

# Дифракция микрочастиц на однослойных и многослойных статистически неровных поверхностях

**Михаил Батанов-Гаухман**<sup>1</sup>

к.т.н., доцент каф. 207 Института № 2 “Авиационные и ракетные двигатели и энергетические установки” ФГБОУВО «Московский авиационный институт (национальный исследовательский университет)», Волоколамское шоссе, д. 4, г. Москва, 125993

**Аннотация:** В данной статье: *а)* разработан метод и выведены формулы для расчета объемных диаграмм упругого рассеяния микрочастиц (в частности электронов и фотонов) на однослойных и многослойных, статистически неровных поверхностях; *б)* объяснена дифракция элементарных частиц на кристаллах без привлечения идеи де Бройля о волновых свойствах материальных частиц; *в)* получены функции плотности распределения вероятности производной различных стационарных случайных процессов; *г)* получены объемные диаграммы рассеяния частиц и фотонов на однородных и изотропных неровных поверхностях с гауссовым, равномерным, лапласовым, синусоидальным и др. распределениями высот неровностей.

**Ключевые слова:** дифракция электронов на кристалле, диаграмма рассеяния частиц, диаграмма рассеяния волн, объемная диаграмма рассеяния, статистически неровная поверхность, производная стационарного случайного процесса, кирхгофовское приближение

03.65.–w (Quantum mechanics)

05.30.–d (Quantum statistical mechanics)

## Сокращения (Abbreviations)

ДУРМ – диаграмма упругого рассеяния микрочастиц;

СКО – среднеквадратичное отклонение;

ССП – стационарный случайный процесс;

ФПРВ – функция плотности распределения вероятности.

---

<sup>1</sup> [alsignat@yandex.ru](mailto:alsignat@yandex.ru)

## 1 Введение

В 1924 г. Луи де Бройль предположил, что равномерно и прямолинейно движущейся частице с массой  $m$  и скоростью  $\mathbf{v}$  можно поставить в соответствие плоскую волну

$$\psi = \exp\{i(Et - \mathbf{p}\mathbf{r})/h\}, \quad (1.1)$$

где  $E$  – кинетическая энергия частицы;  $\mathbf{p} = m\mathbf{v}$  – ее импульс;  $h$  – постоянная Планка.

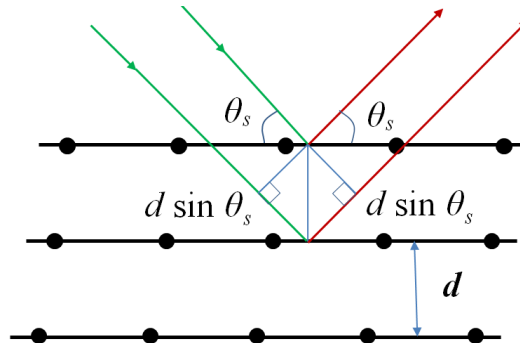
Длина такой монохроматической волны определяется формулой де Бройля

$$\lambda_b = h/mv. \quad (1.2)$$

Данная идея послужила основанием для развития корпускулярно-волнового дуализма и, в частности, позволила объяснить ряд экспериментов по дифракции электронов, нейтронов и атомов на кристаллах и тонких пленках [1, 2]. В связи с этим, принято считать, что дифракционные максимумы в эксперименте Дэвиссона - Джермера появляются в направлениях, отвечающих условию Брэгга - Вульфа  $2d \sin \theta_s = n\lambda_{eb}$ , или с учетом преломления «электронных волн» в кристалле [1]:

$$2d(n_e^2 - \cos^2 \theta_s)^{\frac{1}{2}} = n\lambda_{eb}, \quad (1.3)$$

где  $d$  – межплоскостное расстояние кристаллической решетки,  $\theta_s$  – брэгговский угол скольжения (рис. 1),  $n = 1, 2, 3, \dots$  – порядок интерференции (или отражения),  $\lambda_{eb}$  – длина электронной волны де Бройля,  $n_e$  – показатель преломления электронной волны де Бройля.

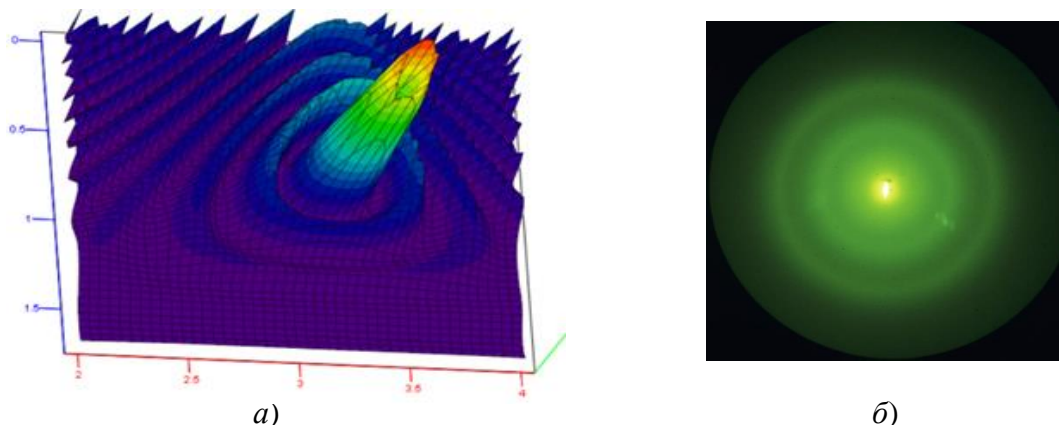


**Рис. 1** Условие Брэгга - Вульфа при дифракции микрочастиц (в частности, электронов или фотонов) на поверхности кристалла.  $\rightarrow$  – направление движения падающих микрочастиц;  $\rightarrow$  – направление движения отраженных микрочастиц

Проблема, однако, заключается в том, что за прошедшие 95 лет волны де Бройля не были обнаружены экспериментально. Они так и остались вспомогательной ментальной конструкцией, которая позволяет описать явление математически, не раскрывая сути происходящих при этом событий.

В этой статье показано, что дифракция микрочастиц на кристалле может быть описана без привлечения идеи де Бройля о волновых свойствах материи. Опираясь на законы отражения геометрической оптики и теорию вероятностей, в конце данной статьи получена

формула (3.9) [или (3.10)] для расчета диаграмм упругого рассеяния микрочастиц (ДУРМ) на многослойной поверхности кристалла. Результаты расчетов по этой формуле согласуются с экспериментально полученными электронограммами (рис. 1а).



**Рис. 1а** а) Объемная диаграмма рассеяния микрочастиц на многослойной поверхности кристалла, полученная в результате расчетов по формуле (3.9); б) Экспериментально полученная электронограмма (фотография из <https://www.sciencephoto.com/media/3883/view>)

Кроме того, в данной статье разработан метод расчета объемных диаграмм рассеяния микрочастиц на неровных поверхностях с различными статистиками высот неровностей.

Под «микрочастицами» в данной работе подразумеваются любые частицы (фермионы и бозоны), размеры (или длина волны) которых много меньше характерных размеров неровностей отражающей поверхности (кирхгофовское приближение), и отражение которых происходит по законам геометрической оптики. Например, «микрочастицей» может называться электрон с эффективным размером порядка  $10^{-13}$  см, который отражается от поверхности кристалла с характерными размерами неровностей более  $10^{-11}$  см. Также «микрочастицей» может считаться футбольный мяч с диаметром 22,3 см, отражающийся от неровной твердой поверхности, усредненный радиус кривизны которой более 20 м. К «микрочастицам» также относятся фотоны и фононы с длиной волны  $\lambda$  на два порядка меньшей, чем радиус автокорреляции высот неровностей отражающей поверхности (Приложение 1).

Рассеянию частиц и волн на неровной границе двух сред посвящена обширная литература, например, [3 – 27]. Однако формулы для расчета объемных диаграмм рассеяния частиц или волн на поверхностях с различными статистиками высот неровностей в случае кирхгофовского приближения в литературе практически отсутствуют, и в этой статье приводятся впервые.

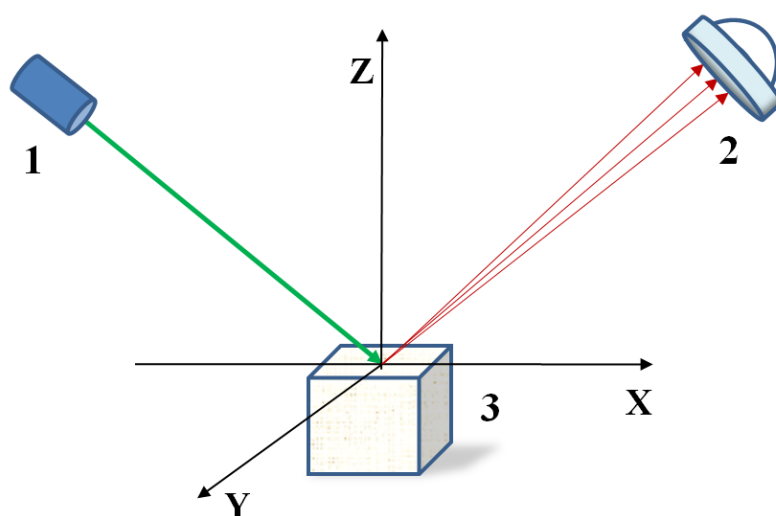
В статье получены объемные диаграммы упругого рассеяния микрочастиц на однородных и изотропных неровных поверхностях с гауссовым, равномерным, лапласовым, синусоидальным и др. распределениями высот неровностей. Данные диаграммы рассеяния, относятся к любым вышеперечисленным микрочастицам (фермионам и бозонам).

## 2 Метод

Целью данного раздела статьи является разработка метода расчета объемных диаграмм упругого рассеяния микрочастиц (ДУРМ) (в частности, электронов, фотонов или фононов) на статистически неровных поверхностях при выполнении условий кирхгофского приближения (т.е. когда усредненный радиус кривизны или радиус автокорреляции неровностей отражающей поверхности значительно больше размеров или длины волны микрочастиц).

### 2.1 Отражение упругих микрочастиц от неровной поверхности

Рассмотрим падение микрочастиц на поверхность твердого (или жидкого) тела (рис. 2) под углами  $\vartheta$  и  $\gamma$  (рис. 3), и их отражение от данной поверхности под углами  $\nu$  и  $\omega$ .



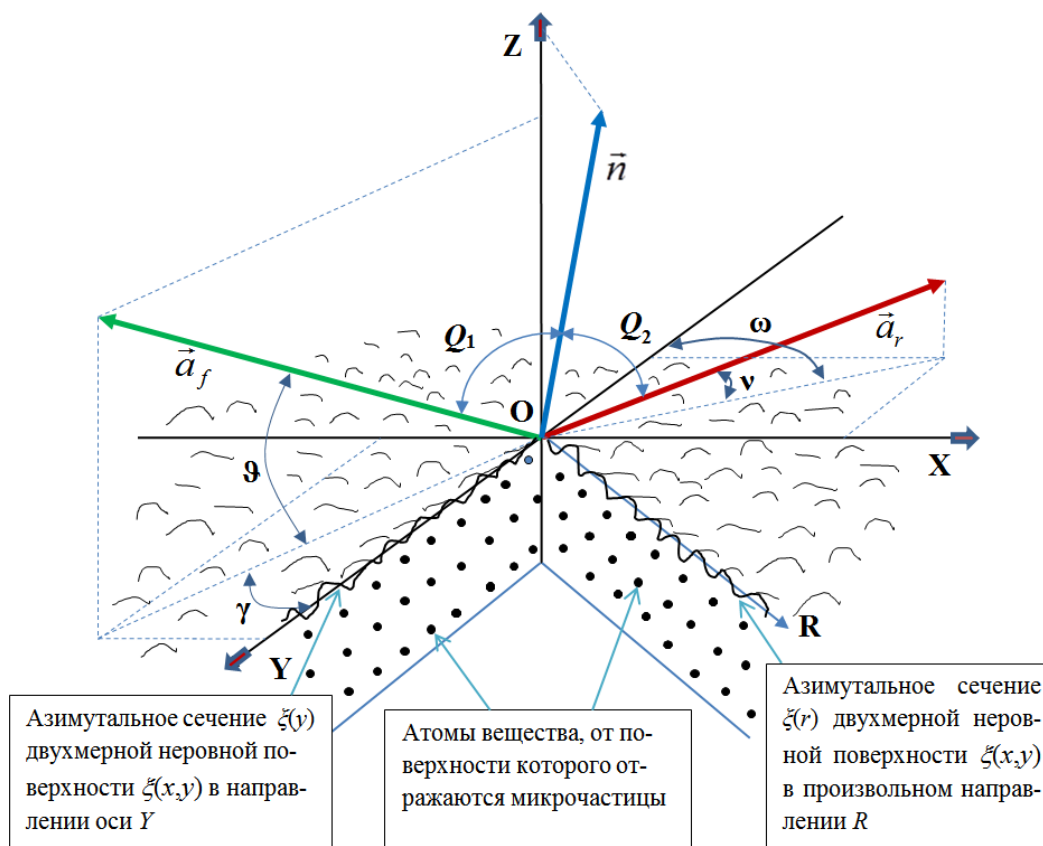
**Рис. 2** Рассеяние микрочастиц (в частности, электронов или фотонов, т.е. луча света) на отражающей поверхности, где: 1 – генератор микрочастиц; 2 – детектор микрочастиц; 3 – твердое или жидкое тело (в частности, кристалл металла или объем воды)

Представим верхний слой тела в виде двумерной статистически неровной поверхности  $\xi(x,y)$ , повторяющей структуру его атомной решетки (рис. 3) или волнения жидкости.

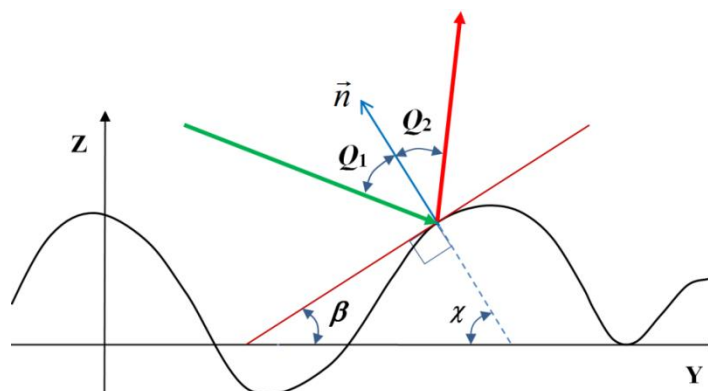
Известно, что упругие частицы (или волны), движущиеся со скоростью  $v$ , отражаются от гладкой поверхности твердого (или жидкого) тела по законам геометрической оптики: 1) падающая частица (или луч света), отраженная частица (или луч света) и перпендикуляр (нормаль) к отражающей поверхности, восстановленный в точке падения частицы (или луча света), находятся в одной плоскости (плоскости падения); 2) угол падения  $Q_1$  равен углу отражения  $Q_2$ . Такое явление называется «зеркальным отражением» или «упругим рассеянием» микрочастиц.

При выполнении условия упругого рассеяния двумерная функция плотности распределения вероятности (ФПРВ)  $\rho(\nu, \omega)$  того, что микрочастица отразится от неровной отражающей поверхности под углами  $\nu$ ,  $\omega$  соответствует ФПРВ  $\rho(\chi, \varphi)$  того, что единичный вектор

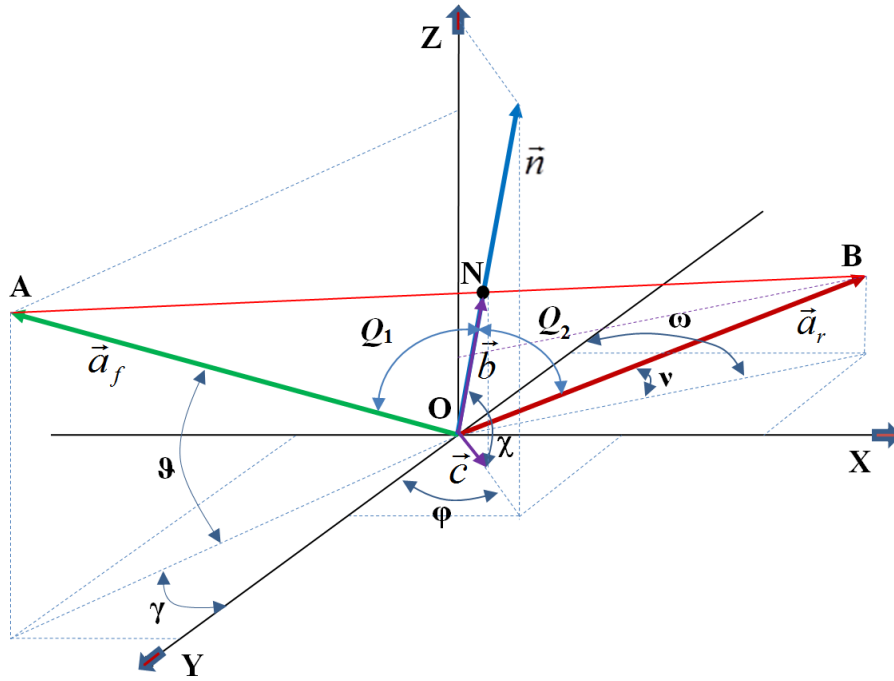
нормали к поверхности  $\mathbf{n}$ , в месте падения микрочастицы, будет направлен под углами  $\chi$ ,  $\varphi$  (рис. 3, 4 и 5).



**Рис. 3** Участок неровной поверхности, отражающий микрочастицы, где:  $\vartheta$ ,  $\gamma$  – углы, задающие направление падения микрочастицы на отражающую поверхность;  $\nu$ ,  $\omega$  – углы, задающие направление отражения микрочастицы от данной поверхности;  $\mathbf{a}_f$  – единичный вектор, указывающий направление на генератор микрочастиц;  $\mathbf{n}$  – единичный вектор нормали к поверхности в месте падения микрочастицы;  $\mathbf{a}_r$  – единичный вектор, указывающий направление движения микрочастицы, после упругого столкновения с отражающей поверхностью



**Рис. 4** Зеркальное отражение микрочастицы от участка неровной поверхности по законам геометрической оптики: 1) упругое отражение частицы (или луча света) происходит в плоскости ее падения; 2) угол отражения частицы (или луча света)  $Q_2$  равен углу ее падения  $Q_1$  (т.е. выполняется условие  $Q_2 = Q_1$ )



**Рис. 5** Иллюстрация для определения функциональной связи между углами  $\chi$ ,  $\varphi$  и углами  $\nu$ ,  $\omega$  при заданных углах  $\vartheta$ ,  $\gamma$ , где:  $Q_1$  – угол падения микрочастицы и  $Q_2$  – угол ее отражения удовлетворяют условию  $Q_2 = Q_1$ ; векторы  $\vec{a}_f$ ,  $\vec{a}_r$ ,  $\vec{n}$  лежат в одной плоскости AOB

Поэтому из ФПРВ  $\rho(\chi, \varphi)$  можно получить ФПРВ  $\rho(\nu, \omega / \vartheta, \gamma)$  с помощью преобразования переменных:

$$\rho(\chi, \varphi) = \rho\{\chi = f_1(\nu, \omega / \vartheta, \gamma); \varphi = f_2(\nu, \omega / \vartheta, \gamma)\} |G_{\nu\omega}| = \rho(\nu, \omega / \vartheta, \gamma) |G_{\nu\omega}|, \quad (2.1)$$

где

$$\chi = f_1(\nu, \omega / \vartheta, \gamma) \quad (2.2)$$

– функциональная связь между углом  $\chi$  и углами  $\nu$ ,  $\omega$ , при заданных углах  $\vartheta$ ,  $\gamma$ ;

$$\varphi = f_2(\nu, \omega / \vartheta, \gamma) \quad (2.3)$$

– функциональная связь между углом  $\varphi$  и углами  $\nu$ ,  $\omega$ , при заданных углах  $\vartheta$ ,  $\gamma$ .

$\rho\{\nu, \omega / \vartheta, \gamma\} |G_{\nu\omega}|$  – ФПРВ того, что микрочастица отразится от неровной поверхности в направлении, заданном углами  $\nu$ ,  $\omega$ , при известных углах  $\vartheta$ ,  $\gamma$ ;

$|G_{\nu\omega}|$  – якобиан преобразования переменных  $\chi$ ,  $\varphi$  в переменные  $\nu$ ,  $\omega$ .

В этом случае вероятность того, что частица, исходное направление движения которой задано углами  $\vartheta$  и  $\gamma$ , отразится от поверхности в направлении, ограниченном диапазонами углов  $d\nu$  и  $d\omega$ , равна

$$P(\nu, \omega) = \rho(\nu, \omega / \vartheta, \gamma) |G_{\nu\omega}| d\nu d\omega.$$

Эта формула, по сути, показывает, какая часть от полного числа микрочастиц (или полной энергии волны), упавших на отражающую поверхность, рассеется в направлении заданном углами  $\nu$  и  $\omega$  в пределах элемента телесного угла  $d\Omega = d\nu d\omega$ .

Если генератор и детектор микрочастиц находятся на большом расстоянии от рассматриваемого участка отражающей поверхности (рис. 2), то ФПРВ  $\rho(v, \omega/\vartheta, \gamma)|G_{v\omega}|$  (2.1) определяет объемную диаграмму упругого рассеяния данных частиц на этой поверхности

$$D(v, \omega/\vartheta, \gamma) = \rho(v, \omega/\vartheta, \gamma)/|G_{v\omega}|. \quad (2.4)$$

В случае, когда детектор микрочастиц находится на малом расстоянии от рассматриваемого участка отражающей поверхности, то для нахождения объемной ДУРМ  $D(v, \omega/\vartheta, \gamma)$  следует проинтегрировать правую часть выражения (2.4) по всем углам  $v$  и  $\omega$ , по которым отраженные микрочастицы могут попасть в апертуру детектора (или в одну точку на пластине электронограммы или рентгенограммы)

$$P(v, \omega/\vartheta, \gamma) = \int_{v_1}^{v_2} \int_{\omega_1}^{\omega_2} \rho(v, \omega/\vartheta, \gamma)|G_{v\omega}| dv d\omega. \quad (2.5)$$

В этой статье данный случай не рассматривается. То есть в дальнейшем будем полагать, что генератор и детектор микрочастиц находятся настолько далеко от участка отражающей поверхности, что допустимо воспользоваться упрощенной формулой (2.4).

## 2.2 Функциональная связь между углами $\chi, \varphi$ и $v, \omega/\vartheta, \gamma$

Найдем функциональные связи (2.2) и (2.3). На рис. 5 показаны единичные вектора  $\vec{a}_f, \vec{a}_r, \vec{n}$ , начало которых совпадает с началом локальной системы отчета XYZ (находящимся в точке столкновения микрочастицы с поверхностью), а их концы заданы следующими координатами:

$$\vec{a}_f = \{a_{fx}, a_{fy}, a_{fz}\} = \{\cos \vartheta \sin \gamma, \cos \vartheta \cos \gamma, \sin \vartheta\} \quad (2.6)$$

– единичный вектор, указывающий направление на генератор микрочастиц (рис. 2 и 3);

$$\vec{n} = \{n_x, n_{ry}, n_{rz}\} = \{\cos \chi \sin \varphi, \cos \chi \cos \varphi, \sin \chi\}$$

– единичный вектор, нормали к поверхности в месте падения микрочастицы;

$$\vec{a}_r = \{a_{rx}, a_{ry}, a_{rz}\} = \{\cos v \sin \omega, \cos v \cos \omega, \sin v\} \quad (2.7)$$

– единичный вектор, указывающий направление движения микрочастицы, после упругого столкновения с отражающей поверхностью.

Из рис. 5 видно, что при выполнении законов геометрической оптики (то есть при  $Q_2 = Q_1$ ), вектор нормали  $\mathbf{n}$  задает направление биссектрисы равнобедренного треугольника  $ABO$ , сторонами которого являются единичные векторы  $\mathbf{a}_f$  и  $\mathbf{a}_r$ .

Очевидно, что задав координаты точки  $N$ , разделяющей отрезок  $AB$  пополам, мы получим координаты конца вектора  $\mathbf{b}$ , совпадающего по направлению с направлением вектора

нормали  $\mathbf{n}$ . Используя координаты конца вектора  $\mathbf{a}_f$  (2.6) и конца вектора  $\mathbf{a}_r$  (2.6), с помощью методов аналитической геометрии [29 – 31], получим

$$\bar{\mathbf{b}} = \{b_x, b_y, b_z\} = \left\{ \frac{\cos \nu \sin \omega + \cos \vartheta \sin \gamma}{2}, \frac{\cos \nu \cos \omega + \cos \vartheta \cos \gamma}{2}, \frac{\sin \nu + \sin \vartheta}{2} \right\}.$$

Из скалярного произведения векторов  $\mathbf{b}$  и  $\mathbf{k} = \{0, 0, 1\}$  (где  $\mathbf{k}$  задает направление оси  $OZ$ , рис. 5)  $(\bar{\mathbf{b}} \cdot \bar{\mathbf{k}}) = |\bar{\mathbf{b}}| \cdot |\bar{\mathbf{k}}| \cos(\pi/2 - \chi) = |\bar{\mathbf{b}}| \cdot |\bar{\mathbf{k}}| \sin \chi$ , определим угол  $\chi$

$$\chi = \arcsin \left( \frac{(\bar{\mathbf{b}} \cdot \bar{\mathbf{k}})}{|\bar{\mathbf{b}}| \cdot |\bar{\mathbf{k}}|} \right) = \arcsin \left( \frac{\sin \nu + \sin \vartheta}{\sqrt{(\cos \nu \sin \omega + \cos \vartheta \sin \gamma)^2 + (\cos \nu \cos \omega + \cos \vartheta \cos \gamma)^2 + (\sin \nu + \sin \vartheta)^2}} \right), \quad (2.8)$$

это искомая функциональная зависимость (2.2).

На рис. 5 видно, что  $\varphi$  – это угол между векторами  $\mathbf{j} = \{0, 1, 0\}$  и  $\mathbf{c}$ , где  $\mathbf{j}$  задает направление оси  $OY$ , а вектор  $\mathbf{c}$  – это проекция вектора  $\mathbf{b}$  на плоскость  $XOY$

$$\bar{\mathbf{c}} = \{c_x, c_y, 0\} = \left\{ \frac{\cos \nu \sin \omega + \cos \vartheta \sin \gamma}{2}, \frac{\cos \nu \cos \omega + \cos \vartheta \cos \gamma}{2}, 0 \right\}. \quad (2.9)$$

Из скалярного произведения  $(\bar{\mathbf{c}} \cdot \bar{\mathbf{j}}) = |\bar{\mathbf{c}}| \cdot |\bar{\mathbf{j}}| \cos \varphi$  находим

$$\varphi = \arccos \left( \frac{(\bar{\mathbf{c}} \cdot \bar{\mathbf{j}})}{|\bar{\mathbf{c}}| \cdot |\bar{\mathbf{j}}|} \right) = \arccos \left( \frac{\cos \nu \cos \omega + \cos \vartheta \cos \gamma}{\sqrt{(\cos \nu \sin \omega + \cos \vartheta \sin \gamma)^2 + (\cos \nu \cos \omega + \cos \vartheta \cos \gamma)^2}} \right), \quad (2.10)$$

это вторая искомая функциональная зависимость (2.3).

### 2.3 Якобиан преобразования переменных $\chi, \varphi$ в переменные $\nu, \omega$ при заданных $\vartheta, \gamma$

Введем условные обозначения

$$a = \cos \nu \cos \omega + \cos \vartheta \cos \gamma; \quad b = \cos \nu \sin \omega + \cos \vartheta \sin \gamma; \quad d = \sin \nu + \sin \vartheta; \quad a_\nu' = -\sin \nu \cos \omega; \\ b_\nu' = -\sin \nu \sin \omega; \quad c_\nu' = \cos \nu; \quad a_\omega' = -\cos \nu \sin \omega; \quad b_\omega' = \cos \nu \cos \omega. \quad (2.11)$$

при этом выражения (2.8) и (2.10), с учетом многозначности обратных тригонометрических функций, приобретают вид

$$\chi = m\pi + (-1)^m \arcsin \left( \frac{d}{\sqrt{a^2 + b^2 + d^2}} \right), \quad (2.12)$$

$$\varphi = 2\pi m \pm \arccos \left( \frac{a}{\sqrt{a^2 + b^2}} \right), \quad (2.13)$$

где  $m = 0, 1, 2, 3, \dots$

Из рис. 2, 3, 5 видно что, углы  $\chi, \varphi$  могут принимать значения  $\chi \in [0, \pi/2]$ ,  $\varphi \in [0, \pi]$ . Учтем также, что интервалы однозначности обратных тригонометрических функций за-



ключены в пределах:  $\arcsin(x) \in [-\pi/2, \pi/2]$ ,  $\arccos(x) \in [0, \pi]$ . Поэтому в выражениях (2.12) и (2.13) положим  $m = 0$  и выберем (+), в результате получим однозначные зависимости

$$\chi = f_1(v, \omega / \mathcal{G}, \gamma) = \arcsin\left(\frac{d}{\sqrt{a^2 + b^2 + d^2}}\right), \quad (2.14)$$

$$\varphi = f_2(v, \omega / \mathcal{G}, \gamma) = \arccos\left(\frac{a}{\sqrt{a^2 + b^2}}\right). \quad (2.15)$$

Найдем якобиан преобразования  $|G_{v\omega}|$  переменных  $\chi, \varphi$  в переменные  $v, \omega$ . Для этого вычислим детерминант матрицы [32, 33]

$$|G_{v\omega}| = \begin{vmatrix} \frac{\partial f_1}{\partial v} & \frac{\partial f_1}{\partial \omega} \\ \frac{\partial f_2}{\partial v} & \frac{\partial f_2}{\partial \omega} \end{vmatrix} = \frac{\partial f_1}{\partial v} \frac{\partial f_2}{\partial \omega} - \frac{\partial f_1}{\partial \omega} \frac{\partial f_2}{\partial v}. \quad (2.16)$$

Подставляя функции (2.14) и (2.15) в детерминант (2.16), с учетом обозначений (2.11), получим искомый якобиан преобразования

$$|G_{v\omega}| = \left| \frac{d(a'_v b'_\omega - a'_\omega b'_v) + c'_v (b a'_\omega - a b'_\omega)}{\sqrt{a^2 + b^2} (a^2 + b^2 + d^2)} \right|. \quad (2.17)$$

Данный результат получен автором совместно с к.т.н. Костиным С.В.

## 2.4 Определение ФПРВ $\rho(\chi, \varphi)$

Получим ФПРВ  $\rho(\chi, \varphi)$  (2.1). Для этого представим однородную и изотропную неровную отражающую поверхность в виде двухмерного стационарного случайного процесса изменения высот неровностей  $\xi(x, y)$  (рис. 3). Любое азимутальное поперечное сечение (например, вдоль оси  $Y$ ) процесса  $\xi(x, y)$  является одномерным стационарным случайным процессом  $\xi(y)$ .

Пусть нам известна ФПРВ  $\rho[\xi(y)]$  высот неровностей  $\xi(y)$ . Ниже будет показано, что на основании ФПРВ  $\rho[\xi(y)]$  можно получить ФПРВ  $\rho[\xi'(y)]$  производной этого стационарного случайного процесса  $\xi'(y)$ .

Учитывая, что  $\xi'(y) = \operatorname{tg} \beta$  (рис. 4), где  $\beta$  – угол между касательной к процессу  $\xi(y)$  и осью  $y$ , сделаем в  $\rho[\xi'(y)]$  замену переменной  $\xi'$  на  $\beta$ . В результате получим ФПРВ углов  $\beta$  в исследуемом азимутальном сечении  $\xi(y)$

$$\rho(\beta) = \rho(\operatorname{tg} \beta) \left| \frac{1}{\cos^2 \beta} \right|, \quad (2.18)$$

где  $|G_\beta| = \left| \frac{1}{\cos^2 \beta} \right|$  – якобиан преобразования.

Из рис. 4 видно, что между углами  $\beta$  и  $\chi$  имеется однозначная функциональная зависимость  $\beta + \chi + \pi/2 = \pi$ , откуда следует

$$\beta = \pi/2 - \chi.$$

С учетом этого выражения, сделаем в ФПРВ  $\rho(\beta)$  (2.18) замену переменной  $\beta$  на  $\chi$

$$\rho(\beta) = \rho[\text{tg}(\pi/2 - \chi)] \left| \frac{1}{\cos^2(\pi/2 - \chi)} \right|,$$

с якобианом преобразования  $|G_\chi| = 1$ .

Учтем, что  $\text{tg}(\pi/2 - \chi) = \text{ctg}\chi$ ,  $\cos(\pi/2 - \chi) = \sin\chi$ . В результате получим ФПРВ углов  $\chi$

$$\rho(\chi) = \rho(\text{ctg}\chi) \left| \frac{1}{\sin^2 \chi} \right|, \quad (2.19)$$

В случае статистической независимости углов  $\chi$  и  $\varphi$  (что имеет место для многих неровных поверхностей), совместная ФПРВ  $\rho(\chi, \varphi)$  (2.1) может быть представлена в виде

$$\rho(\chi, \varphi) = \rho(\chi)\rho(\varphi) = \rho(\text{ctg}\chi) \left| \frac{1}{\sin^2 \chi} \right| \rho(\varphi). \quad (2.20)$$

Для однородных и изотропных статистически неровных поверхностей угол  $\varphi$ , определяющий азимутальное направление проекции нормали на плоскость ХОУ (рис. 5), может быть равномерно распределен в интервале от 0 до  $2\pi$ , при этом ФПРВ  $\rho(\varphi)$  задается выражением

$$\rho(\varphi) = \frac{1}{2\pi}. \quad (2.21)$$

Подставляя (2.21) в (2.20), получим искомую двумерную ФПРВ (2.1)

$$\rho(\chi, \varphi) = \frac{1}{2\pi} \left| \frac{1}{\sin^2 \chi} \right| \rho(\text{ctg}\chi). \quad (2.22)$$

Если отражающая поверхность неизотропная, то ФПРВ  $\rho(\varphi)$  может задаваться другой функцией, например,

$$\rho(\varphi) = \frac{2 \sin^2 \varphi}{\pi}, \quad (2.23)$$

$$\text{или} \quad \rho(\varphi) = \frac{4 \sin^2 \varphi \cos^2 \varphi}{\pi}. \quad (2.23a)$$

В этом случае двумерная ФПРВ (2.1) будет иметь вид

$$\rho(\chi, \varphi) = \frac{2 \sin^2 \varphi}{\pi} \left| \frac{1}{\sin^2 \chi} \right| \rho(\text{ctg}\chi) = \frac{2(1 - \cos^2 \varphi)}{\pi} \left| \frac{1}{\sin^2 \chi} \right| \rho(\text{ctg}\chi). \quad (2.24)$$

$$\text{или } \rho(\chi, \varphi) = \frac{4 \sin^2 \varphi \cos^2 \varphi}{\pi} \left| \frac{1}{\sin^2 \chi} \right| \rho(\text{ctg} \chi) = \frac{4(1 - \cos^2 \varphi) \cos^2 \varphi}{\pi} \left| \frac{1}{\sin^2 \chi} \right| \rho(\text{ctg} \chi). \quad (2.24a)$$

Еще раз отметим, что ФПРВ  $\rho(\chi, \varphi)$  (2.22), (2.24) и (2.24a) получены для случая, когда неровную поверхность можно представить в виде двухмерного однородного случайного процесса изменения высот неровностей  $\xi(x, y)$ , каждое азимутальное сечение которого является стационарным случайным процессом (ССП)  $\xi(r)$  (рис. 3) с одинаковыми усредненными характеристиками: ФПРВ, математическим ожиданием, дисперсией и другими начальными центральными моментами.

## 2.5 Общий вид объемной диаграммы упругого рассеяния микрочастиц

Найдем общий вид объемной ДУРМ (2.4)

$$D(v, \omega / \vartheta, \gamma) = \rho(v, \omega / \vartheta, \gamma) / |G_{v\omega}| = \rho\{\chi = f_1(v, \omega / \vartheta, \gamma); \varphi = f_2(v, \omega / \vartheta, \gamma)\} |G_{v\omega}|. \quad (2.25)$$

С учетом (2.17) и (2.22) выражение (2.25) принимает вид

$$D(v, \omega / \vartheta, \gamma) = \frac{1}{2\pi} \left| \frac{1}{\sin^2\{\chi = f_1(v, \omega / \vartheta, \gamma)\}} \right| \rho[\text{ctg}\{\chi = f_1(v, \omega / \vartheta, \gamma)\}] \left| \frac{d(a'_v b'_\omega - a'_\omega b'_v) + c'_v (ba'_\omega - ab'_\omega)}{\sqrt{a^2 + b^2} (a^2 + b^2 + d^2)} \right|.$$

Учтем, что  $1 + \text{ctg}^2 \chi = \frac{1}{\sin^2 \chi}$ , откуда следует  $\text{ctg} \chi = \sqrt{\frac{1}{\sin^2 \chi} - 1}$ , поэтому данное вы-

ражение можно представить в виде

$$D(v, \omega / \vartheta, \gamma) = \frac{1}{2\pi} \left| \frac{1}{\sin^2\{\chi = f_1(v, \omega / \vartheta, \gamma)\}} \right| \rho\left(\sqrt{\frac{1}{\sin^2\{\chi = f_1(v, \omega / \vartheta, \gamma)\}} - 1}\right) \left| \frac{d(a'_v b'_\omega - a'_\omega b'_v) + c'_v (ba'_\omega - ab'_\omega)}{\sqrt{a^2 + b^2} (a^2 + b^2 + d^2)} \right|. \quad (2.26)$$

Подставляя в (2.26) функциональную зависимость (2.14)  $\chi = \arcsin\left(\frac{d}{\sqrt{a^2 + b^2 + d^2}}\right)$ , получим

$$D(v, \omega / \vartheta, \gamma) = \frac{1}{2\pi} \left| \frac{a^2 + b^2 + d^2}{d^2} \right| \rho\left(\sqrt{\frac{a^2 + b^2}{d^2}}\right) \left| \frac{d(a'_v b'_\omega - a'_\omega b'_v) + c'_v (ba'_\omega - ab'_\omega)}{\sqrt{a^2 + b^2} (a^2 + b^2 + d^2)} \right|.$$

Упрощая данное выражение, находим общий вид ДУРМ (2.25)

$$D(v, \omega / \vartheta, \gamma) = \frac{1}{2\pi} \left| \frac{d(a'_v b'_\omega - a'_\omega b'_v) + c'_v (ba'_\omega - ab'_\omega)}{d^2 \sqrt{a^2 + b^2}} \right| \rho\left(\sqrt{\frac{a^2 + b^2}{d^2}}\right), \quad (2.27)$$

где  $a, b, d, a'_v, b'_v, c'_v, a'_\omega, b'_\omega$  заданы выражениями (2.11).

Заметим, что формально в выражении (2.27) произошла замена производной  $\xi'$  на ве-

личину  $\sqrt{\frac{a^2 + b^2}{d^2}}$  с якобианом преобразования  $|G_{v\omega/\vartheta\gamma}| = \left| \frac{d(a'_v b'_\omega - a'_\omega b'_v) + c'_v (ba'_\omega - ab'_\omega)}{d^2 \sqrt{a^2 + b^2}} \right|$ .

В случае, когда ФПРВ  $\rho(\chi, \varphi)$  имеет вид (2.24) или (2.24a) (т.е. когда отражающая поверхность неизотопная), то вместо ФПРВ (2.27), с учетом (2.15), получим

$$D(v, \omega / \mathcal{G}, \gamma) = \frac{2}{\pi} \left( \frac{b^2}{a^2 + b^2} \right) \left| \frac{d(a'_v b'_\omega - a'_\omega b'_v) + c'_v (b a'_\omega - a b'_\omega)}{d^2 \sqrt{a^2 + b^2}} \right| \rho \left( \sqrt{\frac{a^2 + b^2}{d^2}} \right), \quad (2.28)$$

или 
$$D(v, \omega / \mathcal{G}, \gamma) = \frac{4}{\pi} \frac{a^2 b^2}{(a^2 + b^2)^2} \left| \frac{d(a'_v b'_\omega - a'_\omega b'_v) + c'_v (b a'_\omega - a b'_\omega)}{d^2 \sqrt{a^2 + b^2}} \right| \rho \left( \sqrt{\frac{a^2 + b^2}{d^2}} \right). \quad (2.28a)$$

Формулы (2.27), (2.28) и (2.28a) могут рассматриваться в качестве ДУРМ на статистически неровной поверхности при следующих условиях (смотрите §2.1):

- неровная поверхность статистически однородна;
- неровности этой поверхности достаточно гладкие и крупномасштабные по сравнению с размерами микрочастицы; при этом отражение микрочастиц от всех локальных участков неровной поверхности происходит по законам геометрической оптики (рис. 4 и 5);
- участок неровной поверхности, участвующий в отражении микрочастиц, находится на большом расстоянии от генератора и детектора микрочастиц (рис. 2).

## 2.6 ФПРВ $\rho[\xi'(r)]$ производной стационарного случайного процесса $\xi(r)$

В § 2.4 было показано, что для определения ДУРМ на статистически неровной отражающей поверхности  $\xi(x, y)$ , любое поперечное сечение которой описывается стационарным случайным процессом  $\xi(r)$  (рис. 3), необходимо найти ФПРВ  $\rho[\xi'(r)]$  производной данного процесса.

Для поиска  $\rho[\xi'(r)]$  воспользуемся методом, предложенным в [34, 35]. Если известна ФПРВ  $\rho(\xi)$  одномерного стационарного случайного процесса (ССП)  $\xi(r) = \xi$ , то ФПРВ  $\rho(\xi')$  производной данного процесса может быть получена на основании следующей формальной процедуры [34, 35]:

а) Заданная ФПРВ  $\rho(\xi)$  представляется в виде произведения двух амплитуд вероятности  $\psi(\xi)$ :

$$\rho(\xi) = \psi(\xi) \psi(\xi). \quad (2.29)$$

б) Осуществляются два преобразования Фурье [34, 35]

$$\psi(\xi') = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \psi(\xi) \exp\{i \xi' \xi / \eta\} d\xi, \quad (2.30)$$

$$\psi^*(\xi') = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \psi(\xi) \exp\{-i \xi' \xi / \eta\} d\xi. \quad (2.31)$$

где 
$$\eta = \frac{2\sigma_{\xi}^2}{r_{cor}}, \quad (2.32)$$

$\sigma_{\xi}$  – среднеквадратичное отклонение (СКО) стационарного случайного процесса  $\zeta(r) = \xi$ ;  
 $r_{cor}$  – радиус автокорреляции данного процесса.

в) Искомая ФПРВ производной ССП  $\zeta(r) = \xi$  равна [34, 35]:

$$\rho(\xi') = \varphi(\xi')\varphi^*(\xi') = |\varphi(\xi')|^2. \quad (2.33)$$

Применим процедуру (2.29) – (2.33) для нахождения ФПРВ  $\rho[\xi'(r)]$  производной стационарных случайных процессов с различными статистиками высот неровностей.

1) *ФПРВ производной стационарного гауссовского случайного процесса*

Пусть в каждой точке  $r$  ССП  $\zeta(r)$  случайная величина  $\zeta$  (в частности, высота неровности) распределена по гауссовому закону

$$\rho(\xi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma_{\xi}^2}} \exp\left\{-\frac{(\xi - a_{\xi_1})^2}{2\sigma_{\xi_1}^2}\right\}, \quad (2.34)$$

где  $\sigma_{\xi_1}^2$  и  $a_{\xi_1}$  – дисперсия и математическое ожидание данного процесса  $\zeta(r)$ .

Согласно (2.29), представим ФПРВ (2.34) в виде произведения двух амплитуд вероятности

$$\rho(\xi) = \psi(\xi)\psi(\xi),$$

где 
$$\psi(\xi) = \frac{1}{\sqrt[4]{2\pi\sigma_{\xi_1}^2}} \exp\left\{-\frac{(\xi - a_{\xi_1})^2}{4\sigma_{\xi_1}^2}\right\}. \quad (2.35)$$

Подставим (2.35) в (2.30) и (2.31)

$$\psi(\xi') = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{1}{\sqrt[4]{2\pi\sigma_{\xi_1}^2}} \exp\left\{-\frac{(\xi - a_{\xi_1})^2}{4\sigma_{\xi_1}^2}\right\} \exp\{i\xi'\xi/\eta\} d\xi, \quad (2.36)$$

$$\psi^*(\xi') = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{1}{\sqrt[4]{2\pi\sigma_{\xi_1}^2}} \exp\left\{-\frac{(\xi - a_{\xi_1})^2}{4\sigma_{\xi_1}^2}\right\} \exp\{-i\xi'\xi/\eta\} d\xi. \quad (2.37)$$

Выполним интегрирование

$$\psi(\xi') = \frac{1}{\sqrt[4]{2\pi\eta^2/(2\sigma_{\xi_1})^2}} \exp\left\{-\frac{\xi'^2}{[2\eta/(2\sigma_{\xi_1})]^2}\right\} \exp\{ia_{\xi_1}\xi'/\eta\}, \quad (2.38)$$

$$\psi^*(\xi') = \frac{1}{\sqrt[4]{2\pi\eta^2/(2\sigma_{\xi_1})^2}} \exp\left\{-\frac{\xi'^2}{[2\eta/(2\sigma_{\xi_1})]^2}\right\} \exp\{-ia_{\xi_1}\xi'/\eta\}. \quad (2.39)$$

В соответствии с (2.33) перемножим (2.38) и (2.39), в результате получим

$$\rho(\xi') = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma_{\xi'}^2}} \exp\left\{-\frac{\xi'^2}{2\sigma_{\xi'}^2}\right\}, \quad (2.40)$$

где согласно (2.32) 
$$\sigma_{\xi'} = \sigma_{\xi_1} / r_{\text{cor1}} \quad (2.41)$$

– СКО продифференцированного стационарного случайного процесса  $\xi'(r) = \xi'$ ;  
 $r_{\text{cor1}}$  – радиус автокорреляции исходного ССП  $\xi(r) = \xi$  с гауссовым распределением высот неровностей.

2] ФПРВ производной ССП с равномерным распределением высот неровностей

Пусть в каждой точке  $r$  ССП  $\xi(r) = \xi$  случайная величина  $\xi$  распределена по равномерному закону в интервале  $\xi_1 < \xi < \xi_2$

$$\rho(\xi) = \frac{1}{\xi_2 - \xi_1}. \quad (2.42)$$

Согласно (2.29), представим ФПРВ (2.42) в виде произведения двух амплитуд вероятности

$$\rho(\xi) = \psi(\xi) \psi(\xi), \quad (2.43)$$

где

$$\psi(\xi) = \frac{1}{\sqrt{\xi_2 - \xi_1}}. \quad (2.44)$$

Подставим (2.43) в (2.30) и (2.31)

$$\psi(\xi') = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{\xi_1}^{\xi_2} \frac{1}{\sqrt{\xi_2 - \xi_1}} \exp\{i\xi'\xi/\eta\} d\xi, \quad (2.45)$$

$$\psi^*(\xi') = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{\xi_1}^{\xi_2} \frac{1}{\sqrt{\xi_2 - \xi_1}} \exp\{-i\xi'\xi/\eta\} d\xi. \quad (2.46)$$

В результате вычисления по формуле (2.45), получим

$$\psi(\xi') = \frac{1}{\sqrt{\xi_2 - \xi_1}} \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{\xi_1}^{\xi_2} \exp\{i\xi'\xi/\eta\} d\xi = \frac{\exp\{i\xi'\xi_2/\eta\} - \exp\{i\xi'\xi_1/\eta\}}{i\xi' \sqrt{2\pi(\xi_2 - \xi_1)}/\eta}. \quad (2.47)$$

Учтем, что  $(\xi_2 - \xi_1)/2 = a_{\xi_2}$  – математическое ожидание,  $\xi_2 - \xi_1 = l$  – база рассматриваемого ССП  $\xi(r)$ . Теперь можно записать  $\xi_1 = a_{\xi_2} - l/2$  и  $\xi_2 = a_{\xi_2} + l/2$ , при этом выражение (2.47) принимает вид

$$\psi(\xi') = \frac{\exp\{i\xi'(a_{\xi_2} + l/2)/\eta\} - \exp\{i\xi'(a_{\xi_2} - l/2)/\eta\}}{i\xi' \sqrt{2\pi l/\eta}} = \frac{\exp\{i\xi' l/(2\eta)\} - \exp\{-i\xi' l/(2\eta)\}}{i\xi' \sqrt{2\pi l/\eta}} \exp\{i\xi' a_{\xi_2}/\eta\}. \quad (2.48)$$

Используя выражение  $\sin x = \frac{e^{ix} - e^{-ix}}{2i}$ , представим (2.48) в виде

$$\psi(\xi') = \frac{2 \sin\{\xi' l/(2\eta)\}}{\xi' \sqrt{2\pi l/\eta}} \exp\{i\xi' a_{\xi_2}/\eta\}. \quad (2.49)$$

В результате аналогичных вычислений по формуле (2.46), получим

$$\psi^*(\xi') = \frac{2 \sin\{\xi' l / (2\eta)\}}{\xi' \sqrt{2\pi l / \eta}} \exp\{-i \xi' a_{\xi_2} / \eta\}. \quad (2.50)$$

Подставляя (2.49) и (2.50) в (2.33), окончательно находим

$$\rho(\xi') = \frac{\sin^2\{\xi' k_2\}}{\xi'^2 \pi k_2}, \quad (2.51)$$

где 
$$k_2 = \frac{l}{2\eta} = \frac{3r_{cor2}}{l} = \frac{3r_{cor2}}{\xi_2 - \xi_1}, \quad (2.52)$$

$r_{cor2}$  – радиус автокорреляции исходного ССП  $\zeta(r) = \zeta$  с равномерным распределением высот неровностей.

Здесь учтено, что согласно (2.32)

$$\eta = \frac{2\sigma_{\xi_2}^2}{r_{cor2}} = \frac{l^2}{6r_{cor2}}, \quad (2.53)$$

где  $\sigma_{\xi_2}^2 = \frac{l^2}{12} = \frac{(\xi_2 - \xi_1)^2}{12}$  – дисперсия ССП  $\zeta(r) = \zeta$  с равномерным распределением высот неровностей (2.42).

Таким образом, для ССП  $\zeta(r) = \zeta$  с равномерным распределением высот неровностей, ФПРВ  $\rho(\xi')$  его производной  $\xi'$  является распределение типа  $\sin^2 \xi' / \xi'^2$  (2.51) с параметром масштаба  $k_2$  (2.52).

### 3] ФПРВ производной ССП с лапласовым распределением высот неровностей

Пусть в каждой точке  $r$  ССП  $\zeta(r) = \zeta$  случайная величина  $\zeta$  распределена по закону Лапласа

$$\rho(\xi) = \frac{1}{2\mu_L} \exp\{-|\xi - a_{\xi_3}| / \mu_L\}, \quad (2.54)$$

где  $1/\mu_L$  – параметр масштаба данного процесса  $\zeta(r) = \zeta$ ;

$a_{\xi_3}$  – параметр сдвига (математическое ожидание).

Согласно (2.29), представим ФПРВ (2.54) в виде произведения двух амплитуд вероятности

$$\rho(\xi) = \psi(\xi) \psi(\xi), \quad (2.55)$$

где 
$$\psi(\xi) = \sqrt{\frac{1}{2\mu_L}} \exp\{-|\xi - a_{\xi_3}| / 2\mu_L\}. \quad (2.56)$$

Подставим (2.56) в (2.30) и (2.31)

$$\psi(\xi') = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \sqrt{\frac{1}{2\mu_L}} \exp\{-|\xi - a_{\xi_3}|/2\mu_L\} \exp\{i\xi'\xi/\eta\} d\xi, \quad (2.57)$$

$$\psi^*(\xi') = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \sqrt{\frac{1}{2\mu_L}} \exp\{-|\xi - a_{\xi_3}|/2\mu_L\} \exp\{-i\xi'\xi/\eta\} d\xi. \quad (2.58)$$

Перепишем эти выражения в виде

$$\psi(\xi') = \frac{2}{\sqrt{4\pi\mu_L}} \int_{a_{\xi_3}}^{\infty} \exp\{-(\xi - a_{\xi_3})/2\mu_L - i\xi'\xi/\eta\} d\xi, \quad (2.59)$$

$$\psi^*(\xi') = \frac{2}{\sqrt{4\pi\mu_L}} \int_{-\infty}^{a_{\xi_3}} \exp\{-(\xi - a_{\xi_3})/2\mu_L + i\xi'\xi/\eta\} d\xi. \quad (2.60)$$

Выполним интегрирование

$$\psi(\xi') = \sqrt{\frac{\mu_L\eta}{\pi}} \frac{\exp(a_{\xi_3}/2\mu_L - a_{\xi_3})}{\eta/2 + i\xi'\mu_L}, \quad (2.61)$$

$$\psi^*(\xi') = \sqrt{\frac{\mu_L\eta}{\pi}} \frac{\exp(-a_{\xi_3}/2\mu_L + a_{\xi_3})}{\eta/2 - i\xi'\mu_L}. \quad (2.62)$$

Подставляя (2.61) и (2.62) в (2.33), находим

$$\rho(\xi') = \frac{\mu_L\eta}{\pi(\eta^2/4 + \xi'^2\mu_L^2)}. \quad (2.63)$$

Дисперсия распределения Лапласа (2.54) равна  $\sigma_{\xi_3}^2 = 2\mu_L^2$ , поэтому, согласно (2.32), в данном случае

$$\eta = \frac{4\mu_L^2}{r_{cor3}}, \quad (2.64)$$

где  $r_{cor3}$  – радиус автокорреляции исходного ССП  $\zeta(r) = \zeta$  с лапласовым распределением высот неровностей.

Подставляя (2.64) в (2.63), получим

$$\rho(\xi') = \frac{k_3}{\pi(k_3^2 + \xi'^2)}, \quad (2.65)$$

где  $k_3 = \frac{2\mu_L}{r_{cor3}}$  – параметр масштаба.

Таким образом, для лапласовского ССП  $\zeta(r) = \zeta$  ФПРВ  $\rho(\xi')$  его производной  $\xi'$  является распределение Коши (2.65) с математическим ожиданием (т.е. параметром сдвига) равным нулю.

4] ФПРВ производной ССП с распределением высот неровностей по закону Коши

Пусть в каждой точке  $r$  ССП  $\zeta(r) = \zeta$  случайная величина  $\zeta$  распределена по закону Коши



$$\rho(\xi) = \frac{\mu_K}{\pi[\mu_K^2 + (\xi - a_{\xi_4})^2]}, \quad (2.66)$$

где  $\mu_K$  – параметр масштаба данного процесса  $\zeta(r)$ ;  $a_{\xi_4}$  – параметр сдвига.

Выполняя действия (2.29) – (2.33) обратные преобразования (2.57) – (2.63), получим

$$\rho(\xi') = \frac{1}{2k_4} \exp\{-|\xi'|/k_4\}. \quad (2.67)$$

Для нахождения параметра масштаба  $k_4$  отметим, что дисперсия распределения Коши, как известно, не определена и стремится к бесконечности, но высоты неровностей реальных поверхностей могут быть распределены только по усеченному закону Коши с эффективной дисперсией  $\sigma_{\xi_4}^2 \sim 25\mu_K^2$ . Поэтому в данном случае согласно (2.32) можно записать

$$\eta \approx \frac{50\mu_K^2}{r_{cor4}}, \quad (2.68)$$

где  $r_{cor4}$  – радиус автокорреляции исходного ССП  $\zeta(r) = \zeta$  с распределением высот неровностей  $\zeta$  по закону Коши (2.66).

В этом случае получим следующую оценку параметра масштаба

$$k_4 \approx 2\mu_K / \eta \approx \frac{r_{cor4}}{25\mu_K}. \quad (2.69)$$

Таким образом, для ССП с распределением высот неровностей  $\zeta(r) = \zeta$  по закону Коши (2.66) ФПРВ  $\rho(\xi')$  его производной  $\xi'$  является распределением Лапласа (2.67) с параметром масштаба (2.69) и параметром сдвига равным нулю.

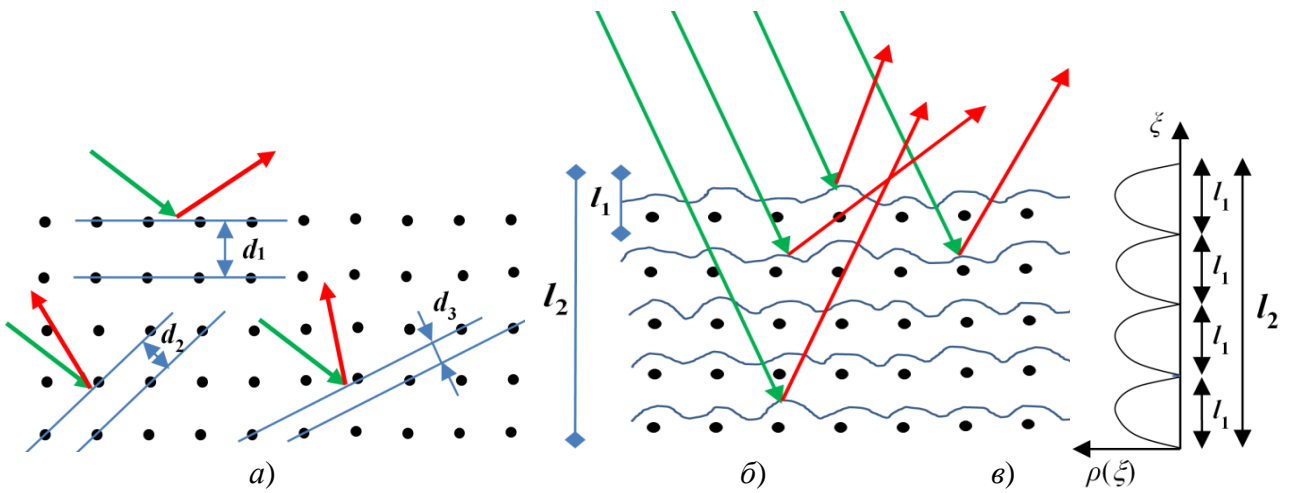
5] ФПРВ производной ССП с распределением высот неровностей по многослойному синусоидальному закону

Рассмотрим рассеяние микрочастиц (в частности, электронов или высокочастотных фотонов) на монокристалле. Падающие микрочастицы могут отразиться от различных атомных плоскостей монокристалла (рис. 6 а). Данный случай эквивалентен рассеянию микрочастиц на многослойной отражающей поверхности, каждый слой которой может быть задан двумерным однородным и изотропным ССП  $\xi(x,y)$ , в среднем повторяющим структуру плоской атомной решетки (рис. 6 б).

Если в рассеянии микрочастиц участвует только верхний слой кристалла, то можно предположить, что в каждом азимутальном сечении  $r$  такого ССП  $\zeta(r) = \zeta$  случайная величина  $\zeta$  (т.е. высота неровности верхнего слоя поверхности кристалла) распределена по синусоидальному закону

$$\rho(\xi) = \begin{cases} \frac{2 \sin^2(\pi\xi/l_1)}{l_1} & \text{при } \xi \in [0, l_1]; \\ 0 & \text{при } \xi \notin [0, l_1], \end{cases} \quad (2.70)$$

где  $l_1$  – толщина одного (первого) отражающего слоя монокристалла (рис. 6 в).



**Рис. 6** а) Отражение падающих микрочастиц от различных атомных плоскостей монокристалла; б) Рассеяние микрочастиц на многослойной поверхности кристалла, при этом каждый слой рассматривается как отдельная неровная поверхность синусоидального типа; в) Многогорбая синусоидальная ФПРВ высот неровностей многослойной поверхности кристалла (2.71)

В случае, когда в рассеянии микрочастиц эффективно участвуют несколько одинаковых слоев кристалла (рис. 6б), то следует воспользоваться многогорбой синусоидальной ФПРВ высот неровностей (рис. 6в).

$$\rho(\xi) = \begin{cases} \frac{2 \sin^2(\pi n_1 \xi / l_2)}{l_2} & \text{при } \xi \in [0, l_2]; \\ 0 & \text{при } \xi \notin [0, l_2], \end{cases} \quad (2.71)$$

где  $n_1$  – число одинаковых неровных слоев кристалла синусоидального типа, укладываемых в интервале  $[0, l_2]$ , здесь  $l_2 = n_1 l_1$  – глубина многослойной поверхности кристалла эффективно рассеивающей микрочастицы.

Согласно (2.29), представим ФПРВ (2.71) в виде произведения двух амплитуд вероятности

$$\rho(\xi) = \psi(\xi)\psi(\xi),$$

где

$$\psi(\xi) = \sqrt{\frac{2}{l_2}} \sin(\pi n_1 \xi / l_2). \quad (2.72)$$

Подставим (2.72) в (2.30) и (2.31)

$$\psi^*(\xi') = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_0^{l_2} \sqrt{\frac{2}{l_2}} \sin(\pi n_1 \xi / l_2) \exp\{i \xi' \xi / \eta\} d\xi, \quad (2.73)$$

$$\psi^*(\xi') = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_0^{l_2} \sqrt{\frac{2}{l_2}} \sin(\pi_1 \xi / l_2) \exp\{-i\xi' \xi / \eta\} d\xi.$$

Выполняя интегрирование [смотрите Приложение 2, (П.2.12) и (П.2.13)], получим

$$\psi(\xi') = -\sqrt{\frac{1}{4\pi l_2}} \left( \frac{e^{i(\pi_1 + \xi' l_2 / \eta)} - 1}{(\pi_1 / l_2 + \xi' / \eta)} + \frac{e^{-i(\pi_1 - \xi' l_2 / \eta)} - 1}{(\pi_1 / l_2 - \xi' / \eta)} \right), \quad (2.74)$$

$$\psi^*(\xi') = -\sqrt{\frac{1}{4\pi l_2}} \left( \frac{e^{i(\pi_1 - \xi' l_2 / \eta)} - 1}{(\pi_1 / l_2 - \xi' / \eta)} + \frac{e^{-i(\pi_1 + \xi' l_2 / \eta)} - 1}{(\pi_1 / l_2 + \xi' / \eta)} \right). \quad (2.75)$$

Подставляя (2.74) и (2.75) в (2.33) [смотрите Приложение 3, (П.3.12)], находим

$$p(\xi') = \psi(\xi') \psi^*(\xi') = \frac{1}{\pi l_2} \left( \frac{\cos^2(\pi_1) - \cos(\pi_1) \cos(\xi' l_2 / \eta)}{\left(\pi_1 / l_2\right)^2 - \left(\xi' / \eta\right)^2} - \frac{\cos(\pi_1 + \xi' l_2 / \eta) - 1}{\left(\pi_1 / l_2 + \xi' / \eta\right)^2} \right). \quad (2.76)$$

Дисперсия многогорбого синусоидального распределения (2.71) равна

$$\sigma_{\xi^4}^2 = \frac{l_2^2 (\pi^2 n_1^2 - 6)}{12\pi^2 n_1^2} = \frac{l_1^2 n_1^2 (\pi^2 n_1^2 - 6)}{12\pi^2 n_1^2} = \frac{l_1^2 (\pi^2 n_1^2 - 6)}{12\pi^2}. \quad (2.77)$$

Поэтому в этом случае, согласно (2.32), имеем масштабный параметр

$$\eta = \frac{2\sigma_{\xi^4}^2}{r_{cor5}} = \frac{l_1^2 (\pi^2 n_1^2 - 6)}{6\pi^2 r_{cor5}}, \quad (2.78)$$

где  $r_{cor5}$  – радиус автокорреляции одного неровного слоя кристалла синусоидального типа.

ФПРВ (2.76) может быть представлена в виде

$$p(\xi') = \frac{1}{\pi l_2} \left( \frac{\cos(\pi_1) [\cos(\pi_1) - \cos(\xi' l_2 / \eta)]}{\left(\pi_1 / l_2\right)^2 - \left(\xi' / \eta\right)^2} - \frac{\cos(\pi_1 + \xi' l_2 / \eta) - 1}{\left(\pi_1 / l_2 + \xi' / \eta\right)^2} \right). \quad (2.79)$$

С учетом тригонометрической формулы  $\cos x - \cos y = 2 \sin\left(\frac{y+x}{2}\right) \sin\left(\frac{y-x}{2}\right)$  из выражения (2.79) получим еще один вид искомой ФПРВ

$$p(\xi') = \frac{1}{\pi l_2} \left( \frac{2 \cos(\pi_1) \sin\left(\frac{\xi' l_2 / \eta + \pi_1}{2}\right) \sin\left(\frac{\xi' l_2 / \eta - \pi_1}{2}\right)}{\left(\pi_1 / l_2\right)^2 - \left(\xi' / \eta\right)^2} - \frac{\cos(\pi_1 + \xi' l_2 / \eta) - 1}{\left(\pi_1 / l_2 + \xi' / \eta\right)^2} \right). \quad (2.80)$$

Таким образом, для ССП с многогорбой синусоидальной ФПРВ высот неровностей (2.71) ФПРВ  $p(\xi')$  его производной  $\xi'$  является распределение (2.76) [или в ином виде (2.80)] с масштабным параметром (2.78).

С помощью формальной процедуры (2.29) – (2.33) могут быть получены ФПРВ  $\rho(\xi')$  производной  $\xi'$  для многих других ССП с различными статистиками высот неровностей  $\xi$ .

ФПРВ  $\rho(\xi')$  (2.40), (2.51), (2.65), (2.67), (2.76) и другие могут быть использованы во многих задачах статической физики.

### 3 Результаты

На основании метода, предложенного разделе 2, в этой части статьи получены формулы для расчета объемных диаграмм упругого рассеяния микрочастиц (ДУРМ) на статистически неровных поверхностях при выполнении условий кирхгофовского приближения.

#### 3.1 Объемные диаграммы упругого рассеяния микрочастиц на статистически неровных поверхностях

1] *Объемная диаграмма упругого рассеяния микрочастиц на отражающей поверхности с гауссовым распределением высот неровностей*

В качестве примера рассмотрим процедуру получения объемной ДУРМ  $D(\nu, \omega / \vartheta, \gamma)$  (2.27) для случая, когда однородные и изотропные неровности  $\xi(x, y)$  отражающей поверхности (рис. 3) в каждой точке с координатами  $x, y$  распределены по закону Гаусса (2.34).

В этом случае ФПРВ  $\rho(\xi')$  производной данного стационарного случайного процесса также является гауссовой (2.40)

$$\rho(\xi') = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma_{\xi'}^2}} \exp\left(-\xi'^2 / 2\sigma_{\xi'}^2\right), \quad (3.1)$$

где  $\sigma_{\xi'} = \sigma_{\xi 1} / r_{\text{cor}1}$ .

В соответствии с алгоритмом, описанным в конце § 2.5, вместо  $\xi'$  в (3.1) подставим  $\sqrt{\frac{a^2 + b^2}{d^2}}$ , в результате получим

$$\rho\left(\sqrt{\frac{a^2 + b^2}{d^2}}\right) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma_{\xi'}^2}} \exp\left(-\frac{a^2 + b^2}{2d^2\sigma_{\xi'}^2}\right). \quad (3.2)$$

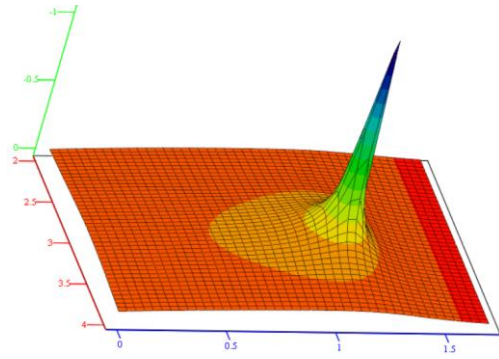
Подставляя (3.2) в (2.27), получим явный вид искомый ДУРМ в случае гауссового распределения высот неровностей отражающей поверхности

$$D(\nu, \omega / \vartheta, \gamma) = \frac{1}{\sqrt{8\pi^3\sigma_{\xi'}^2}} \exp\left(-\frac{a^2 + b^2}{2d^2\sigma_{\xi'}^2}\right) \left| \frac{d(a'_\nu b'_\omega - a'_\omega b'_\nu) + c'_\nu (ba'_\omega - ab'_\omega)}{d^2 \sqrt{a^2 + b^2}} \right|, \quad (3.3)$$

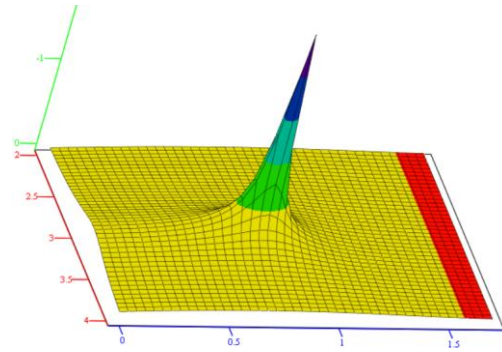
где  $\sigma_{\xi'} = \sigma_{\xi 1} / r_{\text{cor}1}$ , величины  $a, b, d, a'_\nu, b'_\nu, c'_\nu, a'_\omega, b'_\omega$  заданы выражениями (2.11).

При выполнении условий, указанных в конце §2.5, выражение (3.3), является формулой для расчета объемной ДУРМ на крупномасштабной (по сравнению с размерами микро-частиц) неровной отражающей поверхности с гауссовым распределением высот неровностей  $\xi(x,y)$ .

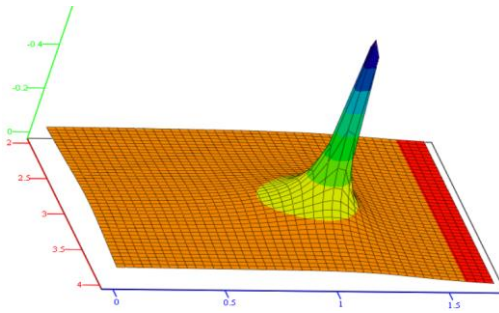
Диаграммы рассеяния, вычисленные по формуле (3.3) при различных значениях параметров  $\vartheta$ ,  $\gamma$ ,  $\sigma_{\xi 1}$  и  $r_{\text{cor}1}$ , показаны на рис. 7 (смотрите Приложение 4).



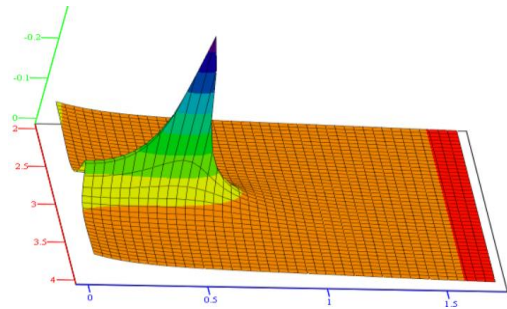
а) при:  $\vartheta = 65^0$ ,  $\gamma = 0^0$ ,  $\sigma_{\xi 1} = 3$ ,  $r_{\text{cor}1} = 5$



б) при:  $\vartheta = 43^0$ ,  $\gamma = 0^0$ ,  $\sigma_{\xi 1} = 3$ ,  $r_{\text{cor}1} = 5$



в) при:  $\vartheta = 60^0$ ,  $\gamma = 0^0$ ,  $\sigma_{\xi 1} = 5$ ,  $r_{\text{cor}1} = 5$



г) при:  $\vartheta = 23^0$ ,  $\gamma = 0^0$ ,  $\sigma_{\xi 1} = 17$ ,  $r_{\text{cor}1} = 5$

**Рис. 7** Объемные ДУРМ на однородной и изотропной неровной поверхности с гауссовым распределением высот неровностей. Расчеты выполнены по формуле (3.3) при различных значениях параметров  $\vartheta$ ,  $\gamma$ ,  $\sigma_{\xi 1}$  и  $r_{\text{cor}1}$ . Здесь и далее ДУРМ рассчитаны с помощью программного обеспечения MathCad

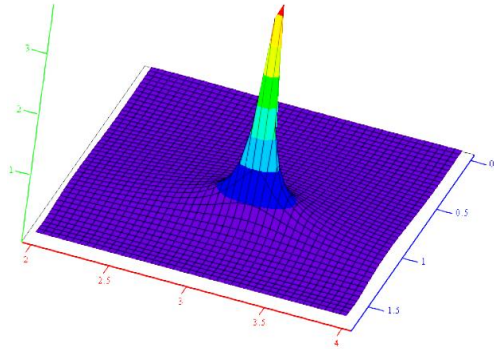
## 2] Объемная ДУРМ на отражающей поверхности с равномерным распределением высот неровностей

Пусть однородные и изотропные неровности  $\xi(x,y)$  отражающей поверхности, в каждой точке с координатами  $x,y$  распределены по равномерному закону (2.42). В этом случае, используем ФПРВ  $\rho(\xi')$  (2.51). Выполняя действия аналогичные (3.1) – (3.3), получим формулу для расчета объемных ДУРМ на данной поверхности

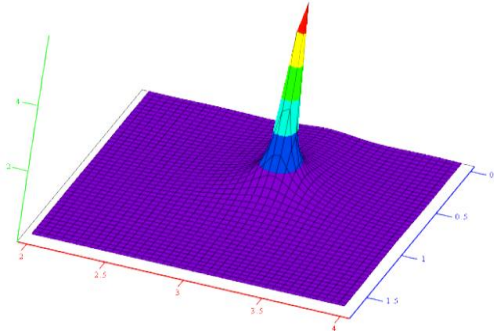
$$D(\nu, \omega / \vartheta, \gamma) = \frac{1}{2\pi^2 k_2} \sin^2 \left( k_2 \sqrt{\frac{a^2 + b^2}{d^2}} \right) \left| \frac{d(a'_\nu b'_\omega - a'_\omega b'_\nu) + c'_\nu (ba'_\omega - ab'_\omega)}{(a^2 + b^2)^{3/2}} \right|, \quad (3.4)$$

где  $k_2 = \frac{3r_{cor2}}{l} = \frac{3r_{cor2}}{\xi_2 - \xi_1}$  – параметр масштаба.

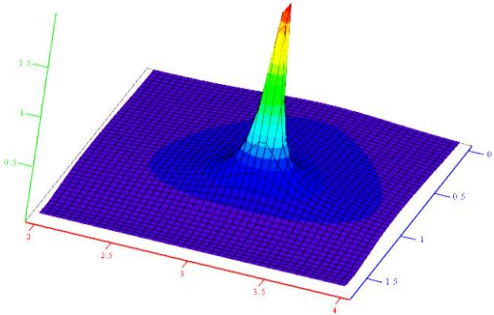
Результаты расчетов по формуле (3.4) при различных значениях  $\vartheta$ ,  $\gamma$ ,  $l$  и  $r_{cor2}$ , показаны на рис. 8 (смотрите Приложение 5).



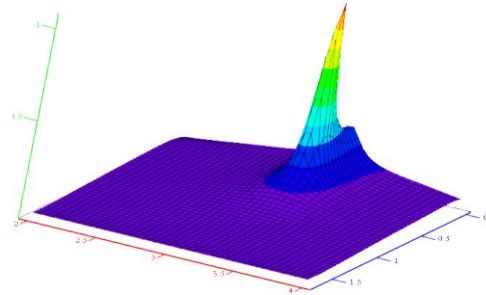
а) при:  $\vartheta = 65^0$ ,  $\gamma = 0^0$ ,  $l = 3$ ,  $r_{cor2} = 5$



б) при:  $\vartheta = 43^0$ ,  $\gamma = 0^0$ ,  $l = 3$ ,  $r_{cor2} = 5$



в) при:  $\vartheta = 60^0$ ,  $\gamma = 0^0$ ,  $l = 5$ ,  $r_{cor2} = 5$



г) при:  $\vartheta = 23^0$ ,  $\gamma = 0^0$ ,  $l = 17$ ,  $r_{cor2} = 5$

**Рис. 8** Объемные ДУРМ на однородной и изотропной отражающей поверхности с равномерным распределением высот неровностей. Расчеты выполнены по формуле (3.4).

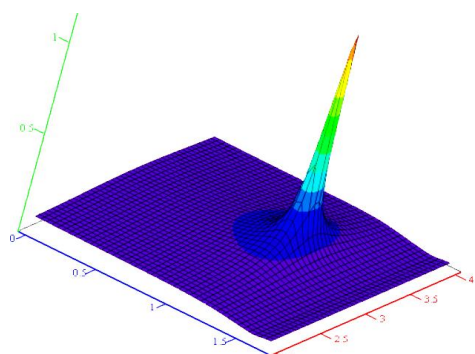
### 3] Объемная ДУРМ на отражающей поверхности с лапласовым распределением высот неровностей

Пусть однородные и изотропные неровности отражающей поверхности, в каждом ее азимутальном сечении  $r$ , рис. 5, распределены по закону Лапласа (2.54). В этом случае используем ФПРВ  $\rho(\xi')$  (2.65). Выполняя действия аналогичные (3.1) – (3.3), получим формулу для расчета объемных ДУРМ на данной поверхности

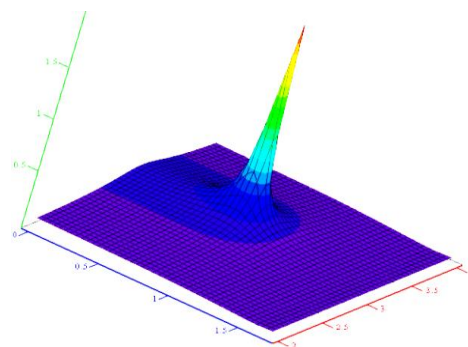
$$D(v, \omega / \vartheta, \gamma) = \frac{k_3}{2\pi^2(k_3^2 d^2 + a^2 + b^2)} \left| \frac{d(a'_v b'_\omega - a'_\omega b'_v) + c'_v (b a'_\omega - a b'_\omega)}{\sqrt{a^2 + b^2}} \right|, \quad (3.5)$$

где  $k_3 = \frac{2\mu_L}{r_{cor3}}$  – параметр масштаба.

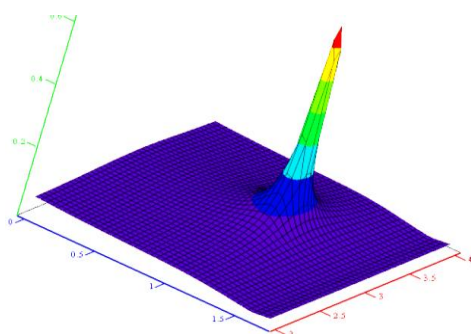
Результаты расчетов по формуле (3.5) при различных значениях  $\vartheta$ ,  $\gamma$ ,  $\mu_L$  и  $r_{\text{cor3}}$ , показаны на рис. 9 (смотрите Приложение 6).



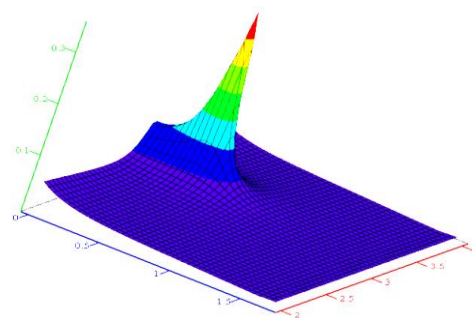
а) при:  $\vartheta = 65^0$ ,  $\gamma = 0^0$ ,  $\mu_L = 3$ ,  $r_{\text{cor3}} = 5$



б) при:  $\vartheta = 43^0$ ,  $\gamma = 0^0$ ,  $\mu_L = 3$ ,  $r_{\text{cor3}} = 5$



в) при:  $\vartheta = 60^0$ ,  $\gamma = 0^0$ ,  $\mu_L = 5$ ,  $r_{\text{cor3}} = 5$



г) при:  $\vartheta = 23^0$ ,  $\gamma = 0^0$ ,  $\mu_L = 17$ ,  $r_{\text{cor3}} = 5$

**Рис. 9** Объемные ДУРМ на однородной и изотропной неровной поверхности с лапласовым распределением высот неровностей. Расчеты выполнены по формуле (3.5).

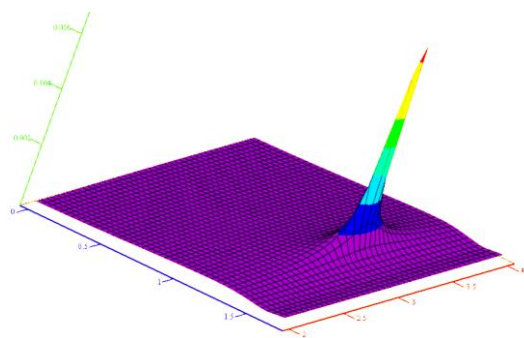
4] Объемные ДУРМ на отражающей поверхности с распределением высот неровностей по закону Коши

Пусть однородные и изотропные неровности отражающей поверхности, в каждом ее азимутальном сечении  $r$ , рис. 3, распределены по усеченному закону Коши (2.66). В этом случае используем ФПРВ  $\rho(\xi')$  (2.67). Выполняя действия аналогичные (3.1) – (3.3), получим формулу для расчета объемных ДУРМ на данной поверхности

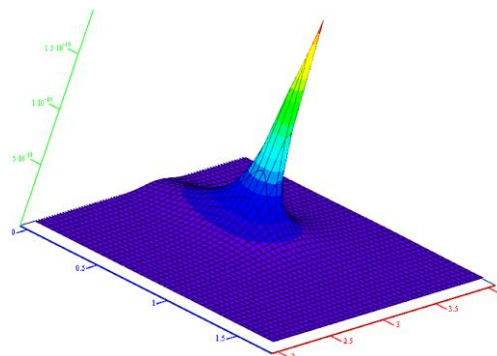
$$D(v, \omega / \vartheta, \gamma) = \frac{1}{2k_4^2} \exp\left(-\sqrt{\frac{a^2 + b^2}{d^2 k_4^2}}\right) \left| \frac{d(a'_v b'_\omega - a'_\omega b'_v) + c'_v (b a'_\omega - a b'_\omega)}{d^2 \sqrt{a^2 + b^2}} \right|, \quad (3.6)$$

где  $k_4 \approx \frac{r_{\text{cor4}}}{25\mu_K}$  – параметр масштаба.

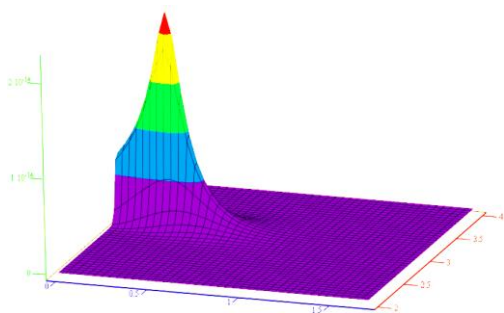
Результаты расчетов по формуле (3.6) при различных значениях  $\vartheta$ ,  $\gamma$ ,  $\mu_K$  и  $r_{\text{cor4}}$ , показаны на рис. 10 (смотрите Приложение 7).



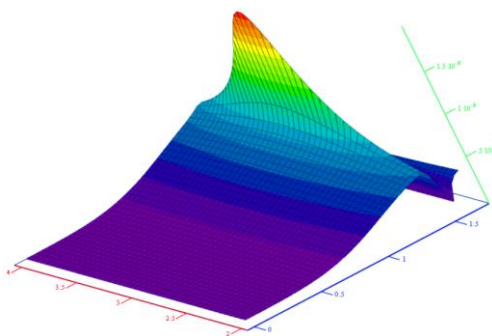
а) при:  $\vartheta = 75^0$ ,  $\gamma = 0^0$ ,  $\mu_K = 3$ ,  $r_{\text{cor4}} = 8$



б) при:  $\vartheta = 38^0$ ,  $\gamma = 0^0$ ,  $\mu_K = 9$ ,  $r_{\text{cor4}} = 8$



в) при:  $\vartheta = 16^0$ ,  $\gamma = 0^0$ ,  $\mu_K = 12$ ,  $r_{\text{cor4}} = 8$



г) при:  $\vartheta = 87^0$ ,  $\gamma = 0^0$ ,  $\mu_K = 5$ ,  $r_{\text{cor4}} = 6$

**Рис. 10** Объемные ДУРМ на однородной и изотропной неровной поверхности с распределением высот неровностей по усеченному закону Коши. Расчеты выполнены по формуле (3.6)

Анализ диаграмм рассеяния, показанных на рис. 7 – 10, а также других ДУРМ, рассчитанных по формулам (3.3) – (3.6), показывает, что упругое рассеяние микрочастиц на одном верхнем слое статистически неровной отражающей поверхности слабо зависит от статистики высот ее неровностей. Однослойные поверхности с распределением высот неровностей по закону Гаусса, равномерному закону, закону Лапласа и закону Коши, практически одинаково рассеивают микрочастицы. Некоторые отличия ДУРМ, показанных на рис. 7 – 10, наблюдаются при малых углах скольжения падающих микрочастиц  $\vartheta$  и больших значениях отношения  $\sigma_{\zeta m} / r_{\text{cor } m}$ .

### 3.2 Объемная диаграмма упругого рассеяния микрочастиц на многослойной поверхности кристалла с многогорбым синусоидальным распределением высот неровностей



Рассмотрим рассеяние микрочастиц на  $n_1$ -слойной поверхности кристалла, каждый слой которой является однородной и изотропной двумерной поверхностью  $\xi(x,y)$  с неровностями синусоидального типа (рис. 6б). В этом случае воспользуемся многогорбым синусоидальным распределением высот неровностей  $\xi(r) = \xi$  (2.71), при этом ФПРВ  $\rho(\xi')$  его производной является выражение (2.76) с масштабным параметром  $\eta$  (2.78)

$$p(\xi') = \frac{1}{\pi l_2} \left( \frac{\cos^2(\pi n_1) - \cos(\pi n_1) \cos(\xi' l_2 / \eta)}{\left(\frac{\pi n_1}{l_2}\right)^2 - \left(\frac{\xi'}{\eta}\right)^2} - \frac{\cos(\pi n_1 + \xi' l_2 / \eta) - 1}{\left(\frac{\pi n_1}{l_2} + \xi' / \eta\right)^2} \right), \quad (3.7)$$

или та же функция в виде (2.80)

$$p(\xi') = \frac{1}{\pi l_2} \left( \frac{2 \cos(\pi n_1) \sin\left(\frac{\xi' l_2}{2\eta} + \frac{\pi n_1}{2}\right) \sin\left(\frac{\xi' l_2}{2\eta} - \frac{\pi n_1}{2}\right)}{\left(\frac{\pi n_1}{l_2}\right)^2 - \left(\frac{\xi'}{\eta}\right)^2} - \frac{\cos(\pi n_1 + \xi' l_2 / \eta) - 1}{\left(\frac{\pi n_1}{l_2} + \xi' / \eta\right)^2} \right). \quad (3.8)$$

Для получения объемной ДУРМ на многослойной поверхности кристалла используем методику, приведенную в §2.5 [аналогично (3.1) – (3.3)]. Заменяем в (3.7) [или в (3.8)] производную  $\xi'$  на величину  $\sqrt{\frac{a^2 + b^2}{d^2}}$ , и подставим получившееся выражение в (2.27). В результате получим формулу для расчета ДУРМ на многослойной поверхности кристалла

$$D(v, \omega / \vartheta, \gamma) = \frac{1}{2\pi^2 l_2} \left( \frac{\cos^2(\pi n_1) - \cos(\pi n_1) \cos\left(\sqrt{\frac{a^2 + b^2}{d^2}} l_2 / \eta\right)}{\left(\frac{\pi n_1}{l_2}\right)^2 - \left(\sqrt{\frac{a^2 + b^2}{d^2}} l_2 / \eta\right)^2} - \frac{\cos\left(\pi n_1 + \sqrt{\frac{a^2 + b^2}{d^2}} l_2 / \eta\right) - 1}{\left(\frac{\pi n_1}{l_2} + \sqrt{\frac{a^2 + b^2}{d^2}} / \eta\right)^2} \right) \times \left| \frac{d(a'_v b'_\omega - a'_\omega b'_v) + c'_v (b a'_\omega - a b'_\omega)}{d^2 \sqrt{a^2 + b^2}} \right|, \quad (3.9)$$

или ту же формулу в другом виде

$$D(v, \omega / \vartheta, \gamma) = \frac{1}{2\pi^2 l_2} \left( \frac{2 \cos(\pi n_1) \sin\left(\sqrt{\frac{a^2 + b^2}{d^2}} \frac{l_2}{2\eta} + \frac{\pi n_1}{2}\right) \sin\left(\sqrt{\frac{a^2 + b^2}{d^2}} \frac{l_2}{2\eta} - \frac{\pi n_1}{2}\right)}{\left(\frac{\pi n_1}{l_2}\right)^2 - \left(\sqrt{\frac{a^2 + b^2}{d^2}} l_2 / \eta\right)^2} - \frac{\cos\left(\pi n_1 + \sqrt{\frac{a^2 + b^2}{d^2}} l_2 / \eta\right) - 1}{\left(\frac{\pi n_1}{l_2} + \sqrt{\frac{a^2 + b^2}{d^2}} / \eta\right)^2} \right) \times \left| \frac{d(a'_v b'_\omega - a'_\omega b'_v) + c'_v (b a'_\omega - a b'_\omega)}{d^2 \sqrt{a^2 + b^2}} \right|, \quad (3.10)$$

где согласно (2.11)

$$a = \cos \nu \cos \omega + \cos \vartheta \cos \gamma; \quad b = \cos \nu \sin \omega + \cos \vartheta \sin \gamma; \quad d = \sin \nu + \sin \vartheta; \quad a_{\nu}' = -\sin \nu \cos \omega;$$

$$b_{\nu}' = -\sin \nu \sin \omega; \quad c_{\nu}' = \cos \nu; \quad a_{\omega}' = -\cos \nu \sin \omega; \quad b_{\omega}' = \cos \nu \cos \omega;$$

согласно (2.78)

$$\eta = \frac{l_1^2 (\pi^2 n_1^2 - 6)}{6\pi^2 r_{\text{cor5}}}, \quad (3.11)$$

здесь

$l_1$  – толщина одного отражающего слоя (т.е. горизонтальной атомной плоскости) кристалла (рис. 6б);

$l_2 = l_1 n_1$  – глубина многослойной поверхности монокристалла, эффективно участвующая в упругом рассеивании микрочастиц(ы);

$n_1$  – число неровных слоев монокристалла (синусоидального типа), укладываемых в интервале  $[0, l_2]$ ;

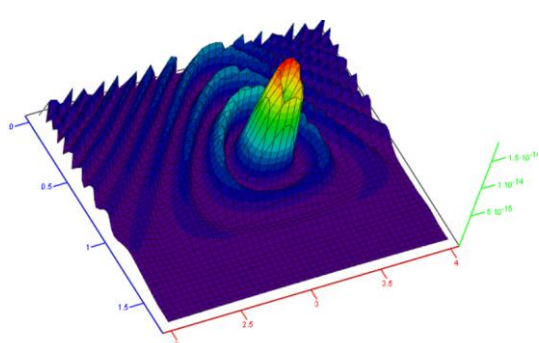
$r_{\text{cor5}}$  – радиус автокорреляции одного неровного слоя кристалла синусоидального типа. Данный радиус автокорреляции примерно равен усредненному радиусу кривизны синусоидальных неровностей одного слоя кристалла;

$\vartheta, \gamma$  – углы, задающие направление движения микрочастиц, падающих на поверхность кристалла (рис. 2, 3, 5);

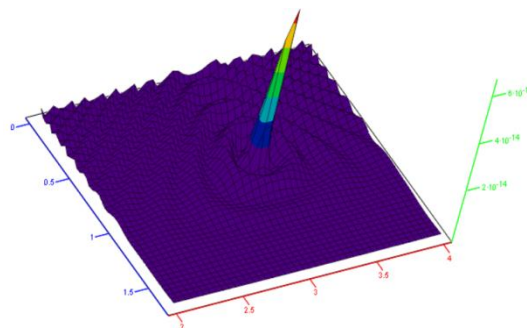
$\nu, \omega$  – углы, задающие направление движения микрочастиц, отраженных от поверхности кристалла в сторону детектора (рис. 2, 3, 5).

Выражения (3.9) и (3.10) это одна и та же формула для расчета ДУРМ на многослойной поверхности кристалла (ДУРМ на МПК), только записанная в разных тригонометрических формах. Формулу (3.9) будем называть косинус-версией ДУРМ на МПК, а формулу (3.10) – синус-версией ДУРМ на МПК.

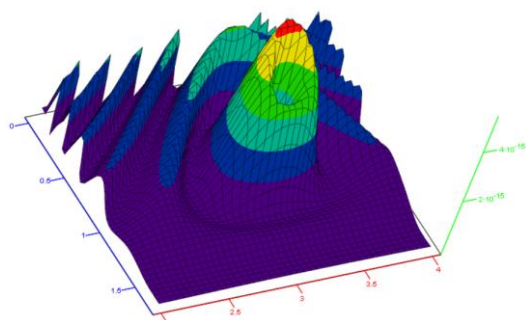
ДУРМ, вычисленные по формуле (3.9) при различных значениях пяти параметров  $\vartheta, \gamma, l_1, n_1$  и  $r_{\text{cor5}}$ , показаны на рис. 11 (смотрите Приложение 8).



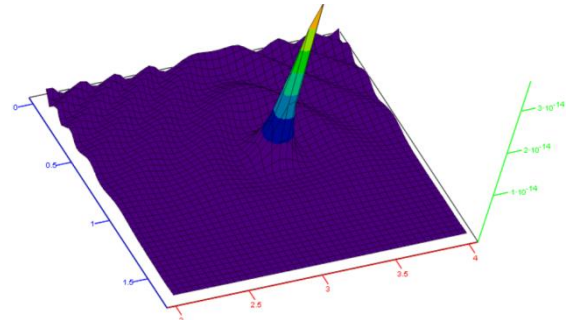
а) при:  $\vartheta = 45^\circ, \gamma = 0^\circ, n_1 = 64,$   
 $l_1 = 10^{-11} \text{ см}, r_{\text{cor5}} = 6 \cdot 10^{-9} \text{ см}$



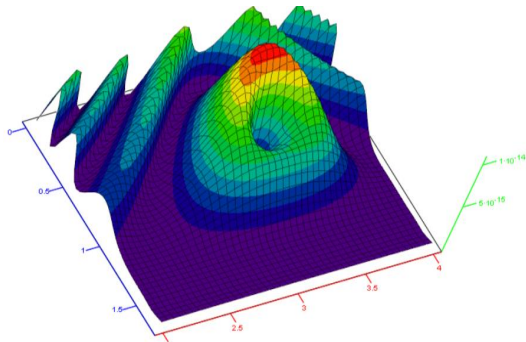
б) при:  $\vartheta = 45^\circ, \gamma = 0^\circ, n_1 = 65,$   
 $l_1 = 10^{-11} \text{ см}, r_{\text{cor5}} = 6 \cdot 10^{-9} \text{ см}$



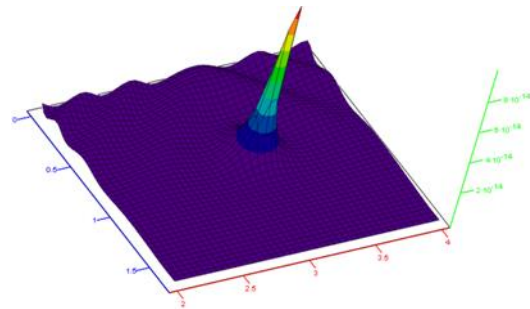
в) при:  $\vartheta = 45^0$ ,  $\gamma = 0^0$ ,  $n_1 = 126$ ,  
 $l_1 = 10^{-11}$  см,  $r_{\text{cor5}} = 6 \cdot 10^{-9}$  см



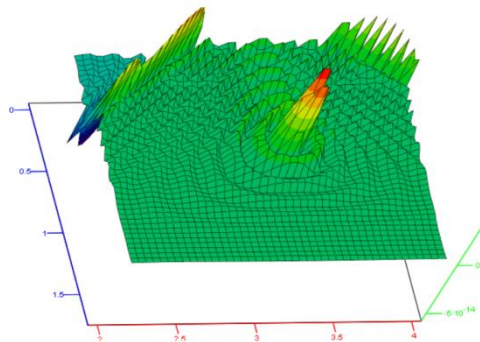
г) при:  $\vartheta = 45^0$ ,  $\gamma = 0^0$ ,  $n_1 = 127$ ,  
 $l_1 = 10^{-11}$  см,  $r_{\text{cor5}} = 6 \cdot 10^{-9}$  см



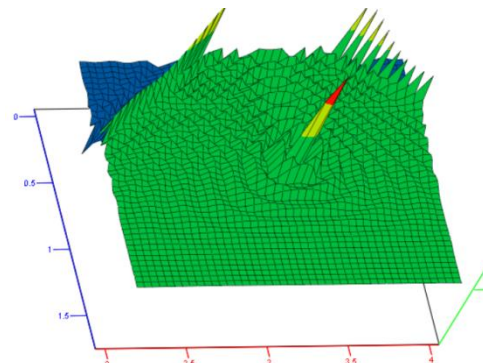
д) при:  $\vartheta = 45^0$ ,  $\gamma = 0^0$ ,  $n_1 = 46$ ,  
 $l_1 = 10^{-11}$  см,  $r_{\text{cor5}} = 1,4 \cdot 10^{-9}$  см



е) при:  $\vartheta = 45^0$ ,  $\gamma = 0^0$ ,  $n_1 = 47$ ,  
 $l_1 = 10^{-11}$  см,  $r_{\text{cor5}} = 1,4 \cdot 10^{-9}$  см



ж) при:  $\vartheta = 45^0$ ,  $\gamma = 0^0$ ,  $n_1 = 24$ ,  
 $l_1 = 10^{-11}$  см,  $r_{\text{cor5}} = 4 \cdot 10^{-9}$  см



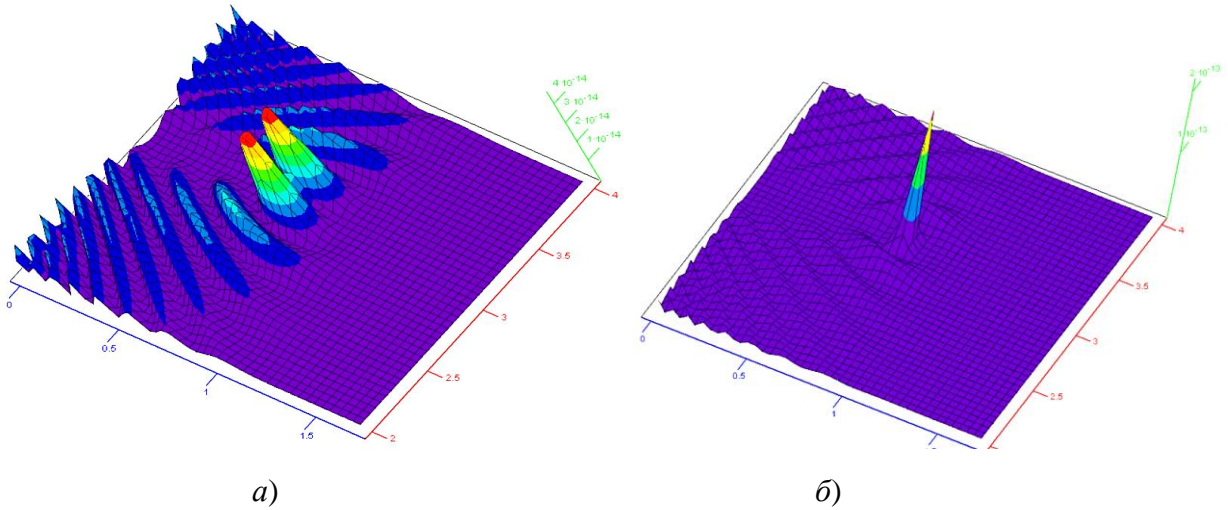
з) при:  $\vartheta = 45^0$ ,  $\gamma = 0^0$ ,  $n_1 = 23$ ,  
 $l_1 = 10^{-11}$  см,  $r_{\text{cor5}} = 4 \cdot 10^{-9}$  см

**Рис. 11** Объемные диаграммы упругого рассеяния микрочастиц на многослойной поверхности кристалла, рассчитанные по формуле (3.9) при различных значениях параметров  $\vartheta$ ,  $l_1$ ,  $n_1$  и  $r_{\text{cor5}}$

Если каждый слой кристалла имеет одинаковую анизотропию, например, типа (2.23), то с учетом (2.24) и (2.28) получим следующую формулу для расчета объемных ДУРМ для данного случая

$$D(v, \omega / \vartheta, \gamma) = \frac{2}{\pi^2 l_2} \left( \frac{b^2}{a^2 + b^2} \right) \left( \frac{\cos^2(\pi n_1) - \cos(\pi n_1) \cos\left(\sqrt{\frac{a^2 + b^2}{d^2}} l_2 / \eta\right)}{\left(\pi n_1 / l_2\right)^2 - \left(\sqrt{\frac{a^2 + b^2}{d^2}} l_2 / \eta\right)^2} - \frac{\cos\left(\pi n_1 + \sqrt{\frac{a^2 + b^2}{d^2}} l_2 / \eta\right) - 1}{\left(\pi n_1 / l_2 + \sqrt{\frac{a^2 + b^2}{d^2}} / \eta\right)^2} \right) \times \left| \frac{d(a'_v b'_\omega - a'_\omega b'_v) + c'_v (b a'_\omega - a b'_\omega)}{d^2 \sqrt{a^2 + b^2}} \right|. \quad (3.12)$$

Результаты расчетов по формуле (3.12) показаны на рис. 11а (Приложение 9).

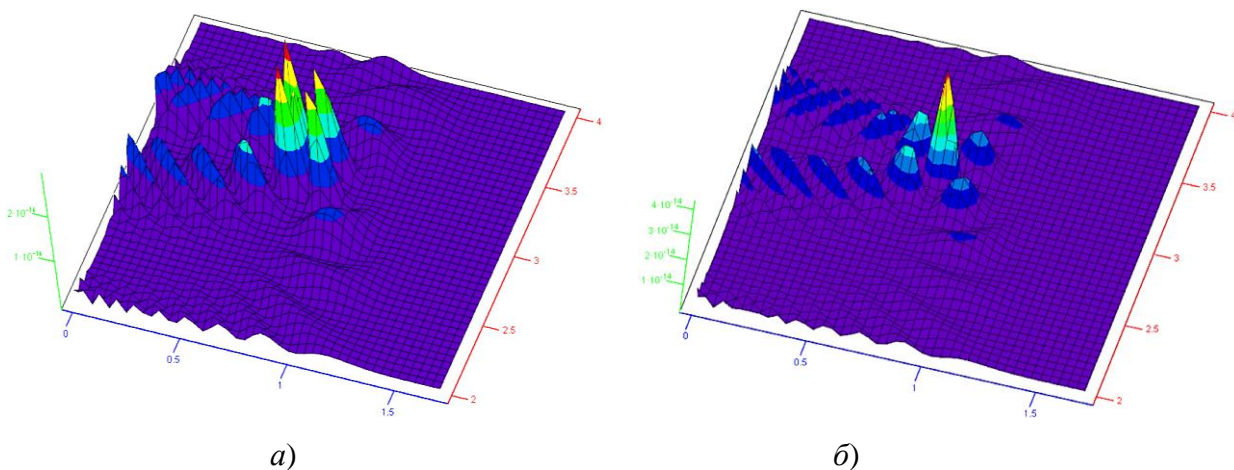


**Рис.11а** Объемные ДУРМ на многослойной неизотропной поверхности кристалла, рассчитанные по формуле (3.12) при  $\vartheta = 45^\circ$ ,  $\gamma = 0^\circ$ , а)  $n_1 = 48$  и б)  $n_1 = 47$ ,  $l_1 = 10^{-11}$  см,  $r_{\text{cor5}} = 4 \cdot 10^{-9}$  см

Если каждый слой кристалла имеет одинаковую анизотропию типа (2.23а), то с учетом (2.24а) и (2.28а) аналогично получим следующую формулу для расчета объемных ДУРМ для этого случая

$$D(v, \omega / \vartheta, \gamma) = \frac{4}{\pi^2 l_2} \left( \frac{a^2 b^2}{(a^2 + b^2)^2} \right) \left( \frac{\cos^2(\pi n_1) - \cos(\pi n_1) \cos\left(\sqrt{\frac{a^2 + b^2}{d^2}} l_2 / \eta\right)}{\left(\pi n_1 / l_2\right)^2 - \left(\sqrt{\frac{a^2 + b^2}{d^2}} l_2 / \eta\right)^2} - \frac{\cos\left(\pi n_1 + \sqrt{\frac{a^2 + b^2}{d^2}} l_2 / \eta\right) - 1}{\left(\pi n_1 / l_2 + \sqrt{\frac{a^2 + b^2}{d^2}} / \eta\right)^2} \right) \times \left| \frac{d(a'_v b'_\omega - a'_\omega b'_v) + c'_v (b a'_\omega - a b'_\omega)}{d^2 \sqrt{a^2 + b^2}} \right|. \quad (3.12а)$$

Результаты расчетов по формуле (3.12а) показаны на рис. 11б (Приложение 10).



**Рис.11б** Объемные ДУРМ на многослойной неизотропной поверхности кристалла, рассчитанные по формуле (3.12а) при  $\vartheta = 45^0$ ,  $\gamma = 0^0$ , а)  $n_1 = 42$  и б)  $n_1 = 37$ ,  $l_1 = 10^{-11}$  см,  $r_{\text{cor5}} = 4 \cdot 10^{-9}$  см

Проанализируем объемные диаграммы упругого рассеяния микрочастиц, показанные на рис. 11, 11а и 11б.

#### 1] *Согласование с экспериментами*

Сопоставлению расчетов по представленным в этой статье формулам с экспериментальными данными необходимо посвятить отдельное исследование. Но, уже на данном этапе можно отметить, что объемные ДУРМ, рассчитанные по формуле (3.9) (рис. 11), соответствуют результатам экспериментов по дифракции частиц и высокочастотных электромагнитных волн на кристалле (рис. 12, 12 а).

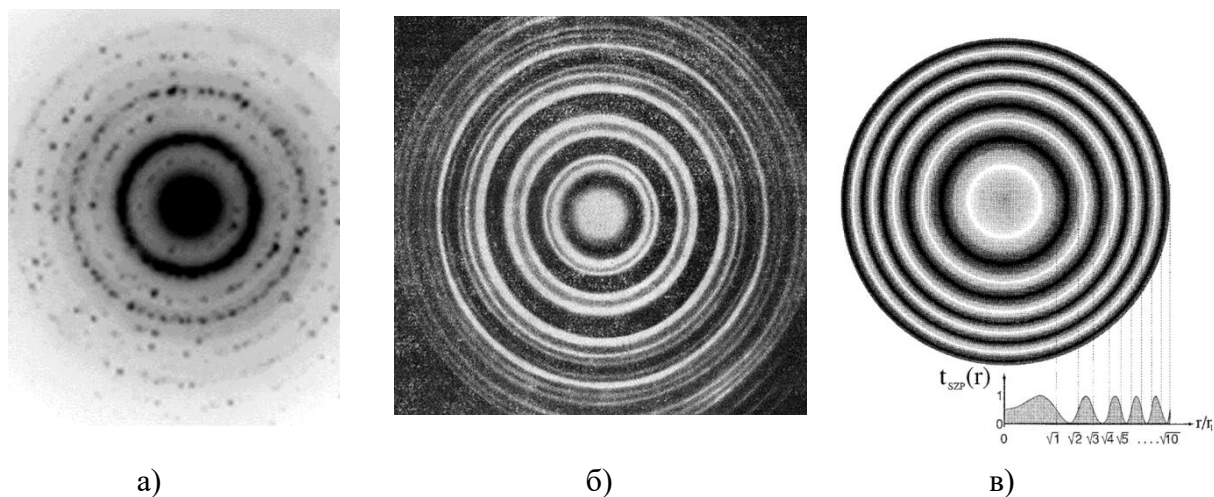
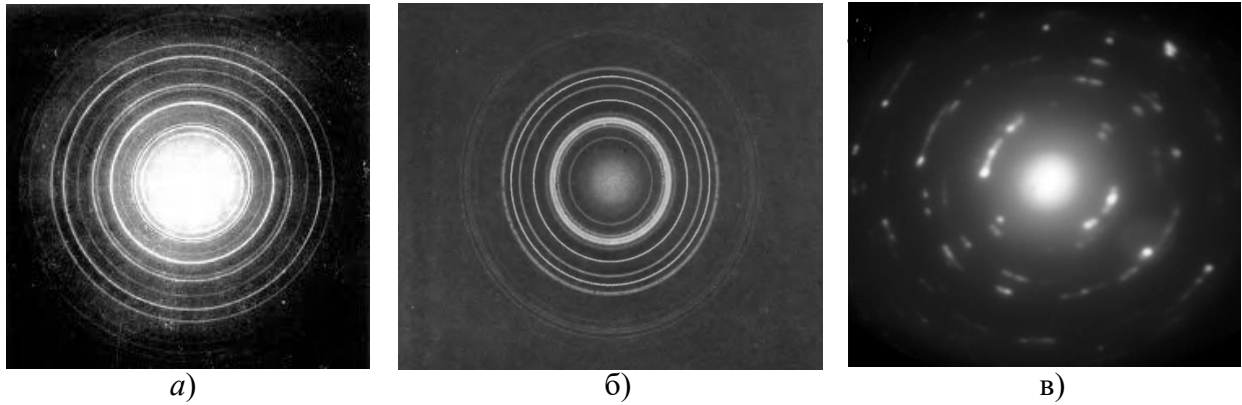


Рис. 12 а) Электронограмма сплава  $\text{Ti}_{50}\text{Ni}_{25}\text{Cu}_{25}$  ([http://dream-journal.org/issues/2018-6/2018-6\\_233.html](http://dream-journal.org/issues/2018-6/2018-6_233.html)); б) Дифракции электронов на золоте. Толщина золотой пластины составляла около  $250\text{\AA} = 2,5 \cdot 10^{-6}$  см. Размеры атома золота примерно равны  $0,28 \cdot \text{нм} = 2,8 \cdot 10^{-8}$  см. Таким образом, в золотой пластине было приблизительно 100 слоев (т.е. атомных плоскостей); в) Иллюстрация рентгенограммы, полученной при дифракции фотонов на кристалле. Фотографии и рисунок взяты из источников, находящихся в свободном доступе в Интернете.



**Рис. 12а** а) Электронограмма эталона NaCl; б) Электронограмма поликристалла гексагонального гидрида никеля NiH<sub>2</sub> <http://ignorik.ru/docs/lekciya-13-eksperimentalenie-metodi-kristallofiziki.html>; в) Дифракция электронов на алюминии Al. [https://www.researchgate.net/publication/295974108\\_Electron\\_Diffraction](https://www.researchgate.net/publication/295974108_Electron_Diffraction)  
 Фотографии взяты из источников, находящихся в свободном доступе в Интернете.

Формула (3.9) имеет ощутимое преимущество в том, что она позволяет произвести более тонкий анализ процесса рассеяния микрочастиц на кристалле, чем методы, основанные на идее о существовании волн де Бройля. Подборкой параметров  $\vartheta$ ,  $l_1$ ,  $n_1$  и  $r_{cor5}$  можно добиться сходства с экспериментально полученными электронограммами или рентгенограммами, при этом раскрывается более детальная информация о строении кристалла или другой многослойной отражающей поверхности.

2] Подстройка масштабного параметра  $\eta$

Масштабный параметр (2.78)

$$\eta = \frac{l_1^2 (\pi^2 n_1^2 - 6)}{6\pi^2 r_{cor5}}$$

получен при переходе от ФПРВ высот неровностей случайного процесса к ФПРВ его производной при учете изменения только второго центрального момента (т.е. дисперсии) [34, 35]. Более высокие центральные моменты в [34, 35] были оставлены без внимания, т.к. их влияние во многих случаях незначительно. Чтобы компенсировать данный недостаток, а также учесть другие особенности кристаллической решетки масштабный параметр  $\eta$  может быть «подстроен» под результаты экспериментов. Например, в нем могут быть изменены значения числовых констант или введены функциональные зависимости от параметров  $l_1$ ,  $n_1$  и  $r_{cor5}$ :

$$\eta = \frac{l_1^2 (\pi^2 n_1^2 - 3)}{12\pi^2 r_{cor5}} \quad \text{или} \quad \eta = \frac{l_1^2 (\pi^2 n_1^2 - 127)}{16\pi^2 r_{cor5}} \quad \text{или} \quad \eta = \frac{l_1^2 (4\pi^2 n_1^2 - 33)}{12\pi^2 r_{cor5}} \quad \text{и т.п.} \quad (3.13)$$

$$\eta = \frac{l_1^2 [\pi^2 \cos^2(\pi n_1 / N_1) - 8]}{4\pi^2 r_{cor5}} \quad \text{или} \quad \eta = \frac{\ln(l_1^2) [\pi^2 \operatorname{tg}^2(\pi n_1 / N_1) - 13]}{7\pi^2 r_{cor5}} \quad \text{и т.п.}$$

Возможно такая «подстройка»  $\eta$  приведет к большому сходству результатов вычислений по формуле (3.9) с реальными электронограммами или рентгенограммами. Вместе с тем, «подстройка» масштабного параметра может позволить оценить дополнительные особенности структуры и/или дефектов кристаллической решетки.

При «подстройке»  $\eta$  необходимо, однако, исходить из того, что уравнение (3.9) должно удовлетворять условию

$$\int_0^{\frac{\pi}{2}} \int_0^{2\pi} \rho(v, \omega / \vartheta, \gamma) dv d\omega = 1, \quad (3.14)$$

где угол  $v$  меняется от 0 до  $\pi/2$ , угол  $\omega$  меняется от 0 до  $2\pi$ .

Более корректный путь решения данной проблемы связан с дальнейшим детальным исследованием зависимости масштабного параметра  $\eta$  от центральных моментов ССП более высокого порядка. Также следует учитывать возможность анизотропии кристаллической решетки, например, с помощью использования уравнений типа (3.12). Кроме того, напомним, что формула (2.5) является более точным выражением для определения ДУРМ на неровных поверхностях.

### 3] Четное и нечетное число слоев кристалла

Из диаграмм, показанных на рис. 11, видно, что если в отражении микрочастиц эффективно участвует четное количество слоев  $n_1$ , то в самом центре диаграммы наблюдается минимум (провал); а если число отражающих слоев нечетное, то в самом центре диаграммы наблюдается максимум (пик). Тот же эффект обнаруживается в экспериментах (рис. 13).

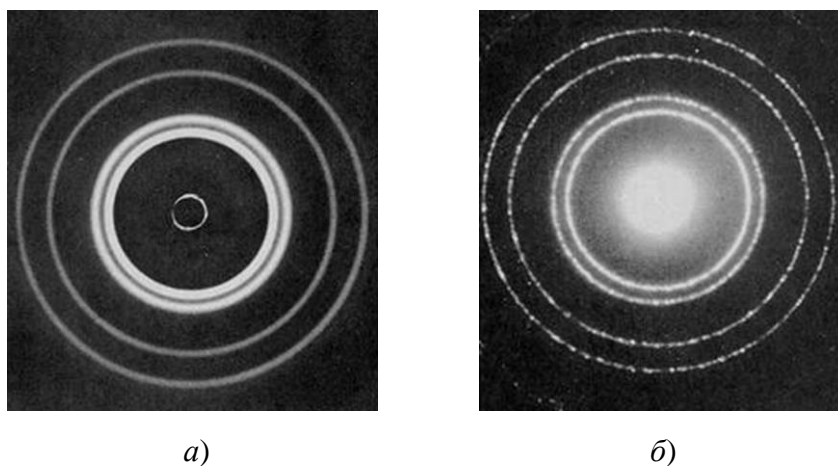


Рис. 13 *а)* В ряде экспериментов по дифракции микрочастиц в центре электронограммы или рентгенограммы наблюдается темное пятно. *б)* В ряде других подобных экспериментов в центре электронограммы или рентгенограммы наблюдается светлое пятно. Фотографии взяты из источников, находящихся в свободном доступе в Интернете.

Необходимо, однако, отметить, что при  $n_1 = 4$  (т. е. при четном числе слоев) в центре диаграммы наблюдается не минимум, а максимум (пик) (рис. 20).

#### 4] Скорость падающих микрочастиц $v$ и число отражающих слоев $n_1$

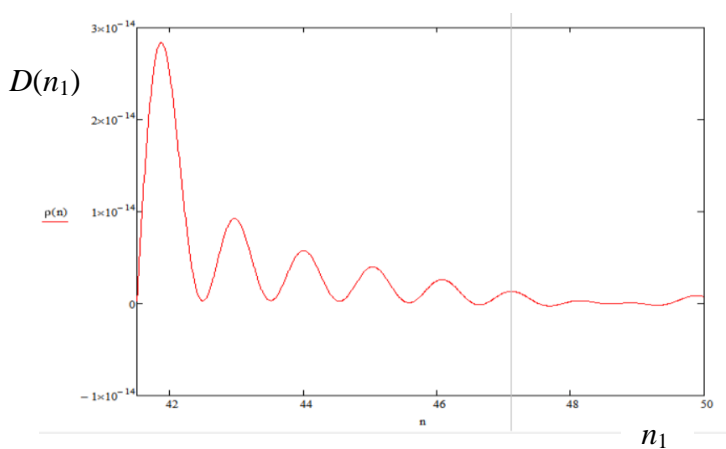
Следует ожидать, что число слоев  $n_1$ , на которые проникают микрочастицы, падающие на поверхность кристалла, в основном зависит от их энергии  $E$  [т.е.  $n_1 = f(E)$ ]. Точнее для падающих фермионов (в частности, электронов) глубина погружения в толщу отражающей поверхности (т.е. число слоев  $n_1$ ) в основном зависит от их скорости (точнее импульса или кинетической энергии), а для падающих бозонов (в частности, фотонов) – от их частоты. В более общем случае можно найти зависимость

$$n_1 = f(E, l_1, r_{\text{cor5}}, \vartheta, \gamma), \quad (3.15)$$

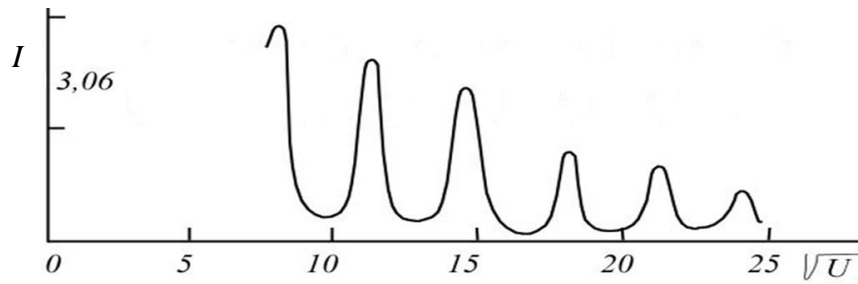
В выражении (3.15) могут быть так же учтены эффекты затенения части углубленных участков отражающей поверхности при малых углах скольжения  $\vartheta$  и т.д.

Установление функциональной зависимости (3.15) позволит более точно согласовывать результаты вычислений по формуле (3.9) с экспериментальными данными по дифракции микрочастиц на периодических структурах типа кристаллов и получить дополнительную информацию о строении отражающей поверхности.

В частности, рассмотрим ДУРМ (3.9) как функцию от числа слоев  $n_1$  отражающей поверхности монокристалла  $D(n_1)$  при шести фиксированных параметрах  $\vartheta, \gamma, v, \omega, l_1, r_{\text{cor5}}$ . Результаты расчетов по формуле (3.9)  $D(n_1)$  в этом случае показаны на рис. 14а (смотрите Приложение 11). С учетом того, что число слоев кристалла, на которые проникают падающие микрочастицы, зависит от их скорости  $n_1 = f(v)$ , эти расчеты хорошо согласуются с результатами эксперимента К. Дэвиссона и Л. Джермера (1927 г.) по дифракции электронов на кристалле никеля [1] (рис. 14б).



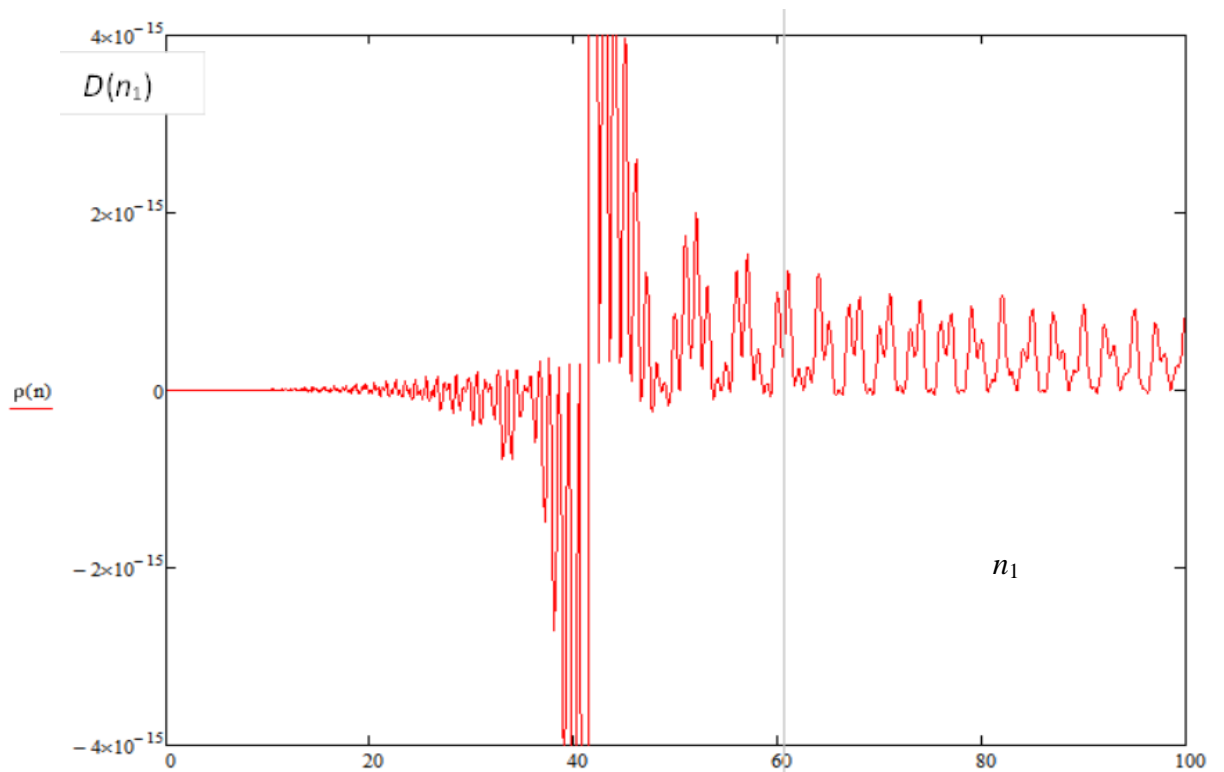




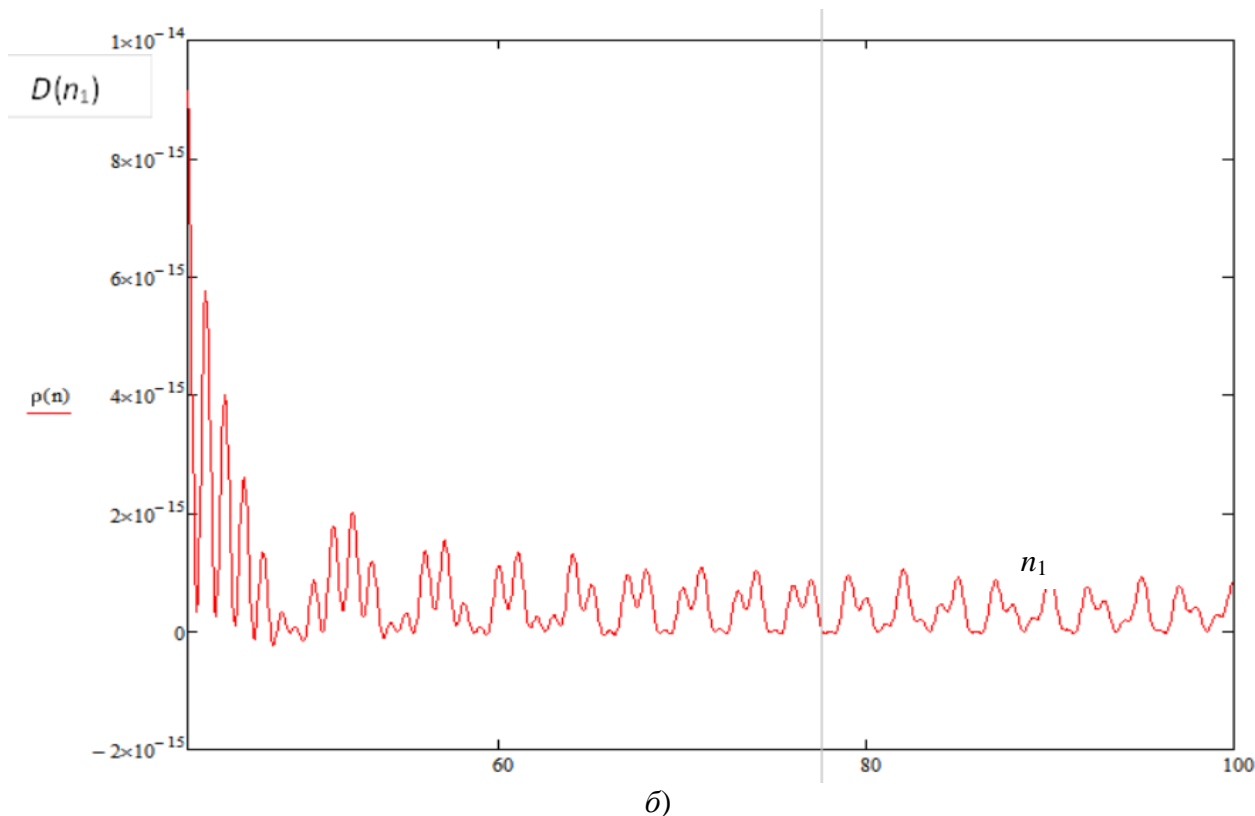
б)

**Рис. 14 а)** Зависимость ДУРМ (3.9) от числа слоев  $n_1$  отражающей поверхности монокристалла, которое, в свою очередь, зависит от скорости  $v$  (точнее, энергии  $E$ ) микрочастиц, падающих на эту поверхность (3.15). Расчеты выполнены по формуле (3.9)  $D(n_1)$  как функции от числа  $n_1$ , которое изменяется в диапазоне от 40 до 50 слоев, при следующих постоянных параметрах  $\vartheta = 45^\circ$ ,  $\gamma = 0^\circ$ ,  $\nu = 45^\circ$ ,  $\omega = 0^\circ$ ,  $l_1 = 10^{-11}$  см,  $r_{\text{cor5}} = 9 \cdot 10^{-9}$  см; б) Интенсивность пучка электронов  $I$ , рассеянного на монокристалле никеля при постоянном значении угла отражения, в зависимости от корня квадратного из напряжения  $U$ , ускоряющего частицы в электронной пушке (генераторе электронов). Данная экспериментальная зависимость впервые была получена в 1927 г. Клинтон Дэйви́ссоном и Лестером Джермером [1]

Формула (3.9)  $D(n_1)$  позволяет выполнить расчеты в значительно более широком диапазоне значений  $n_1$  (рис. 15). При этом из рис. 15а видно, что в диапазоне  $n_1$  от 0 до 40 слоев  $D(n_1)$  может принимать отрицательные значения. Поскольку формула (3.9)  $D(n_1)$  является ФПРВ, то на первый взгляд это выглядит как абсурдный результат.



а)



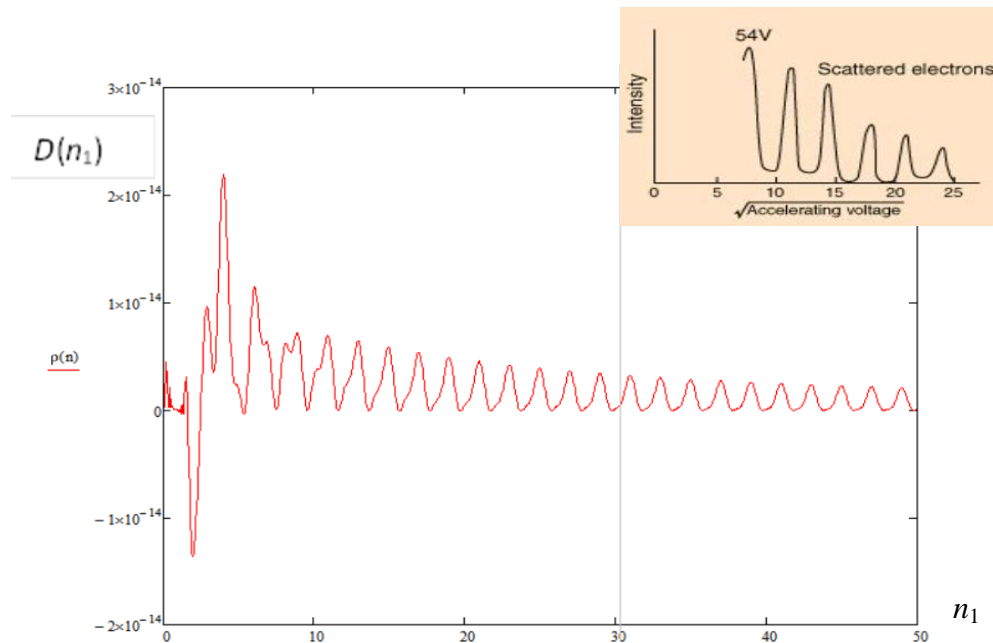
**Рис. 15** Результаты расчетов по формуле (3.9)  $D(n_1)$  как функции от числа слоев  $n_1$ , изменяющегося в диапазоне от а) 0 до 100 слоев; б) 40 до 100 слоев, при следующих постоянных параметрах  $\vartheta = 45^\circ$ ,  $\gamma = 0^\circ$ ,  $\nu = 45^\circ$ ,  $\omega = 0^\circ$ ,  $l_1 = 10^{-11}$  см,  $r_{\text{cor5}} = 9 \cdot 10^{-9}$  см. Расчеты выполнены с помощью программного обеспечения MathCad

Отрицательные значения при вычислениях по формуле (3.9) можно «устранить» предположением, что в рассматриваемом случае (т.е. при  $l_1 = 10^{-11}$  см и  $r_{\text{cor5}} = 9 \cdot 10^{-9}$  см) глубина отражающего слоя не может быть менее  $l_2 = l_1 n_1 = 40 \cdot 10^{-11} = 4 \cdot 10^{-10}$  см.

В другом случае, когда  $l_1 = 10^{-11}$  см и  $r_{\text{cor5}} = 2 \cdot 10^{-11}$  см – соответствует размеру атома, эффективно отражающего электроны или высокочастотные фотоны, расчет по формуле (3.9)  $D(n_1)$  приводит к результату, показанному на рис. 16. В этом случае запрет действует только на  $l_2$  в 3 – 4 первых слоя.

С другой стороны, как будет показано ниже, отрицательные результаты расчетов по формуле (3.9)  $D(n_1)$  могут означать, что при рассеянии микрочастиц на тонких пленках (т.е. при  $n_1 < 12$ ) часть микрочастиц проходят сквозь атомную решетку.

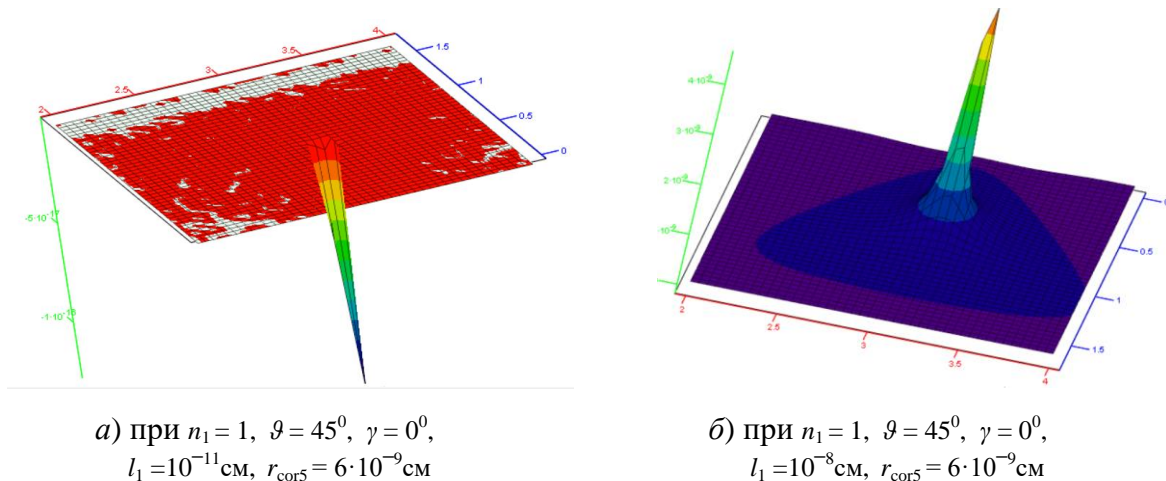
В этой статье проблема  $D(n_1) < 0$  не имеет окончательного решения. Данному вопросу следует посвятить отдельное теоретическое и экспериментальное исследование.



**Рис. 16** Результат расчета по формуле (3.9)  $D(n_1)$  при следующих неизменных параметрах  $\vartheta = 45^0$ ,  $\gamma = 0^0$ ,  $\nu = 45^0$ ,  $\omega = 0^0$ ,  $l_1 = 10^{-11}$  см,  $r_{\text{cor5}} = 2 \cdot 10^{-11}$  см и экспериментальная зависимость, полученная К. Дэвиссоном и Л. Джермером при исследовании дифракции электронов на кристалле никеля [1]

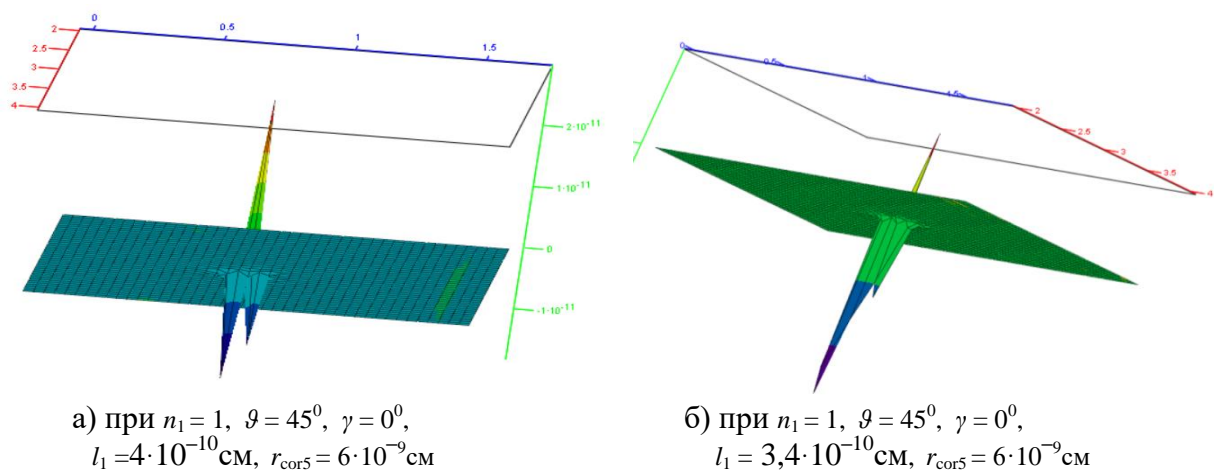
#### 5] Рассеяние микрочастиц на одном слое кристалла

При рассеянии микрочастиц на одном слое кристалла (т.е. при  $n_1 = 1$ ) расчет по формуле (3.9) приводит к результату, показанному на рис. 17 а,б.



**Рис. 17** Диаграммы упругого рассеяния микрочастиц на одном слое кристалла ( $n_1 = 1$ ), рассчитанные по формуле (3.9) при различных  $l_1$

Если толщина первого слоя  $l_1 = 10^{-11}$  см, то результат расчета по формуле (3.9) получается отрицательным (рис. 17 а). Это можно объяснить тем, что микрочастицы не отражаются от данного слоя, а проходят сквозь него. Если первый слой толще, например,  $l_1 = 10^{-8}$  см, то отражение от такого слоя (рис. 17 б) аналогично отражениям от верхнего слоя неровной поверхности с другими статистиками высот неровностей (рис. 7 – 10).

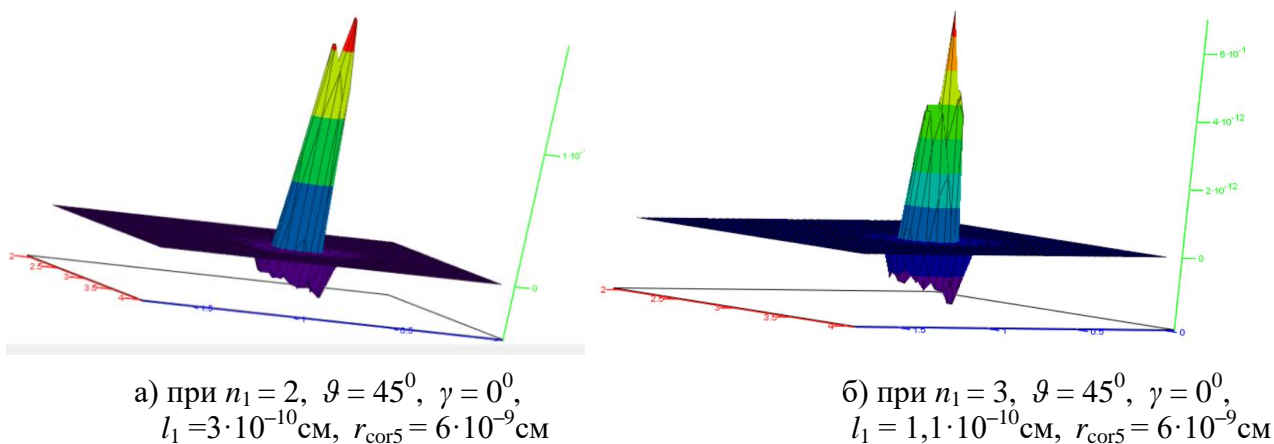


**Рис. 18** Диаграмма упругого рассеяния микрочастиц на одном слое кристалла, рассчитанная по формуле (9.3) при  $n_1 = 1$ , а)  $l_1 = 4 \cdot 10^{-10}$  см и б)  $l_1 = 3,4 \cdot 10^{-10}$  см

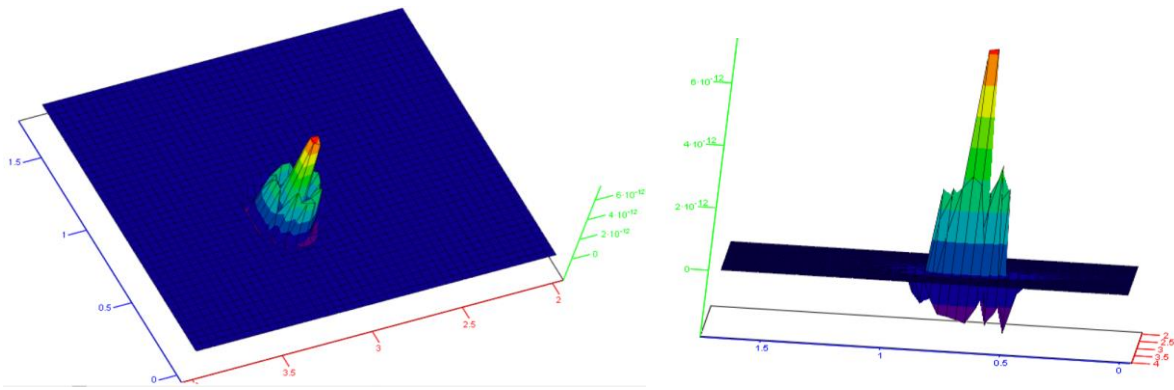
Интересный результат расчета по формуле (3.9) наблюдается при  $n_1 = 1$  и  $l_1 = 4 \cdot 10^{-10}$  см (рис. 18). Это случай можно интерпретировать как предсказание того, что часть микрочастиц отразится от одного слоя кристалла, а другая часть микрочастиц пройдет сквозь него.

б) *Рассеяние микрочастиц на двух, трех и четырех слоях кристалла*

Диаграммы упругого рассеяния микрочастиц на двух, трех и четырех слоях кристалла, рассчитанные по формуле (9.3), показаны на рис. 19 и 20.



**Рис. 19** ДУРМ на двух (а) и трех (б) слоях кристалла, рассчитанные по формуле (3.9)



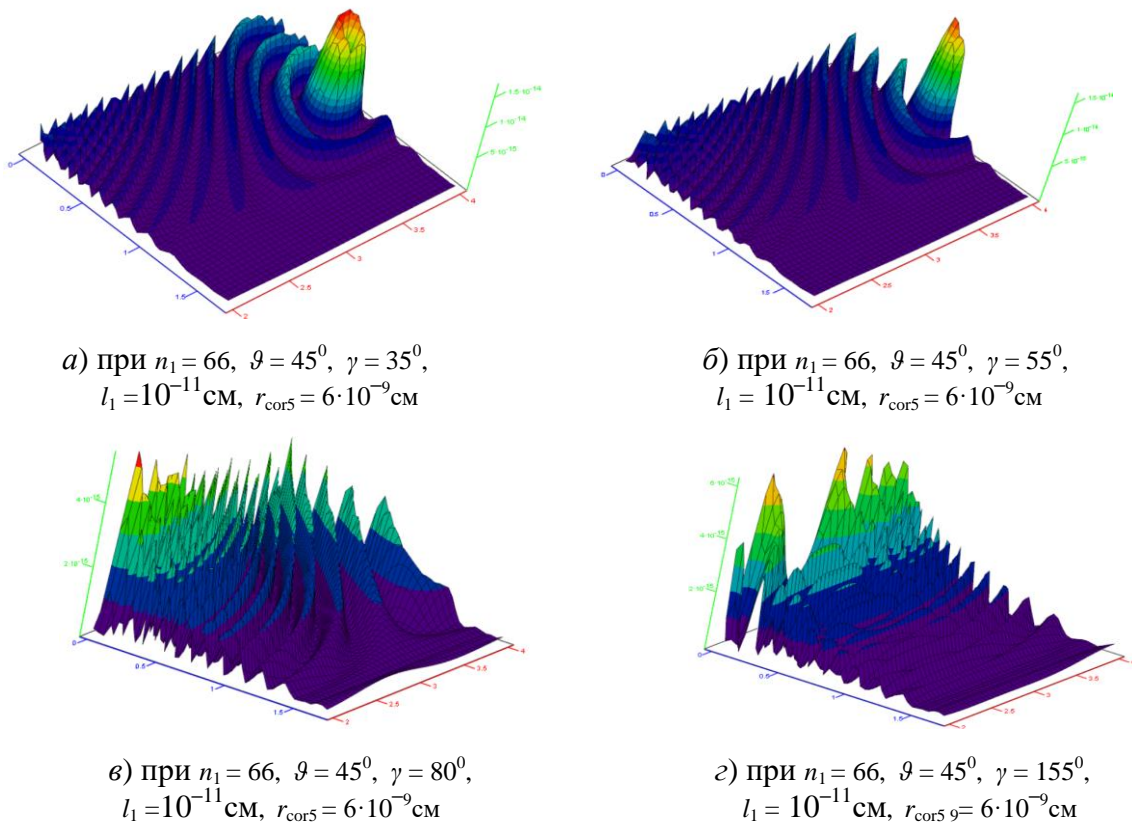
**Рис. 20** Два ракурса ДУРМ на четырех слоях кристалла, рассчитанные по формуле (3.9) при  $n_1 = 4$ ,  $\vartheta = 45^\circ$ ,  $\gamma = 0^\circ$ ,  $l_1 = 1,2 \cdot 10^{-10}$  см,  $r_{\text{cor5}} = 9 \cdot 10^{-9}$  см

### 7) Пятый параметр $\gamma$

Как было показано выше, подбором четырех параметров:

$$\begin{matrix} \text{H} & \text{V} & \text{H} & \text{I} \\ \vartheta, & l_1, & n_1, & r_{\text{cor5}} \end{matrix}$$

можно добиться, чтобы расчеты по формуле (3.9) соответствовали различным вариантам дифракции микрочастиц на многослойной статистически неровной поверхности кристалла. Пятый параметр (*квинтэссенция от лат. quinta essentia «пятая сущность»*) – угол  $\gamma$  (рис. 3 и 5), во всех ранее рассмотренных случаях оставался равным нулю ( $\gamma = 0^\circ$ ).

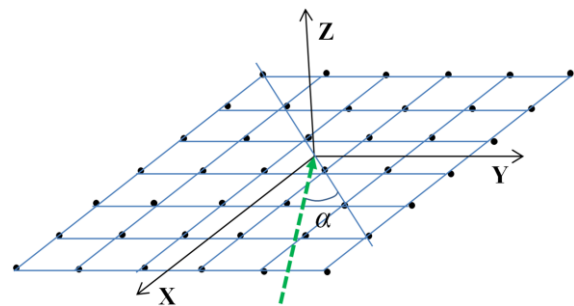


**Рис. 21** ДУРМ на кристалле, рассчитанные по формуле (3.9), при одинаковых  $\vartheta$ ,  $n_1$ ,  $l_1$ ,  $r_{\text{cor5}}$  и различных углах  $\gamma$

При выводе формулы (3.9) учитывалось, что все азимутальные поперечные сечения в разных направлениях однородной и изотропной неровной поверхности кристалла одинаковые. Поэтому ожидалось, что при изменении азимутального угла  $\gamma$  диаграмма рассеяния должна оставаться неизменной, а изменяться должно только ее азимутальное направление. Из диаграмм, показанных на рис. 21 а,б, видно, что при небольших углах  $\gamma$  равных  $35^\circ$  и  $55^\circ$  смещается только азимутальное направление всей диаграммы в целом. Но при дальнейшем увеличении угла  $\gamma$  диаграмма рассеяния значительно изменяется при неизменных остальных четырех параметрах  $\vartheta, l_1, n_1, r_{\text{cor5}}$  (рис. 21 в,г).

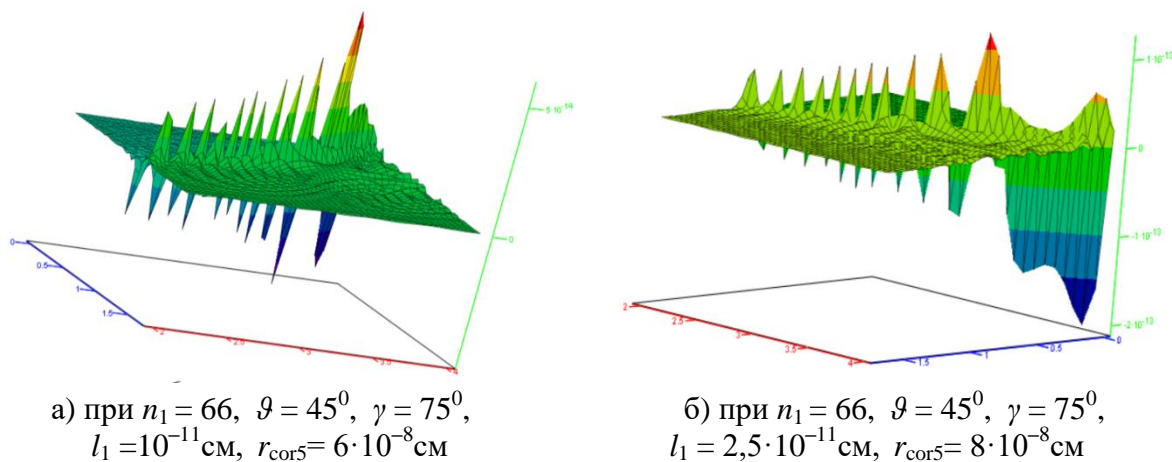
На данном этапе исследования сложно установить является ли это изменение недостатком формулы (3.9), или это отражение реальности, которое может быть подтверждено экспериментально.

Можно предположить, что ДУРМ зависит от угла  $\alpha$  между проекцией азимутального направления движения падающих микрочастиц на плоскость XOY и направлением рядов атомов в кристаллической решетке (рис. 22).



**Рис. 22** Угол  $\alpha$  между проекцией азимутального направления движения падающих микрочастиц на плоскость XOY и направлением рядов атомов в кристаллической решетке

Из рис. 22 видно, что поворот плоскости падения микрочастиц на угол  $\alpha$  сопровождается эффектом увеличения расстояния между атомами кристаллической решетки, эффективно участвующими в их рассеянии. Этот эффект можно учесть путем увеличения радиуса корреляции высот неровностей поверхности  $r_{\text{cor5}}$ . Диаграммы рассеяния при  $\gamma = 75^\circ$  и увеличенных по сравнению с предыдущим случаем  $r_{\text{cor5}}$  и  $l_1$ , показаны на рис. 23.

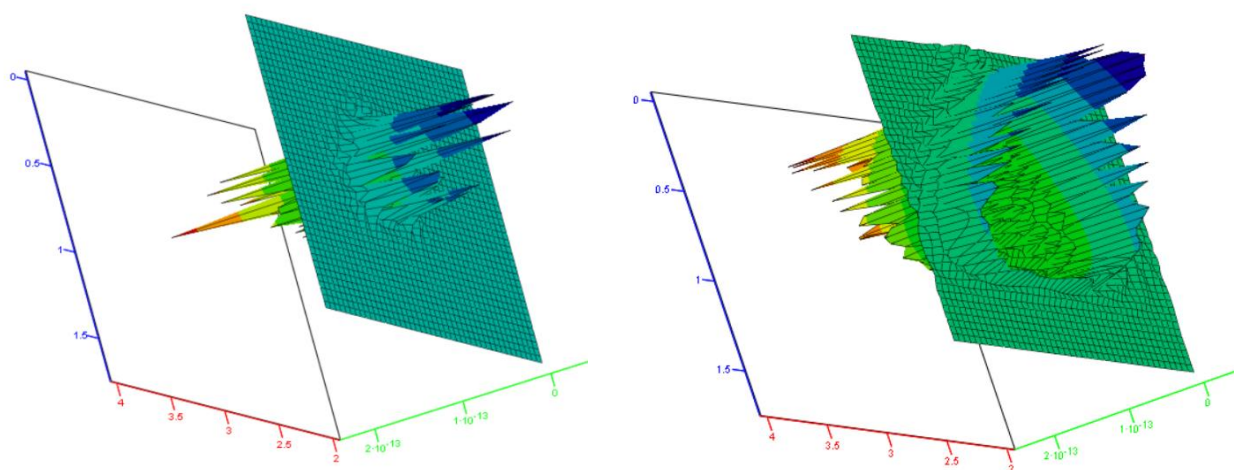


**Рис. 23** ДУРМ, рассчитанные по формуле (3.9), при  $\gamma = 75^\circ$  и увеличенных  $r_{\text{cor5}}$  и  $l_1$

Данные результаты расчетов по формуле (3.9) подлежат экспериментальной проверке. Если искажения ДУРМ из-за изменения угла  $\gamma$  не подтвердятся экспериментально, то этот недостаток можно компенсировать изменением ориентации системы отсчета. Во многих случаях ось координат, от которой отсчитывается угол  $\gamma$  можно изначально совместить с азимутальным направлением движения микрочастиц, падающих на поверхность кристалла. То есть в ряде экспериментов, пользуясь произволом в выборе системы отсчета, можно с самого начала добиться, чтобы  $\gamma = 0^0$ .

#### 8] Дифракция микрочастиц на тонких пленках

Методика расчета ДУРМ, представленная в §2.1 – 2.5, была разработана исходя из того, что микрочастицы после столкновения с поверхностью твердого тела отражаются от нее по законам геометрической оптики, а не проходят сквозь это тело. Но оказалось, что формула (3.9) позволяет рассчитать диаграмму рассеяния и при их прохождении микрочастиц сквозь тонкие пленки. На рис. 24 приведены диаграммы рассеяния микрочастиц на пленках, состоящих из 14 и 15 слоев кристаллической решетки.



а) при  $n_1 = 14$ ,  $\vartheta = 45^0$ ,  $\gamma = 0$ ,  
 $l_1 = 10^{-11}$  см,  $r_{\text{cor5}} = 9 \cdot 10^{-9}$  см

б) при  $n_1 = 15$ ,  $\vartheta = 45^0$ ,  $\gamma = 0$ ,  
 $l_1 = 2 \cdot 10^{-11}$  см,  $r_{\text{cor5}} = 9 \cdot 10^{-9}$  см

**Рис. 24** Дифракционные максимумы микрочастиц, проходящих сквозь тонкие пленки, рассчитанные по формуле (3.9)

Необходимо отметить, что данные дифракционные максимумы получаются при падении микрочастиц на тонкие пленки под углами скольжения  $\vartheta$  от  $25^0$  до  $65^0$ . При этом часть микрочастиц отражаются от неровных слоев (т.е. атомов) тонкой пленки, а другая часть проходит сквозь них.

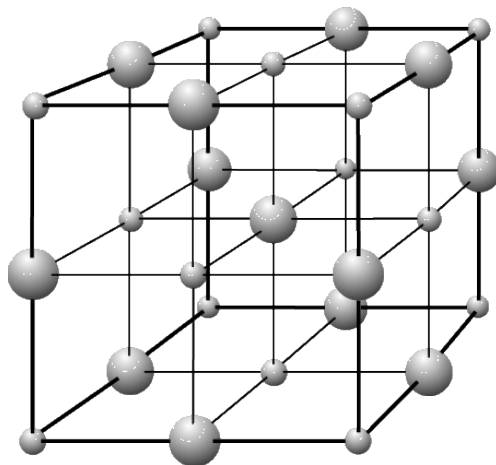
При вертикальном падении микрочастиц на поверхность тела (т.е. при  $\vartheta = 90^0$ ) расчеты по формуле (3.9) приводят к абсурдным результатам. То есть метод расчета ДУРМ, предложенный в той статье, к данному случаю не применим.

#### 9] Общие замечания

Подводя итоги данного параграфа, отметим, что формула (3.9) [или в другом виде (3.10)] открывает широкие возможности для исследования свойств твердых материалов, посредством анализа результатов рассеяния на них микрочастиц. Подбором пяти параметров  $\vartheta$ ,  $l_1$ ,  $n_1$ ,  $r_{cor5}$  и  $\gamma$ , которые связаны с некоторыми свойствами атомной или молекулярной структуры твердого тела, можно добиться сходства диаграммы рассеяния, рассчитанной по формуле (3.9) с электронограммой или рентгенограммой, и тем самым получить информацию о строении данного тела.

В целом, формула (9.3) с пятью параметрами  $\vartheta$ ,  $l_1$ ,  $n_1$ ,  $r_{cor5}$  и  $\gamma$  порождает бесконечное множество двумерных поверхностей, в котором могут существовать отдельные формы, отражающие очертания или суть процессов в окружающей реальности. Вместе с тем, все эти поверхности обладают одним общим свойством. Поскольку формула (3.9) является функцией плотности распределения вероятности  $D(\nu, \omega / \vartheta, \gamma) = \rho(\nu, \omega / \vartheta, \gamma) |G_{\nu\omega}|$ , то полная площадь всех этих поверхностей равна единице (3.14).

Формула (3.9) подходит для описания упругой дифракции не только элементарных частиц, атомов и фотонов, но и для рассеяния макроскопических упругих тел (типа футбольный или теннисный мячи) на крупных многослойных периодических структурах. Пусть, например, из металлических труб, с диаметром 30 – 50 см, собрана трехмерная решетка с длиной ребра одной кубической ячейки 3400 см = 34 м, и в узлы этой решетки помещены металлические шары диаметром от 50 до 80 см (рис. 25).



**Рис. 25** Кубическая решетка, состоящая из металлических труб и шаров разного диаметра



Если на такую кубическую решетку направить под углом скольжения  $\vartheta = 45^\circ$  поток футбольных мячей, с диаметром 22,3 см, то их рассеяние также описывается формулой (3.9). Действительно, если вместо  $l_1 = 10^{-11}$  см,  $r_{\text{cor5}} = 6 \cdot 10^{-9}$  см и  $n_1 = 66$  в масштабный параметр  $\eta$  (3.11) подставить  $l_1 = 50$  см,  $r_{\text{cor5}} = 3400$  см и  $n_1 = 18$ , то диаграмма упругого рассеяния футбольных мячей на такой кубической решетке, рассчитанная по формуле (3.9), будет примерно такой же, как показана на рис. 11а.

Если случай дифракции футбольных мячей подтвердится экспериментально, то мы сможем утверждать, что формула (3.9) оказалась универсальной в отношении различных масштабов исследуемых событий, а явления микромира неотличимы от явлений макромира (при аналогичных условиях).

Возможна постановка обратной задачи имитации процессов, протекающих в микромире, аналогичными процессами макромира. Это позволит более детально разобраться в сути микроскопических явлений.

## 4 Заключение

В данной статье получены следующие результаты.

### 4.1 Метод расчета диаграмм упругого рассеяния микрочастиц

В §§2.1–2.5 разработан метод расчета объемных ДУРМ на статистически неровных поверхностях с различными статистиками высот неровностей. Данный метод применим для описания рассеяния упругих частиц и волн (фотонов и фононов), при выполнении условий кирхгофского приближения:

- неровности отражающей поверхности статистически однородны, гладкие и крупномасштабные по сравнению с размерами микрочастиц (их радиуса или длины волны);
- отражение микрочастиц от всех локальных участков неровной поверхности происходит по законам геометрической оптики. Для краткости такое отражение микрочастиц в статье названо «упругим»;
- участок неровной отражающей поверхности находится на большом расстоянии от генератора и детектора микрочастиц (рис. 2).

В той работе акцентировано внимание на рассеянии элементарных частиц (в частности, электронов и высокочастотных фотонов). Однако в статье выдвинуто предложение, что предложенный метод подходит для описания упругого рассеяния также и крупномасштабных тел (например, футбольных или теннисных мячей), при выполнении вышеперечисленных условий. То есть предполагается, что нет принципиальных различий между дифракцией частиц микромира и компактных упругих тел макромира при аналогичных условиях.

## 4.2 ФПРВ производной стационарного случайного процесса

На основании процедуры (2.29) – (2.32), приведенной в [34, 35], в данной статье получены:

- 1) ФПРВ производной гауссовского стационарного случайного процесса (ССП) (2.40);
- 2) ФПРВ производной ССП с равномерным распределением высот неровностей (2.51);
- 3) ФПРВ производной ССП с лапласовым распределением высот неровностей (2.65);
- 4) ФПРВ производной ССП с распределением высот неровностей по закону Коши (2.67);
- 5) ФПРВ производной ССП с распределением высот неровностей по многослойному синусоидальному закону (2.76).

Полученные ФПРВ  $\rho[\xi'(r)]$  производных различных ССП могут представлять интерес для многих разделов статистической физики. Например, поскольку импульс частицы, движущейся в направлении оси  $x$ , связан с производной от ее координаты соотношением  $p_x = mv_x = m dx/dt = mx'$ , то процедура (2.29) – (2.32), по сути, означает переход от координатного представления статистической системы, к ее импульсному представлению, со всем множеством вытекающих из этого последствий.

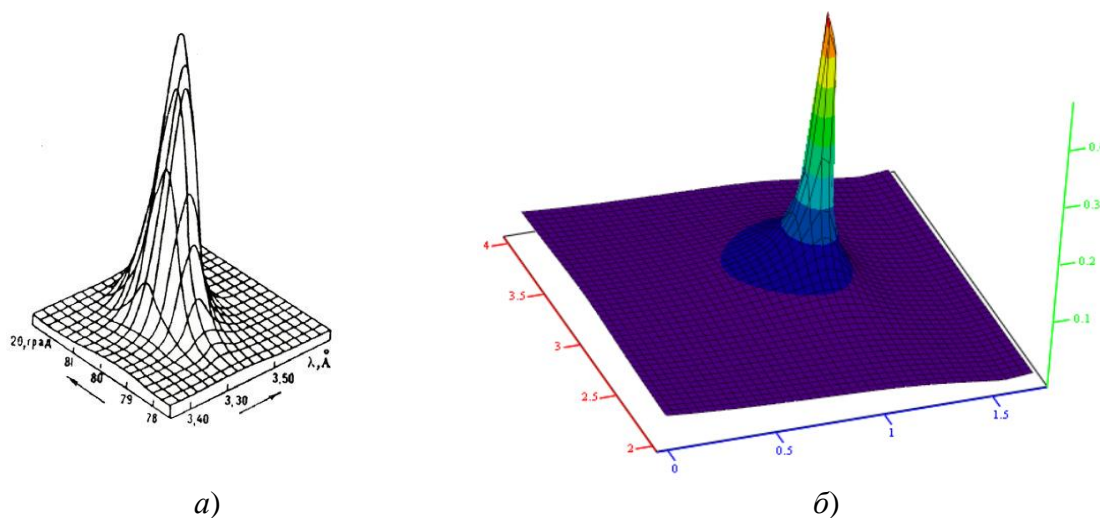
## 4.3 Объемные диаграммы упругого рассеяния микрочастиц на однослойной неровной поверхности

На основании метода, изложенного в §§ 2.1 – 2.5, и ФПРВ производных стационарных случайных процессов, полученных в §2.6, выведены следующие формулы для расчета диаграмм упругого рассеяния микрочастиц (ДУРМ) на однослойных крупномасштабных неровных поверхностях:

- 1) Формула для расчета ДУРМ на однослойной поверхности с *гауссовым* распределением высот неровностей (3.3);
- 2) Формула для расчета ДУРМ на однослойной поверхности с *равномерным* распределением высот неровностей (3.4);
- 3) Формула для расчета ДУРМ на однослойной поверхности с *лапласовым* распределением высот неровностей (3.5);
- 4) Формула для расчета ДУРМ на однослойной поверхности с распределением высот неровностей по *закону Коши* (3.6).

Из-за ограничений, накладываемых на объем статьи, здесь не приведено подробное сравнение объемных ДУРМ, рассчитанных по формулам (3.3) – (3.6) с экспериментальными данными. Однако отметим, что в ряде случаев полученные ДУРМ хорошо согласуются с экспериментами (при выполнении условий кирхгофского приближения), описанными в обширной литературе по рассеянию волн и частиц на статистически неровных поверхностях [17 – 27]. Например, на рис. 26 приведено сравнение ДУРМ, рассчитанной по формуле

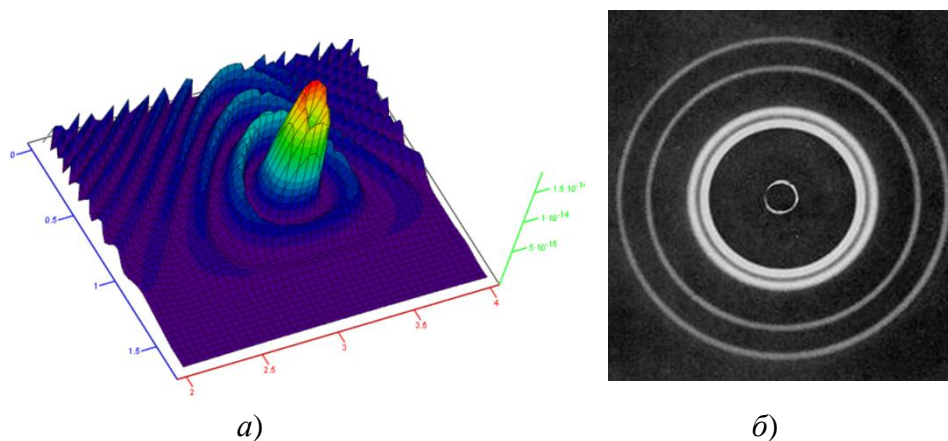
(3.5), с экспериментально полученной диаграммой рассеяния нейтронов на монокристалле CsHSeO<sub>4</sub> [36].



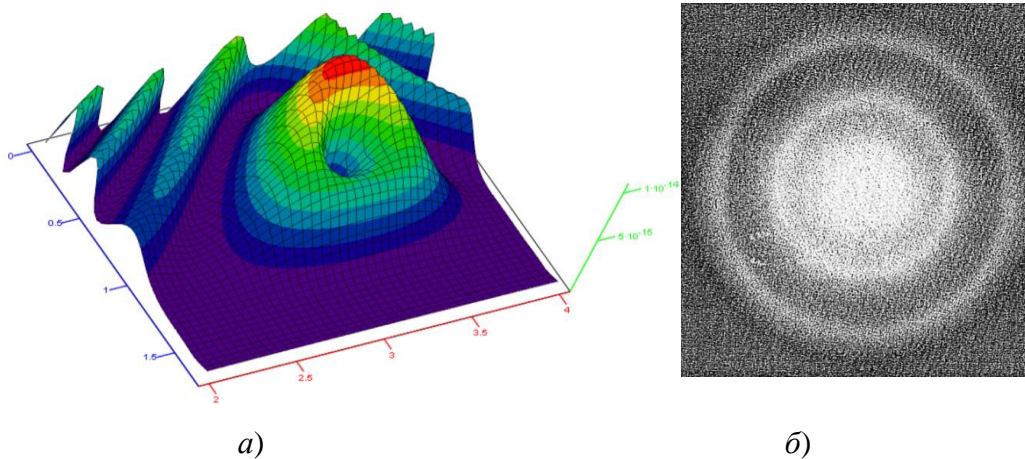
**Рис. 26** а) Дифракционный максимум интенсивности нейтронов, отраженных от монокристалла CsHSeO<sub>4</sub> [36]; б) ДУРМ, рассчитанная по формуле (3.5) для случая лапласового распределения высот неровностей отражающей поверхности, при  $\vartheta = 60^0$ ,  $\gamma = 0^0$ ,  $\mu_L = 7$ ,  $r_{\text{cor}3} = 5$

#### 4.4 Объемные диаграммы упругого рассеяния микрочастиц на многослойной неровной поверхности

На основании метода, изложенного в §§ 2.1 – 2.6, и ФПРВ производной многослойного синусоидального стационарного случайного процесса (2.76) в данной статье получена формула (3.9) для расчета ДУРМ на крупномасштабных (по сравнению с микрочастицами) неровностях многослойной поверхности кристалла.



**Рис. 27** а) Объемная диаграмма упругого рассеяния микрочастиц на многослойной поверхности кристалла, рассчитанная по формуле (3.9), при  $\vartheta = 45^0$ ,  $\gamma = 0^0$ ,  $n_1 = 64$ ,  $l_1 = 10^{-11}$  см,  $r_{\text{cor}5} = 6 \cdot 10^{-9}$  см; б) Экспериментально полученная электронограмма с темным пятном в середине. Фотография взята из источника, находящегося в свободном доступе в Интернете.



**Рис. 28** *а)* Объемная ДУРМ на многослойной поверхности кристалла, рассчитанная по формуле (3.9), при  $\vartheta = 45^\circ$ ,  $\gamma = 0^\circ$ ,  $n_1 = 46$ ,  $l_1 = 10^{-11}$  см,  $r_{\text{cor5}} = 1,4 \cdot 10^{-9}$  см; *б)* Экспериментально полученная электронограмма с размытым светлым пятном посередине. Фотография взята из источника, находящегося в свободном доступе в Интернете

Подбором пяти параметров  $\vartheta$ ,  $l_1$ ,  $n_1$ ,  $r_{\text{cor5}}$  и  $\gamma$ , входящих в уравнение (3.9), удастся добиться схожести диаграммы рассеяния микрочастиц на многослойной поверхности кристалла, рассчитанной с помощью данной формулы, с экспериментально полученными электронограммами (рис. 23, 24) или рентгенограммами.

Еще раз отметим, что данные результаты получены без привлечения идеи Луи де Бройля о волновых свойствах элементарных частиц.

## 5 Выводы

В статье выведены формулы для расчета упругих диаграмм рассеяния микрочастиц (фермионов и бозонов) на неровных однослойных и многослойных поверхностях с различными статистиками высот неровностей при выполнении условий кирхгофского приближения. При этом получены функции плотности распределения вероятности (ФПРВ) производной различных стационарных случайных процессов, которые могут быть использованы в ряде других задач статистической физики.

Помимо решения вышеуказанных практических задач, эта статья направлена на внесение рациональной ясности в ментальную проблему, связанную с обсуждением идеи о возможном «существовании» волн де Бройля. Примененные здесь законы геометрической оптики и вероятностные методы статистической физики позволили, по мнению автора, объяснить дифракцию элементарных частиц и атомов на кристаллах без привлечения данной гипотезы Луи де Бройля о волнах материи. Более того, в этой работе высказано предположение, что явление дифракции частиц на твердых периодических структурах может проявляться не только в микромире, но и в макромире при аналогичных условиях.

## **6 Благодарности (Acknowledgements)**

Благодарю моих наставников д.т.н. А. А. Кузнецова и д.ф-м.н. А. И. Козлова за постановку и обсуждение задач, изложенных в этой статье. При выполнении расчетов неоценимую помощь оказал к.т.н. С. В. Костин. Во время подготовки рукописи ценные замечания высказали Д. Рид, академик РАЕН Г.И. Шипов, к.ф-м.н В.А. Лукьянов и к.т.н. Е. А. Губарев.

## **7 Сокращения и определения (Abbreviations and Definitions)**

ДУРМ – диаграмма упругого рассеяния микрочастиц;

СКО – среднеквадратичное отклонение;

ССП – стационарный случайный процесс;

ФПРВ – функция плотности распределения вероятности.

*Микрочастица* – в данной работе это твердое упругое компактное тело или луч света (фотон), размеры или длина волны которых много меньше характерных размеров неровностей отражающей поверхности, при столкновении с которыми они отражаются по законам геометрической оптики (смотрите §1).

*Упругое рассеяние (отражение)* – это отражение частицы от поверхности по законам геометрической оптики (рис. 3, 4, 5): 1) Отражение упругой частицы от твердой поверхности происходит в плоскости ее падения; 2) Угол отражения  $Q_2$  равен углу падения  $Q_1$ .

## **8 Конкурирующие интересы (Competing Interests)**

Автор заявляет, что конкурирующие интересы отсутствуют.

## **9 Согласие на публикацию (Consent to publication)**

Имеется разрешение на публикацию Московского авиационного института.

## **10 Этическое одобрение и согласие в участии (Ethics approval and consent to participate)**

Не применимо (not applicable).

## **11 Финансирование (Funding)**

Финансирование данной работы отсутствует.

## **12 Доступность данных и материалов (Availability of data and materials)**

Данные, подтверждающие результаты этого исследования, могут быть получены у автора данной статьи по запросу в адрес: [alsignat@yandex.ru](mailto:alsignat@yandex.ru) и на сайте <http://metraphysics.ru/>.

### 13 Ссылки (References)

- [1] C. J. Davisson, L. H. Germer, Reflection of Electrons by a Crystal of Nickel, Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America. vol.14 (4), 1928, pp. 317–322. doi:10.1073/pnas.14.4.317, PMC 1085484, PMID 16587341.
- [2] W.L. Bragg, The Diffraction of Short Electromagnetic Waves by a Crystal. Proceeding of the Cambridge Philosophical Society, **17**, 43 (1914).
- [3] K. R. Gehrenbeck, "Electron diffraction: fifty years ago". Physics Today. 31 (1):34–41(1978). doi:10.1063/1.3001830.
- [4] B. K. Vainshtein, Structure Analysis by Electron Diffraction, Pergamon Press, Oxford (1964).
- [5] З. Г. Пинскер, Дифракция электронов/ Под ред. и с предисл. акад. А. А. Лебедева; Акад. наук СССР. Ин-т кристаллографии. Москва; Ленинград : Изд. и 2-я тип. Изд-ва Акад. наук СССР в М., 1949. С. 404.
- [6] B. K. Vainshtein, Structure Analysis by Electron Diffraction, Pergamon Press, Oxford (1964).
- [7] L. A. Bendersky, F.W. Gayle, Electron Diffraction Using Transmission Electron Microscopy, Journal of Research of the National Institute of Standards and Technology, vol.106 (2001) pp. 997–1012. (leonid.bendersky@nist.gov frank.gayle@nist.gov)
- [8] J. C. H. Spence and J. M. Zuo, Electron microdiffraction, Plenum Press, New York (1992).
- [9] J. M. Cowley Electron Diffraction Techniques, International Union of Crystallography, Oxford University Press (1992). International Union of Crystallography Monographs on Crystallography
- [10] R. P. Feynman, The Feynman Lectures on Physics, vol. I. Addison-Wesley.(1963) pp.16–10
- [11] B. K. Vainshtein, Structure Analysis by Electron Diffraction, Pergamon Press, Oxford (1964), p. 430, ISBN: 9781483164755.
- [12] G. P. Thomson, Diffraction of Cathode Rays by a Thin Film, Nature, vol.119 (3007), (1927): 890. Bibcode:1927Natur.119Q.890T. doi:10.1038/119890a0.
- [13] B.D. Cullity, Elements of X-ray Diffraction, Addison-Wesley Publishing Company, Inc (1956), p. 482.
- [14] L. S. Bartell, B. L. Carroll, Electron-Diffraction Study of the Structure of B(CH<sub>3</sub>)<sub>3</sub> J. Chem. Phys. vol. **42**, 3076 (1965); <https://doi.org/10.1063/1.1696383>.
- [15] H. C. Pedersen, D. J. Webb, P. M. Johansen, Fundamental characteristics of space-charge waves in photorefractive sillenite crystals J. Opt. Soc. Am. B **15**, 2573 (1998). <https://doi.org/10.1364/JOSAB.15.002573>.

- [16] R. Eisberg, R. Resnick, Chapter 3 – de Broglie's Postulate—Wavelike Properties of Particles. *Quantum Physics: of Atoms, Molecules, Solids, Nuclei, and Particles* (2nd ed.) (1985). John Wiley & Sons. ISBN 978-0-471-87373-0.
- [17] F. G. Bass, I. M. Fuks, *Wave Scattering from Statistically Rough Surfaces*, Pergamon Press, Oxford (1979).
- [18] P. Beckmann, A. Spizzichino, *The scattering of electromagnetic waves from rough surfaces* Norwood, MA, Artech House, Inc., 1987, p. 511.
- [19] A.B. Shmelev (1972) Wave scattering by statistically uneven surfaces. *Sov Phys Uspekhi*, vol. **15** (2) :173–183 <http://dx.doi.org/10.1070/PU1972v015n02ABEH004961> vol. 12, 1553 (1987)
- [21] Л. М. Бреховских Дифракция волн на неровной поверхности. *Журнал экспериментальной и теоретической физики* 1952, 23, **3** (9), 275 – 304.
- [22] М.А. Исакович, Рассеяние волн на статистически шероховатой поверхности. *Журнал экспериментальной и теоретической физики* 1952, 23, **3** (9), 305 – 314.
- [23] E. A. Shorokhova, A. V. Kashin Some Features of Electromagnetic Wave Scattering from Statistically Rough Land Covers in the Millimeter-Wave Range of Wavelengths, *Radiophysics and Quantum Electronics*, vol. 48, (2005), pp. 426–434.
- [24] Bennett HE, Porteus JO (1961) Relation between surface roughness and specular reflectance at normal incidence, *Journal of the Optical Society of America*, **51** Issue 2, pp. 123-129, <https://doi.org/10.1364/JOSA.51.000123>.
- [25] K.A. O'Donnell, Mendez ER (1987) Experimental study of scattering from characterized random surfaces. *J Opt Soc Am A*, vol. **4** :1194–1205.
- [26] K. A. O'Donnell, E. R. Mendez, Experimental study of scattering from characterized random surfaces, *J. Opt. Soc. Am. A*, vol. 4, (1987), pp. 1194-1205. <https://www.osapublishing.org/josaa/abstract.cfm?URI=josaa-4-7-1194>
- [27] A. Ogilvy, M. Harold, Merklinger *Theory of Wave Scattering from Random Rough Surfaces*. *The Journal of the Acoustical Society of America*, vol. **90**, (1991), p. 3382, <https://doi.org/10.1121/1.401410>
- [28] R. Sharipov, *Course of Analytical Geometry* UFA 2011 ISBN-13: 9785747725744, p. 226 arXiv:1111.6521v2
- [29] Stillwell, John (2004). "Analytic Geometry" Springer Science + Business Media Inc. p. 105, ISBN 0-387-95336-1.
- [30] R. Spiegel, S. Lipschutz, D. Spellman, *Vector Analysis (Schaum's Outlines)* (2nd ed.). McGraw Hill (2009), ISBN 978-0-07-161545-7.

- [31] А. Н. Канатников, А. П. Крищенко Аналитическая геометрия. – М.: Издательство МГТУ им. Н.Э. Баумана, 2002. С. 388, ISBN 5-7038-1671-8.
- [32] С.М. Рытов, Введение в статистическую радиофизику Ч.1. – М.: Наука, 1976, С. 494.  
S. M. Ritov Vvedenie v statisticheskuyu radiofiziku (Introduction to Statistical Radio Physics). (Moscow: Nauka) (1976)
- [33] Тиханов В.И. Статистическая радиофизика. – М.: Радио и связь, 1982, С. 622.  
V.I. Tihanov Statisticheskaya radiofizika (Statistical Radio Physics). (Moscow: Radio & commun.) (1982)
- [34] M. Batanov (2017) Derivation of Schrodinger's equation <https://arxiv.org/abs/1702.01880>  
p. 34
- [35] М С. Батанов Вывод уравнения Шредингера для микроскопических и макроскопических систем. (игра в «кости») "Инженерная физика" в №3, 2016  
<http://infiz.tgizd.ru/ru/arhiv/mount3year2016>
- [36] Л.К. Мартинсон, Е.В. Смирнов Физика в техническом университете. Том 5 Квантовая физика. Москва: МГТУ им. Н.Э. Баумана (2002)  
[http://fn.bmstu.ru/data-physics/library/physbook/tom5/ch2/formulas/fml2.10\\_more.htm](http://fn.bmstu.ru/data-physics/library/physbook/tom5/ch2/formulas/fml2.10_more.htm)