp^{\text{out}}; \frac{1}{F_{21}}\right) \right\rangle = \\ &= \frac{f_h}{\Phi_h} \left[\ln\left(\frac{\Phi_h}{\tau_\perp^{\text{out}}}\right) - e^{F_{21}\tau_\perp^{\text{out}}} \Gamma(0, F_{21}\tau_\perp^{\text{out}}) \right], \end{aligned} \quad (18)$$

где $\Gamma(a, x)$ – неполная гамма-функция. Поскольку $\tau_\perp^{\text{out}} = E_0\theta_{\text{out}}^2$, где E_0 – энергия падающей частицы, формула (18) определяет распределение частиц по углам выхода θ_{out} в геометрии $\theta_{\text{in}} = \theta_{\text{out}}$.

Используя формулу (18), вычислим высоту пика углового распределения частиц, выходящих с обратной стороны кристалла толщиной $\sim L_{\text{coh}}$. Для расчета высоты необходимо принять во внимание тот факт, что кристаллическая пластина состоит из отдельных блоков и имеет мозаичную структуру с конечным углом разупорядочения блоков ψ_m . Учитывая гауссовское распределение блоков, после усреднения выражения (18) по мозаичной структуре запишем выражение для высоты пика в виде

$$I\left(\theta = 0; \frac{1}{F_{21}}\right) = \frac{\psi_{\text{det}}^2}{\psi_h^2} \int_0^\infty d\varphi \varphi \mathcal{F}\left(\Phi_h, E_0\varphi^2; \frac{1}{F_{21}}\right) \frac{1}{2\psi_m^2} e^{-\varphi^2/(2\psi_m^2)}. \quad (19)$$

Здесь $\Phi_h = E_0\psi_h^2$, $\psi_{\text{det}}^2/\psi_h^2$ – геометрический фактор, $\pi\psi_h^2$ – предельное значение телесного угла. Подставим выражение (18), где $\tau_\perp^{\text{out}} = E_0\varphi^2$, в высоту пика (19) и проинтегрируем по $d\varphi$. В результате высоту углового распределения удастся представить как функцию поперечной квазitemпературы КЧ:

$$I\left(\theta = 0; \frac{1}{F_{21}}\right) = f_h \frac{\psi_{\text{det}}^2}{\psi_h^2} \left[0.28 + 0.5 \ln\left(\frac{\Phi_h}{2E_0\psi_m^2}\right) + (2 - 4F_{21}E_0\psi_m^2)^{-1} \ln(2F_{21}E_0\psi_m^2) \right]. \quad (20)$$

Угловое распределение частиц имеет гауссовскую форму [11], [12]. Поэтому можно записать

$$I\left(\theta; \frac{1}{F_{21}}\right) = I\left(0; \frac{1}{F_{21}}\right) \exp\left\{-\frac{1}{1/F_{21}} E_0 [\theta - \sqrt{(\Delta\theta^2)_e}]^2\right\}. \quad (21)$$

Здесь

$$(\Delta\theta^2)_e = \frac{m_e}{2mE_0} \left(-\frac{dE}{dx}\right)_e L_{\text{coh}} \quad (22)$$

– приращение квадрата флуктуации угла за счет электронных столкновений на глубине когерентности, m_e – масса электрона, $(-dE/dx)_e$ – электронные энергетические потери частиц.

На рис. 1 представлено угловое распределение ионов йода после прохождения кристалла серебра (все параметры даны в приложении), вычисленное на основе формул (20)–(22). Как видно из рис. 1, форма теоретической кривой удовлетворительно согласуется с данными эксперимента (точки).

Сделаем еще два замечания. Во-первых, зависимость распределения (21) от квазitemпературы (15) определяется двумя факторами: экспоненциальным множителем, который растет с ростом $1/F_{21}$, и высотой пика (20), которая уменьшается

Рис. 1.

при увеличении $1/F_{21}$. Во-вторых, гауссовское распределение соответствует случаю $\theta_{\text{in}} = \theta_{\text{out}}$. Однако возможна и более сложная геометрия эксперимента “на прострел”, а именно, когда $\theta_{\text{in}} \neq \theta_{\text{out}}$ и направление выхода пучка совпадает с направлением атомной цепочки одной из кристаллографических плоскостей кристалла [13]. Тогда угловое распределение имеет два пика [13]: большой максимум в направлении $\theta_{\text{in}} = \theta_{\text{out}}$ и малый – в направлении цепочки. Последний связан с эффектом вовлечения первоначально неканализованных частиц в режим направленного движения под воздействием потенциала плоскости. Угловое распределение частиц, вовлеченных в режим, гауссовское.

Используя линейное приближение для $f(\Phi_{\perp})$ [9], [10], вычислим величину K , вошедшую в выражение (15). Для осевого канала в пределе $1/F_{21} \rightarrow \infty$ имеем

$$K = \frac{\int_0^{\Phi_h} d\varepsilon_{\perp} \varepsilon_{\perp} \frac{df(\varepsilon_{\perp} - \tau_{\perp})}{d\varepsilon_{\perp}}}{\int_0^{\Phi_h} d\varepsilon_{\perp} \varepsilon_{\perp}^2 \frac{df(\varepsilon_{\perp} - \tau_{\perp})}{d\varepsilon_{\perp}}} = \frac{3}{2} \frac{1}{\Phi_h}. \quad (23)$$

3. РАСПРЕДЕЛЕНИЕ ЧАСТИЦ ПО УГЛАМ ВЫХОДА В УСЛОВИЯХ ОБРАТНОГО РАССЕЯНИЯ. ЗАВИСИМОСТЬ РАСПРЕДЕЛЕНИЯ ОТ ПОПЕРЕЧНОЙ КВАЗИТЕМПЕРАТУРЫ КЧ

Будем считать, что атомные цепочки, образующие осевой канал, “заморожены” и среднеквадратичный разброс атомов в поперечной плоскости равен σ . Введем следующие обозначения: θ – угол между направлением скорости КЧ и осью цепочки, ρ' – расстояние частицы от оси цепочки в поперечной плоскости. Статистическая

механистическая теория [14] установила связь углового распределения $\tilde{I}(\theta)$ по поперечным кинетическим энергиям $E_{\perp}^k = E_0 \theta^2$ с распределением по полным поперечным энергиям $\tilde{P}(E_{\perp}(\theta, \rho'))$:

$$\tilde{I}(\theta) = 2 \int_0^{\rho_0} d\rho' \rho' \frac{\tilde{P}(E_{\perp}(\theta, \rho'))}{\rho_0^2 - \Lambda^2(\rho')}. \quad (24)$$

Здесь $E_{\perp}(\theta, \rho') = E_{\perp}^k + U_a(\rho')$, $\rho_0 = (\pi N d)^{-1/2}$ – радиус области, приходящейся на одну атомную цепочку в поперечной плоскости, N – плотность атомов решетки, d – расстояние между атомами цепочки. Величина $\Lambda(\rho')$, как показано в работе [14], определяется из условия $U_a(\Lambda) = E_{\perp}$.

Вычислим плотность состояний частиц в задаче обратного рассеяния. Разделяя составляющие радиус-вектора и скорости частиц (ρ, z) и $(v_{\perp}, v_z)$, запишем плотность вероятности нахождения частиц в интервале $(\rho, \rho + d\rho)$ со скоростями в интервалах $(v_z, v_z + dv_z)$ и $(v_{\perp}, v_{\perp} + dv_{\perp})$. Пусть $\tilde{d}(\theta)$ – глубина, начиная с которой на частицу действует усредненный потенциал цепочки U_a [1]. Тогда, учитывая, что на малой глубине (в приповерхностном слое) плотность состояний имеет гауссовскую форму [15], ее нетрудно записать на большей глубине, выполнив в выражении [15] замену ρ' на $\rho' + (v_{\perp} \tilde{d}(\theta)/v_z)$. Принимая во внимание, что в задачах обратного рассеяния параметр $\tilde{d}(\theta)$ можно заменить его асимптотическим значением $d/2$ [1], получаем

$$g\left(\rho', v_{\perp}, v_z, \theta \mid z = \frac{d}{2}\right) = (2\pi\sigma^2 \cdot 2\pi v_0 \sin \theta)^{-1} \times \\ \times \exp\left\{-\frac{1}{2\sigma^2}\left(\rho' - \frac{v_{\perp} d}{2v_z}\right)^2\right\} \delta(v_{\perp} - v_0 \sin \theta) \delta(v_z - v_0 \cos \theta).$$

Перейдем к плотности состояний в переменных θ, ρ' . Для этого $g(\rho', v_{\perp}, v_z, \theta \mid d/2)$ следует проинтегрировать по $dv_{\perp}, dv_z$. Запишем полученное таким образом выражение в безразмерной форме:

$$g(E_{\perp}(\theta, \rho')) = \sigma^{-2} \int_{\Lambda(\rho')}^{\rho_0} d\rho \rho \exp\left\{-\frac{1}{2}\left[B^2(\theta, \rho, \rho') + \left(\frac{\rho}{\sigma}\right)^2\right]\right\} J_0(iz'), \quad (25)$$

где

$$B^2(\theta, \rho, \rho') = \left(\frac{d}{2\sigma}\right)^2 \frac{1}{E_0} \{E_{\perp}(\theta, \rho') - U_a(\rho)\}, \quad z' = \frac{\rho}{\sigma} B(\theta, \rho, \rho'),$$

$J_0(x)$ – функция Бесселя.

Имея явный вид плотности (25), нетрудно обобщить угловое распределение на базе определений статистической термодинамики. С этой целью введем среднее число заполнения состояния с энергией

$$n(E_{\perp}(\theta, \rho')) = \lambda e^{-F_{21} E_{\perp}(\theta, \rho')} \quad (26)$$

(формула аналогична (16)). Используя (25) и (26), представим искомое угловое распределение как функцию поперечной квазitemпературы:

$$\tilde{I}\left(\theta; \frac{1}{F_{21}}\right) = 2 \int_0^{\rho_0} d\rho' \rho' \frac{1}{\rho_0^2 - \Lambda^2(\rho')} g(E_{\perp}(\theta, \rho')) n(E_{\perp}(\theta, \rho')). \quad (27)$$

Преобразуем выражение (27). Перейдем к безразмерным переменным

$$\zeta = \frac{\rho}{a_0}, \quad \zeta_0 = \frac{\rho_0}{a_0}, \quad \xi = \frac{\rho'}{a_0}, \quad \eta = \frac{a_0^2}{2\sigma^2},$$

$$\psi = \frac{\theta}{\psi_1}, \quad \varkappa^2 = \left(\frac{d^2}{8\sigma^2} \right) \left(\frac{U_0}{E_0} \right), \quad \gamma = \frac{R_{\text{eff}}}{a_0},$$

где a_0 – радиус экранирования, U_0 – высота потенциального барьера в случае осевого канала, ψ_1 – критический угол каналирования [1], $R_{\text{eff}} = \sqrt{a_0^2 + 2\sigma^2}$ – эффективный радиус действия с учетом смещения атома решетки из узла на расстояние σ . Далее запишем потенциал цепочки в виде $U_a(\zeta) = U_0 w(\zeta)$ и в первом приближении аппроксимируем $w(\zeta)$ ступенчатой функцией $\theta(\gamma - \zeta)$. После перехода к безразмерным переменным подставим (25) в (27). В результате преобразований распределение обратно рассеянных частиц, которые первоначально (в режиме каналирования) достигли глубины $\sim L_{\text{coh}}$, принимает вид

$$\tilde{I}\left(\psi; \frac{1}{F_{21}}\right) = 2\lambda\eta \frac{1}{\zeta_0^2} e^{-F_{21}U_0\psi^2} \{ \gamma^2 e^{-F_{21}U_0} R_1(\psi) + 2\tilde{R}_0(\psi) \}, \quad (28)$$

где

$$R_n(\psi) = \int_0^{\zeta_0} d\zeta \zeta \Phi_n(\psi, \zeta),$$

$$\tilde{R}_n(\psi) = \int_{\gamma}^{\zeta_0} d\xi \xi [\zeta_0 - \zeta_1(\psi, \xi)]^{-1} \int_{\zeta_1(\psi, \xi)}^{\zeta_0} d\zeta \zeta \Phi_n(\psi, \zeta),$$

$$\Phi_n(\psi, \zeta) = \exp\{ -[\eta\zeta^2 + \varkappa^2(\psi^2 - w(\zeta) + n)] \} \sum_{m=0}^{\infty} \varkappa^{2m} (m!)^{-2} \times$$

$$\times [\eta\zeta^2(\psi^2 - w(\zeta) + n)]^m.$$

Функция $\Phi_n(\psi, \zeta)$ в выражении (28) представлена в виде ряда по степеням $\varkappa^2$; поскольку в области высоких энергий $\varkappa^2 \ll 1$, индекс принимает два значения: $n = 0, 1$. Величина $\zeta_1(\psi, \xi)$ в (28) определена формулой

$$w(\zeta_1(\psi, \xi)) = \begin{cases} \psi^2 + w(\xi), & \psi^2 + w(\xi) \leq 1, \\ 0, & \psi^2 + w(\xi) > 1. \end{cases}$$

Сохраним в разложении функции $\Phi_n(\psi, \zeta)$ только первый член. Затем проинтегрируем $R_n(\psi)$ и $\tilde{R}_n(\psi)$ по $d\xi$, $d\zeta$ и подставим полученные выражения в распределение (28). В результате находим, что минимальный выход обратно рассеянных частиц $\chi_{\min}(1/F_{21}) = \tilde{I}(\psi = 0; 1/F_{21})$ в реальных физических условиях $\eta\zeta_0^2 \gg 1$ зависит от поперечной квазitemпературы (15) следующим образом:

$$\chi_{\min}\left(\frac{1}{F_{21}}\right) = \lambda \left(\frac{\gamma}{\zeta_0} \right)^2 e^{-F_{21}U_0}. \quad (29)$$

Как показано в работе [8], для перехода от выражений статистической термодинамики к формулам теории Линдхарда [1] достаточно выполнить предельный переход

Рис. 2.

$1/F_{21} \rightarrow \infty$. В этом пределе формула (29) дает

$$\chi_{\min} = \left(\frac{\gamma}{\zeta_0} \right)^2 = \frac{a_0^2 + 2\sigma^2}{\rho_0^2},$$

что полностью совпадает с выражением, полученным в работе [1].

В широком интервале углов расчет распределения обратно рассеянных частиц возможен на базе формулы (28) и методов численного интегрирования. Результат такого расчета показан на рис. 2, где представлено угловое распределение протонов с энергией 1.6 МэВ, первоначально прошедших в осевом канале [110] кристалла кремния. Кривые на рис. 2 соответствуют трем значениям квазitemпературы (15), а именно: 1) $1/F_{21} = U_0/3$, 2) $1/F_{21} = 2U_0/3$, 3) $1/F_{21} = U_0$. Согласно рис. 2 минимум углового распределения убывает с уменьшением $1/F_{21}$, что полностью согласуется с результатом аналитической теории (29).

4. КОНСТАНТА СКОРОСТИ НЕОБРАТИМОГО ПРОЦЕССА В СИЛЬНО НЕРАВНОВЕСНОЙ СИСТЕМЕ, ЕЕ ЗАВИСИМОСТЬ ОТ КВАЗИТЕМПЕРАТУРЫ

В работе [8] было установлено, что на глубине проникновения $\sim L_{\text{coh}}$, несмотря на достижение внутреннего равновесия в подсистеме КЧ, система в целом остается сильно неравновесной с большим отрывом термодинамических параметров отдельных подсистем.

Первичными процессами прохождения КЧ через кристалл являются акты рассеяния частиц на электронах и фононах. Каждый акт сопровождается переходом

КЧ между уровнями поперечной энергии. Если в процессе случайных блужданий по уровням КЧ достигает уровня ω_{s_0} , соответствующего потенциалу захвата частицы в режим каналирования, то она переходит в хаотическую часть пучка, т.е. деканализируется. Акт деканализирования можно описать с помощью “квазихимической” реакции вида

где символ A_i соответствует частицам i -й подсистемы, а $S\{A_1\}$ – совокупности атомов термостата. Согласно реакции (30), деканализирование помимо перехода КЧ на уровень ω_{s_0} (константа скорости k_1) включает обратный процесс – релаксацию с константой скорости k_{-1} и квазихимическое превращение $\{2\} \rightarrow \{3\}$ с константой k_2 . Поскольку плотность атомов термостата на много порядков выше плотности КЧ, можно утверждать [16], что стационарное течение реакции (30) наступает достаточно быстро. Причем в стационарном режиме переходы $\{2\} \rightarrow \{3\}$ и релаксация уравниваются образованием возбужденных частиц по реакции с константой скорости k_1 . Поскольку термодинамические параметры термостата значительно отличаются от параметров КЧ (оценка квазitemпературы (15), (23) в случае каналирования ионов йода в кристалле серебра дает $1/F_{21} \sim 5$ эВ), в условиях уравнивания, указанного выше, выполняется соотношение $k_1/k_{-1} = e^{-F_{21}\omega_{s_0}}$.

Для КЧ релаксация с константой скорости k_{-1} предпочтительнее резонансного перехода $\{2\} \rightarrow \{3\}$ (резонанс по энергиям), поэтому $k_2 \ll k_{-1}$. Учитывая это условие и соотношение химической кинетики для двухстадийной реакции [16], можно записать константу скорости реакции (30) в следующем виде:

$$k_{\text{tot}} = k_2 \left(\frac{k_{-1}}{k_1} + 1 \right)^{-1}. \quad (31)$$

Подставляя явный вид отношения k_1/k_{-1} в (31), получаем

$$k_{\text{tot}} = \nu(F_{21}) \equiv \{e^{F_{21}\omega_{s_0}} + 1\}^{-1}. \quad (32)$$

Итак, константа скорости деканализирования (32) включает поперечную квазitemпературу КЧ в виде функции $\nu(F_{21})$. Та же самая функция вошла в коэффициент деканализирования, полученный на основе обобщенных уравнений переноса [2], [17].

Область применимости реакции (30) не исчерпывается процессом деканализирования. Ее можно использовать при анализе широкого круга процессов, обусловленных случайными блужданиями частиц по уровням колебательной энергии между поглощающим и отражающим барьерами. В частности, реакция (30) описывает диссоциацию молекул в плазме. Большое отклонение системы от термодинамического равновесия в этом случае связано с незавершенностью колебательной релаксации, что в свою очередь приводит к значительному отрыву температуры колебательных степеней свободы от поступательной температуры [18]. Напомним, что в теории диссоциации [18] молекула рассматривается как осциллятор, который в результате столкновений с другими молекулами (осцилляторами) совершает переходы между

колебательными уровнями. Если при этом молекула достигает уровня с энергией E_D , равной энергии диссоциации, то последующее столкновение приводит к переходу ее из дискретного спектра в непрерывный, т.е. к распаду молекулы.

Учитывая различие термодинамических параметров в теории каналирования и диссоциации, из соотношения (32) можно выделить две ветви:

$$k_{\text{tot}} = \begin{cases} \frac{1}{2} \frac{1}{F_{21}\omega_{s0}} \left(\frac{1}{2} + \frac{1}{F_{21}\omega_{s0}} \right)^{-1}, \\ e^{-E_D/T_V}. \end{cases} \quad (33)$$

Первая ветвь соответствует деканалированию протонов ($E_0 \sim 1$ МэВ, $2F_{21}\omega_{s0} < 1$), вторая – диссоциации молекул в плазме ($F_{21}E_D \equiv (E_D/T_V) > 1$). Отметим, что во вторую ветвь константы скорости может дополнительно входить множитель, описывающий отставание T_V от поступательной температуры. Кроме того, в условиях слабой дискретности спектра поперечной энергий КЧ диффузию частиц в поперечном энергетическом пространстве можно рассматривать как непрерывный безактивационный процесс. В то же время процесс диссоциации (вторая ветвь k_{tot}) является активированным.

5. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

5.1. Квazитемпература как модуль квазиравновесного распределения.

Выражения (16) и (26) – это квазиравновесные распределения в макроскопически малом объеме, внутри которого в данный момент времени находится быстрая частица. В этом объеме, точнее, внутри блока когерентных областей [19], устанавливается распределение, модулем которого является поперечная квазитемпература $1/F_{21}$ (15). Остальной объем кристалла, исключая блок когерентных областей, остается в состоянии термодинамического равновесия с температурой $1/\beta_1$, причем $1/\beta_1 \ll 1/F_{21}$. В этой постановке задачи нет противоречия с общими принципами неравновесной термодинамики [3]; последняя допускает наличие в системе двух масштабов времени релаксации и, что особенно важно, малого времени установления квазиравновесия в макроскопически малом объеме.

Состояние системы можно описать не только набором средних величин $\langle P_{\min} \rangle$, но и набором дисперсий этих величин. Стационарное значение квазитемпературы $1/F_{21}$ в принципе нетрудно связать со стационарной дисперсией поперечной энергии КЧ. Однако мы выбрали иной подход, основанный на уравнении баланса (12), что дало возможность отдельно вычислить вклад диффузии частиц в пространстве поперечной энергии (“разогрев” подсистемы $\{2\}$) и вклад диссипативного процесса (охлаждение подсистемы $\{2\}$). Если же пойти по пути прямого вычисления дисперсии, то учесть диссипацию энергии КЧ за счет увлечения электронов колеблющимся в канале рассеивающим центром [4] не представляется возможным.

Что касается зависимости угловых распределений от квазитемпературы (15), то высота максимума (20) распределения частиц, прошедших через кристалл, убывает с ростом $1/F_{21}$, а минимальный выход (29) в условиях обратного рассеяния растет. Учитывая пропорциональность квазитемпературы КЧ (15) температуре термостата, можно утверждать, что $I(0; 1/F_{21})$ уменьшается, а $\chi_{\min}(1/F_{21})$ увеличивается с

ростом $1/\beta_1$. Такой температурный ход наблюдался в экспериментальных исследованиях: в работе [20] – для высоты пика, в работах [21], [22] – для минимального выхода.

5.2. Приложение аналитической теории угловых распределений. Поперечная квазitemпература (15) доступна для экспериментального измерения, если использовать высоту пика углового распределения, полученного в рамках эксперимента “на прострел”. Действительно, если наблюдаемое значение пика $I(0; 1/F_{21})$ подставить в выражение (20), то последнее трансформируется в трансцендентное уравнение для $1/F_{21}$ (все остальные параметры в условиях конкретного эксперимента известны). Решение трансцендентного уравнения дает значение $1/F_{21}$. Например, при прохождении ионов йода через кристалл серебра имеем $1/F_{21} = 6$ эВ (кристалл А), $1/F_{21} = 13$ эВ (кристалл Б) (подробности см. в приложении). Высокие значения квазitemпературы являются следствием квазиупругого рассеяния КЧ на электронах, когда $\nu_{p\perp} \gg \nu_{E\perp}$, где $\nu_{p\perp}$ – частота релаксации поперечного импульса КЧ.

ПРИЛОЖЕНИЕ

На рис. 1 представлено угловое распределение ионов йода, прошедших через кристалл серебра [9], [10]: толщина кристалла 0.835 мкм, энергия КЧ 12.6 МэВ, осевой канал [011], $\Phi_h = 120$ эВ, $(-dE/dx)_e = 3.7$ МэВ/мкм, $f_h = 0.31$, $\psi_{\text{det}} = 0.012$ град.

В таблице даны значения поперечной квазitemпературы КЧ, вычисленные на основе экспериментальных данных [9], [10]. Рассмотрено прохождение КЧ через два кристалла серебра (А и Б).

	Критическая энергия Φ_h , эВ	Критический угол ψ_h , град.	Угол разупорядочения ψ_m , град.	Высота пика $I(0; 1/F_{21})$	Квазitemпература $1/F_{21}$, эВ
Кристалл А $L = 0.835$ мкм	60	0.12	0.025	$21.9 \cdot 10^{-4}$	6
Кристалл Б $L = 0.775$ мкм	120	0.14	0.022	$2.3 \cdot 10^{-3}$	13

Список литературы

- [1] *J. Lindhard.* Mat-Fyz. Medd. Danske Vid. Selsk. 1965. V. 34. № 14. P. 1.
- [2] *Д. Н. Зубарев, Ю. А. Кашилев.* ТМФ. 1976. Т. 29. № 3. С. 376.
- [3] *Д. Н. Зубарев.* Неравновесная статистическая термодинамика. М.: Наука, 1971.
- [4] *Ю. А. Кашилев.* ТМФ. 2004. Т. 138. № 1. С. 144.
- [5] *G. J. Kutcher, M. H. Mittleman.* Phys. Rev. A. 1975. V. 11. № 1. P. 125.
- [6] *K. H. Mitchel.* Physica. 1964. V. 30. № 4. P. 2194.
- [7] *F. Abel, G. Amsel, M. Bruneaux, C. Cohen, A. L'Heir.* Phys. Rev. B. 1975. V. 12. № 11. P. 4617.
- [8] *Yu. A. Kashlev.* Phys. Stat. Sol. B. 1995. V. 190. P. 379.

- [9] *J. H. Barrett, B. R. Appleton, T. S. Noggle, C. D. Moak, J. A. Biggerstaf, S. Datz, R. Behrisch.* Hyperchanneling. In: Proc. of the 5th Int. Conf. on Atomic Collisions in Solids (Gathungurg, Tennessee, September 24–28, 1973). Vol. 2. Eds. S. Datz, B. R. Appleton, C. D. Moar. N.Y.: Plenum, 1975. P. 645.
- [10] *B. R. Appleton, J. H. Barrett, T. S. Noggle, C. D. Moak.* Rad. Eff. 1972. V. 13. P. 171.
- [11] *L. C. Feldman, B. R. Appleton.* Phys. Rev. B. 1973. V. 8. № 3. P. 935.
- [12] *H. F. Krause, J. H. Barrett, S. Datz, P. F. Dittner, N. L. Jones, J. Gomes del Campo, C. R. Vane.* Phys. Rev. A. 1994. V. 48. P. 283.
- [13] *B. R. Appleton, C. Erginsoy, W. M. Gibson.* Phys. Rev. 1967. V. 161. P. 330.
- [14] *J. V. Andersen.* Mat.-Fyz. Medd. Danske Vid. Selsk. 1967. V. 36. № 7. P. 1.
- [15] *J. A. Ellison.* Phys. Rev. B. 1978. V. 18. № 11. P. 5948.
- [16] *Т. Келети.* Основы ферментативной кинетики. М.: Мир, 1990.
- [17] *Ю. А. Кашлев.* ТМФ. 1977. Т. 30. № 1. С. 82.
- [18] *А. И. Осипов.* Теор. и экспер. химия. 1966. Т. 11. Вып. 5. С. 649.
- [19] *M. Rahman.* Phys. Rev. B. 1995. V. 52. № 5. P. 3384.
- [20] *S. U. Campisano, G. Foti, E. Rimini.* Nucl. Instr. Methods. 1976. V. 132. P. 169.
- [21] *K. Gartner, W. Wesch, G. Gotz.* Nucl. Instr. Methods Phys. Res. B. 1990. V. 48. P. 192.
- [22] *J. H. Barrett, D. P. Jackson.* Nucl. Instr. Methods. 1980. V. 170. P. 115.

Поступила в редакцию 26.IV.2005 г.,
после доработки 4.VII.2005 г.