

Стохастическая интерпретация дифракции частиц на кристалле

Михаил Батанов-Гаухман¹

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, alsignat@yandex.ru

Аннотация: В данной работе на основании анализа формулы (2.2) для расчета диаграмм упругого рассеяния микрочастиц на многослойной поверхности кристалла, выведенной автором в статье [3], показано, что стохастический подход к решению задачи рассеяния элементарных частиц на кристаллах может послужить альтернативой гипотезе Луи де Бройля о волновых свойствах материальных частиц. Представленные в данной работе результаты расчетов по формуле (2.2) хорошо согласуются с экспериментально полученными электронограммами и рентгенограммами и опытами К. Дэвиссона и Л. Джермера.

Ключевые слова: дифракция электронов на кристалле, диаграмма рассеяния частиц, опыт Дэвиссона и Джермера, объемная диаграмма рассеяния, статистически неровная многослойная поверхность, кирхгофовское приближение

03.65.–w (Quantum mechanics)

05.30.–d (Quantum statistical mechanics)

1 ПРЕДЫСТОРИЯ И ВЕДЕНИЕ

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» де Бройля в кристалле [1]:

¹ alsignat@yandex.ru

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

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

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 статье автора [3, [arXiv:2007.13527](https://arxiv.org/abs/2007.13527)] на основании законов отражения геометрической оптики и теории вероятностей выведена стохастическая формула (2.2) (смотрите формулу (3.9) в [3]) для расчета объемных диаграмм упругого рассеяния микрочастиц (в частности электронов) на многослойной поверхности кристалла.

В данной статье показано, что при определенных параметрах формула (2.2) (или (3.9) в [3]) позволяет описать дифракцию микрочастиц на кристаллах без привлечения идеи де Бройля о волновых свойствах материи.

Результаты расчетов по этой формуле (2.2) хорошо согласуются с экспериментально полученными электронограммами (рис.1.1, 2.3 и 2.4) и результатами эксперимента К. Дэвиссона и Л. Джермера (1927г) по дифракции электронов на кристалле никеля [1] (рис. 2.5).

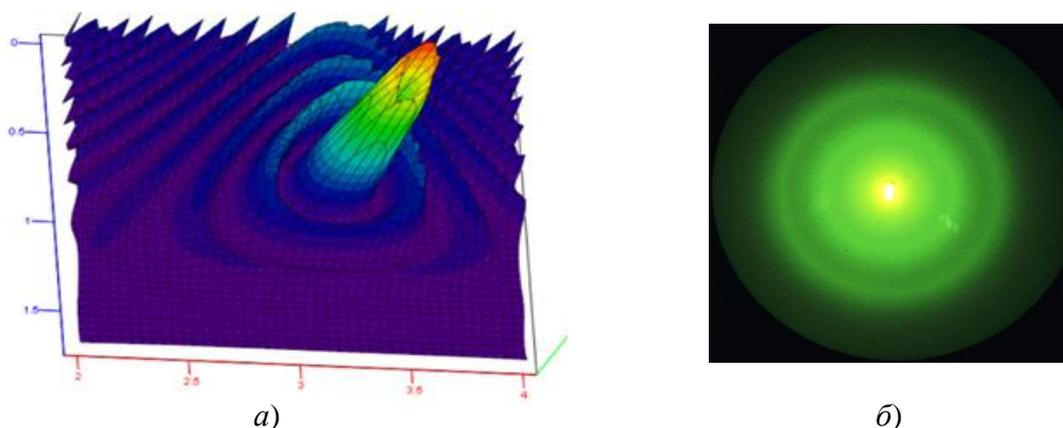


Рис. 1.1 а) Объемная диаграмма упругого рассеяния микрочастиц на многослойной поверхности кристалла, полученная в результате расчетов по формуле (3.9) из [77] {или в данной статье (2.2)}; б) Экспериментально полученная электронограмма (<https://www.sciencephoto.com/media/3883/view>)

Под «микрочастицами» в [3] и в данной работе подразумеваются любые частицы (фермионы и бозоны), размеры (или длина волны) которых много меньше характерных размеров неровностей отражающей поверхности (кирхгофовское приближение), и упругое отражение которых происходит по законам геометрической оптики. Например, «микрочастицей» может называться электрон с эффективным размером порядка 10^{-13} см, который

отражается от многослойной поверхности кристалла с характерными размерами неровностей каждого слоя порядка 10^{-11} см и более. 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 λ на два порядка меньшей, чем радиус автокорреляции высот неровностей отражающей поверхности.

Под упругим рассеянием микрочастицы на поверхность одного из неровных слоев кристалла, в [3] и в данной работе, подразумевается ее отражение по законам геометрической оптики: «Падающая микрочастица и перпендикуляр (нормаль) к отражающей поверхности, восстановленный в точке ее падения, находятся в одной плоскости (т.н. плоскости падения) (рис.1.2 и 1.3)»; «Угол падения Q_1 микрочастицы равен углу ее отражения Q_2 (рис.1.2 и 1.3)».

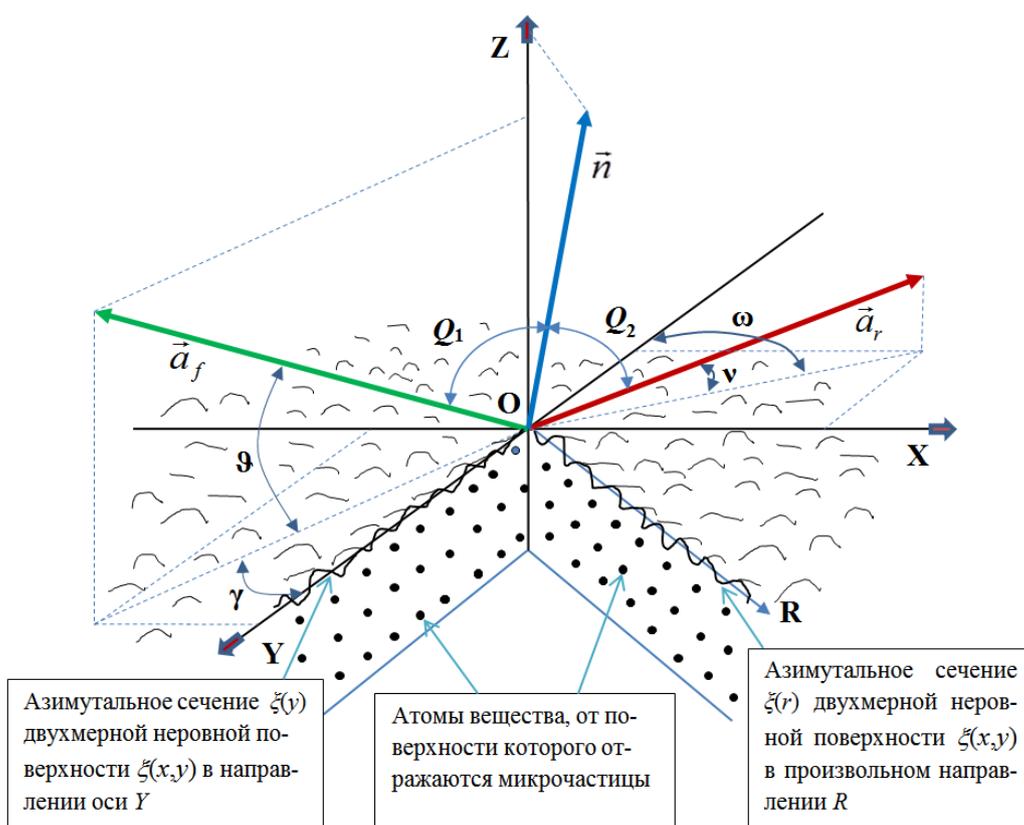


Рис. 1.2 Участок неровной поверхности (верхнего слоя кристалла), отражающий микрочастицы, где: ϑ, γ – углы, задающие направление падения микрочастицы на отражающую поверхность; ν, ω – углы, задающие направление отражения микрочастицы от данной поверхности; \vec{a}_f – единичный вектор, указывающий направление на генератор микрочастиц; \vec{n} – единичный вектор нормали к поверхности в месте падения микрочастицы; \vec{a}_r – единичный вектор, указывающий направление движения микрочастицы, после упругого столкновения с отражающей поверхностью

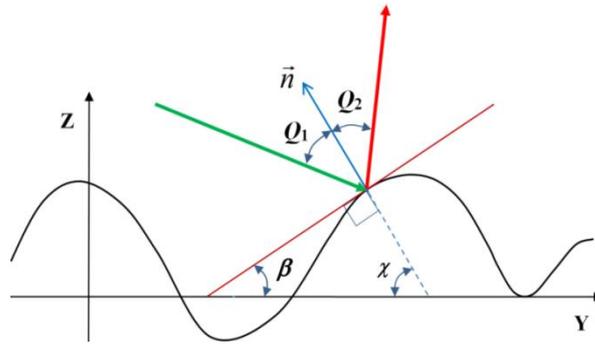


Рис. 1.3 Упругое (зеркальное) отражение микрочастицы от участка неровной поверхности по законам геометрической оптики: 1) упругое отражение микрочастицы (или луча света) происходит в плоскости ее падения; 2) угол отражения микрочастицы (или луча света) Q_2 равен углу ее падения Q_1 (т.е. $Q_2 = Q_1$)

Объектом исследования в данной статье являются концентрические диаграммы рассеяния микрочастиц (в частности, электронов или фотонов) на многослойной поверхности кристалла при выполнении требований кирхгофское приближения.

Основная цель этой работы заключается в том, чтобы предложить стохастический метод расчета объемных диаграмм рассеяния микрочастиц на кристалле без привлечения гипотезы Луи де Бройля о возможном существовании волн материи.

2 МЕТОД

2.1 Стохастическая диаграмма упругого рассеяния микрочастиц на многослойной поверхности кристалла

В статье автора [3] сделано предложение, что неровности многослойной поверхности кристалла распределены по многогорбому синусоидальному закону

$$\rho(\xi) = \begin{cases} \frac{2 \sin^2(\pi_1 \xi / l_2)}{l_2} & \text{при } \xi \in [0, l_2]; \\ 0 & \text{при } \xi \notin [0, l_2], \end{cases} \quad (2.1)$$

где $\rho(\xi)$ – функция плотности распределения вероятности (ФПРВ) высот неровностей многослойной поверхности кристалла (рис. 2.1); l_1 – толщина одного (например, первого) отражающего слоя кристалла (рис. 2.1); n_1 – число одинаковых неровных слоев кристалла синусоидального типа, укладываемых в интервале $[0, l_2]$; $l_2 = n_1 l_1$ – глубина многослойной поверхности кристалла эффективно рассеивающей микрочастицы.

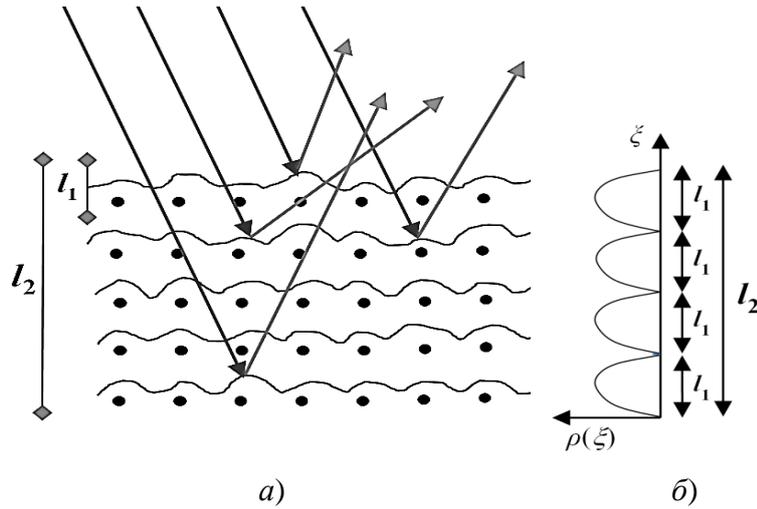


Рис. 2.1 а) Рассеяние микрочастиц на многослойной поверхности кристалла, при этом каждый атомный слой кристалла рассматривается как отдельная неровная поверхность синусоидального типа; б) Многогорбая синусоидальная ФПРВ высот неровностей многослойной поверхности кристалла (2.1)

Далее в § 3.2 статьи [3] выведена следующая формула для расчета диаграмм упругого рассеяния микрочастиц (ДУРМ) на многослойной поверхности кристалла с ФПРВ высот неровностей (2.1)

$$D(\nu, \omega / \vartheta, \gamma) = \frac{1}{2\pi^2 l_2} \left[\frac{\cos^2(\pi n_1) - \cos(\pi n_1) \cos\left(\sqrt{\frac{a^2 + b^2}{d^2}} l_2 / \eta\right)}{\left(\pi n_1 / l_2\right)^2 - \left(\sqrt{\frac{a^2 + b^2}{d^2}} l_2 / \eta\right)^2} - \frac{\cos\left(\pi n_1 + \sqrt{\frac{a^2 + b^2}{d^2}} l_2 / \eta\right) - 1}{\left(\pi n_1 / l_2 + \sqrt{\frac{a^2 + b^2}{d^2}} / \eta\right)^2} \right] \times \left| \frac{d(a'_\nu b'_\omega - a'_\omega b'_\nu) + c'_\nu (b a'_\omega - a b'_\omega)}{d^2 \sqrt{a^2 + b^2}} \right|, \quad (2.2)$$

где согласно обозначениям, показанным на рис. 1.2 и 2.1

$$a = \cos \nu \cos \omega + \cos \vartheta \cos \gamma; \quad b = \cos \nu \sin \omega + \cos \vartheta \sin \gamma; \quad d = \sin \nu + \sin \vartheta; \quad a'_\nu = -\sin \nu \cos \omega; \\ b'_\nu = -\sin \nu \sin \omega; \quad c'_\nu = \cos \nu; \quad a'_\omega = -\cos \nu \sin \omega; \quad b'_\omega = \cos \nu \cos \omega;$$

$$\eta = \frac{l_1^2 (\pi^2 n_1^2 - 6)}{6\pi^2 r_{cor5}}, \quad (2.3)$$

здесь

l_1 – толщина одного отражающего слоя (т.е. горизонтальной атомной плоскости) кристалла (рис. 2.1);

$l_2 = l_1 n_1$ – 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_{cor} – радиус автокорреляции одного неровного слоя кристалла синусоидального типа. Данный радиус автокорреляции примерно равен усредненному радиусу кривизны синусоидальных неровностей одного слоя кристалла;

ϑ, γ – углы, задающие направление движения микрочастиц, падающих на поверхность кристалла (рис. 1.2);

ν, ω – углы, задающие направление движения микрочастиц, отраженных от поверхности кристалла в сторону детектора (рис. 1.2).

В результате расчетов по формуле (2.2) при различных параметрах $l_1, n_1, r_{\text{cor}}, \vartheta$ и γ получается бесконечное количество диаграмм рассеяния, похожие на двумерные ландшафты гористой местности. Некоторые варианты из этих диаграмм (т.е. 2D - ландшафтов) при различных параметрах l_1, n_1, r_{cor} представлены рис. 2.2.

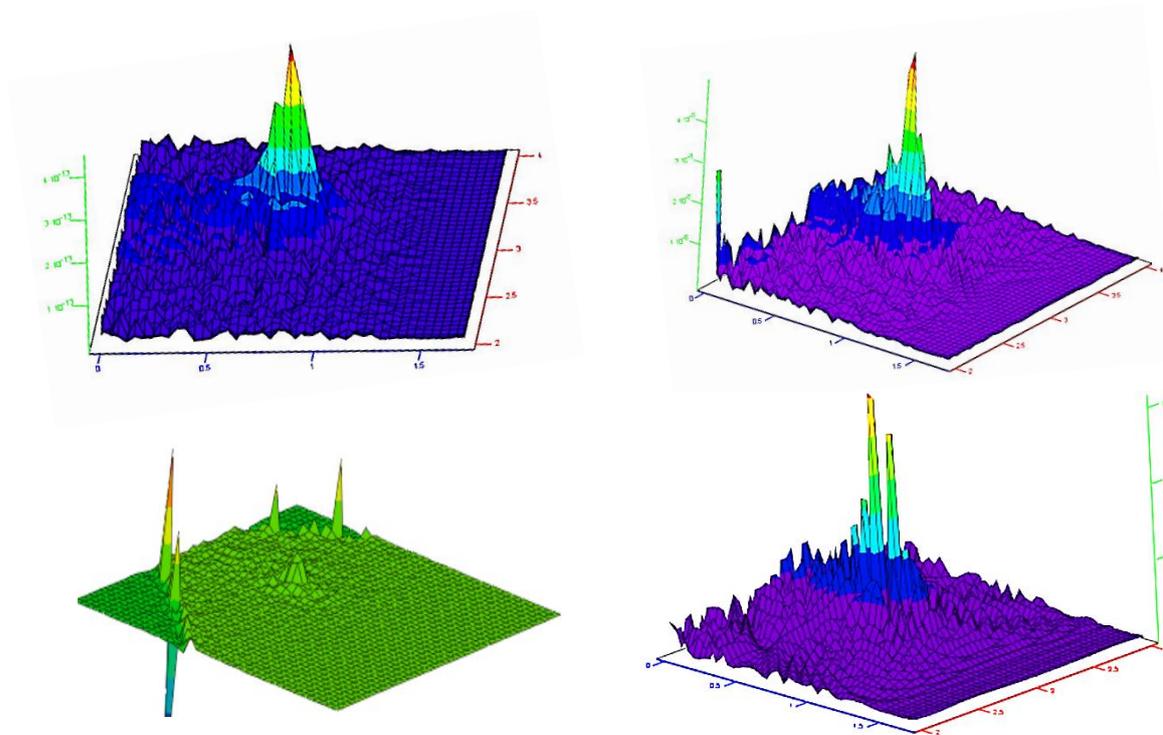


Рис. 2.2 Диаграммы упругого рассеяния микрочастиц на многослойной статически неровной поверхности кристалла, рассчитанные по формуле (2.2) при различных параметрах $l_1, n_1, r_{\text{cor}}, \vartheta, \gamma$

Всю бесконечную совокупность ДУРМ (т.е. 2D-ландшафтов), получаемых при расчетах по формуле (2.2), предлагаем называть двумерным миром Басса – Фукса, в честь Фридриха Гершенович Басса и Иосифа Моисеевич Фукса, внесших большой вклад в исследование рассеяния волн на статистически неровных поверхностях [4].

ПОЛУЧЕННЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ

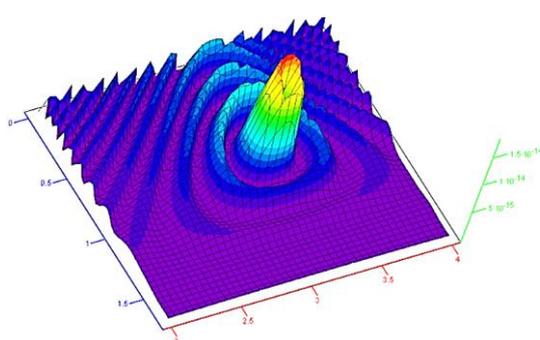
2.2 Стохастические диаграммы упругого рассеяния электронов на кристалле

Применим стохастическую формулу (2.2) для получения объемной диаграммы рассеяния электронов с характерными размерами порядка $\sim 2,8 \cdot 10^{-13}$ см (радиус Лоренца) на поверхности монокристалла с расстоянием между слоями атомов $l_1 = 10^{-11}$ см и радиусом автокорреляции неровностей синусоидальной поверхности каждого атомного слоя $r_{\text{cor}} = 6 \cdot 10^{-9}$ см.

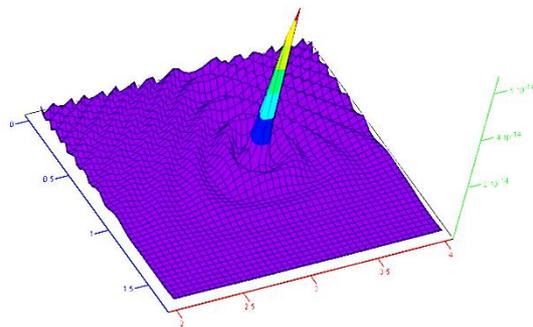
Пусть электроны падают на поверхность монокристалла с направления, задаваемого углом скольжения $\vartheta = 45^\circ$ и азимутальным углом $\gamma = 0^\circ$, при этом скорость электронов такова, что они могут проникать вглубь монокристалла до 64-го слоя (т.е. $n_1 = 64$).

Поставляя параметры $l_1 = 10^{-11}$ см, $r_{\text{cor}} = 6 \cdot 10^{-9}$ см, $\vartheta = 45^\circ$, $\gamma = 0^\circ$, $n_1 = 64$ в формулу (2.2), получим диаграмму рассеяния электронов, представленную рис. 2.3а.

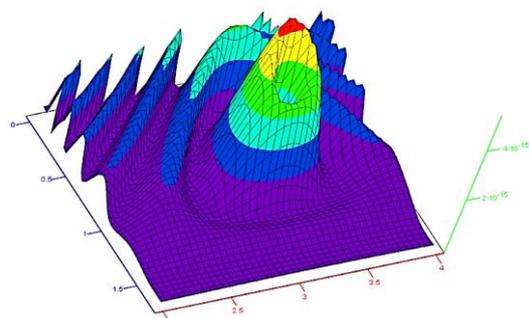
Незначительно изменяя параметры ϑ , γ , l_1 , n_1 и r_{cor} в формуле (2.2), получим остальные диаграммы рассеяния электронов на многослойной поверхности монокристалла, показанные на рис. 2.3.



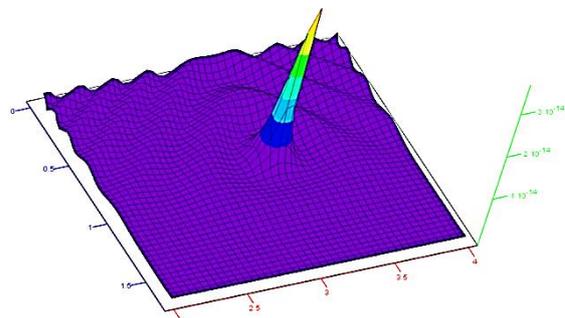
а) при: $\vartheta = 45^\circ$, $\gamma = 0^\circ$, $n_1 = 64$,
 $l_1 = 10^{-11}$ см, $r_{\text{cor}} = 6 \cdot 10^{-9}$ см



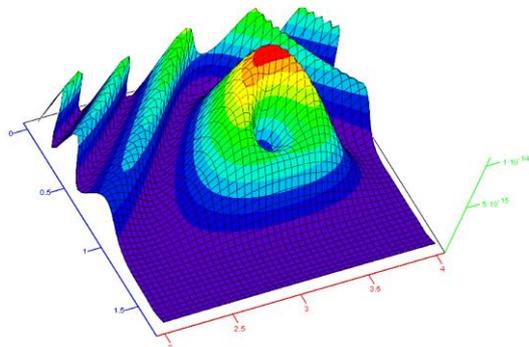
б) при: $\vartheta = 45^\circ$, $\gamma = 0^\circ$, $n_1 = 65$,
 $l_1 = 10^{-11}$ см, $r_{\text{cor}} = 6 \cdot 10^{-9}$ см



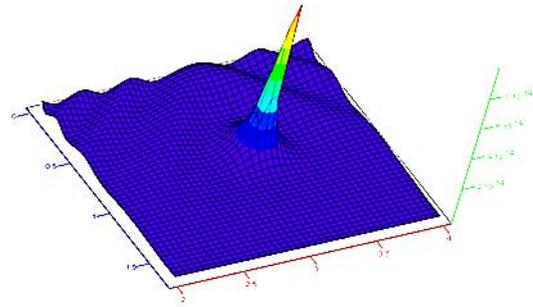
в) при: $\vartheta = 45^\circ$, $\gamma = 0^\circ$, $n_1 = 126$,
 $l_1 = 10^{-11}$ см, $r_{\text{cor}} = 6 \cdot 10^{-9}$ см



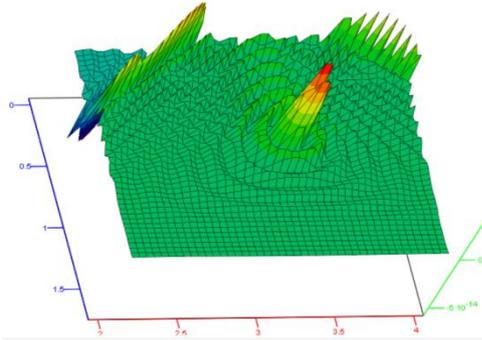
з) при: $\vartheta = 45^\circ$, $\gamma = 0^\circ$, $n_1 = 127$,
 $l_1 = 10^{-11}$ см, $r_{\text{cor}} = 6 \cdot 10^{-9}$ см



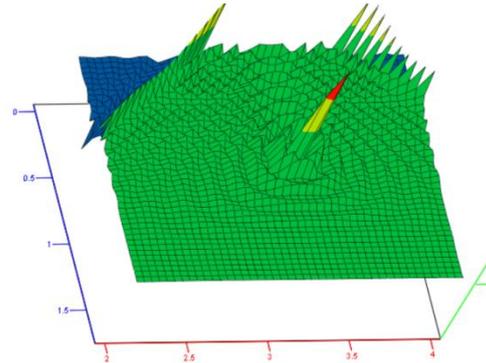
д) при: $\vartheta = 45^\circ$, $\gamma = 0^\circ$, $n_1 = 46$,
 $l_1 = 10^{-11}$ см, $r_{\text{cor}} = 1,4 \cdot 10^{-9}$ см



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



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



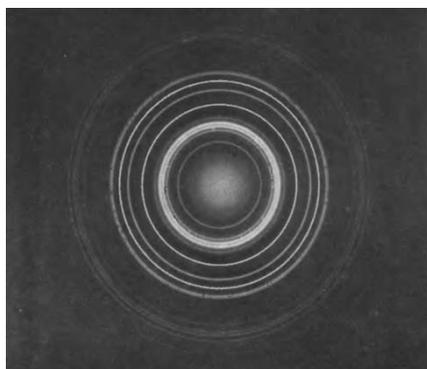
з) при: $\vartheta = 45^\circ$, $\gamma = 0^\circ$, $n_1 = 23$,
 $l_1 = 10^{-11}$ см, $r_{\text{cor}} = 4 \cdot 10^{-9}$ см

Рис. 2.3 Объемные диаграммы упругого рассеяния электронов на многослойной поверхности монокристалла, рассчитанные по формуле (2.2) при различных значениях параметров ϑ , l_1 , n_1 и r_{cor}

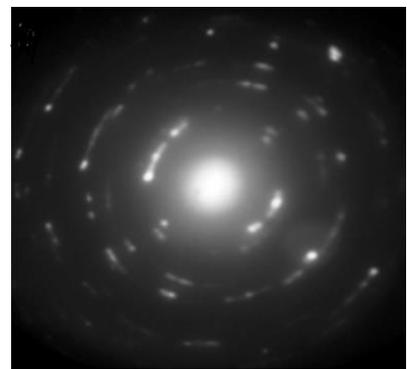
Результаты вычислений по формуле (2.2) при параметрах, соответствующих рассеянию электронов на многослойной поверхности монокристалла, превзошел ожидания. Среди множества хаотических ландшафтов мира Басса – Фукса внезапно проявились регулярные концентрические диаграммы, которые соответствуют экспериментально полученным электронограммам (рис. 2.4).



а)



б)



в)

Рис. 2.4 а) Электронограмма эталона NaCl; б) Электронограмма поликристалла гексагонального гидрида никеля NiH₂ (URL <http://ignorik.ru/docs/lekciya-13-eksperimentalenie-metodi-kristalofiziki.html>); в) Дифракция

электронов на поверхности алюминия Al (URL https://www.Electron_Diffraction. Данные электронограммы взяты из источников, находящихся в свободном доступе в Интернете.

Концентрические диаграммы рассеяния, показанные на рис. 2.3, получены на основании законов геометрической оптики и теории вероятностей, т.е. без привлечения идеи о возможном существовании волн де Бройля.

Для того чтобы убедиться, что предлагаемая стохастическая интерпретация процесса рассеяния микрочастиц (в частности электронов) на поверхности кристалла верна, сравним вычисления по формуле (2.2) с результатами эксперимента К. Дэвиссона и Л. Джермера (1927 г.) по дифракции электронов на кристалле никеля [1].

2.3 Стохастическая интерпретация эксперимента К. Дэвиссона и Л. Джермера

Следует ожидать, что число атомных слоев поверхности кристалла n_1 , на которые проникают падающие на нее микрочастицы (в частности электроны), в основном зависит от их скорости (точнее импульса $p = mv$). В более общем случае данная зависимость может иметь вид

$$n_1 = f(p = mv, l_1, r_{\text{cor}}, \vartheta, \gamma), \quad (2.4)$$

В выражении (2.4) могут быть так же учтены эффекты затенения части углубленных участков отражающей поверхности при малых углах скольжения ϑ и т.д.

Установление функциональной зависимости (2.4) позволит более точно согласовывать результаты вычислений по формуле (2.2) с экспериментальными данными по дифракции микрочастиц на периодических структурах типа кристаллов и получить дополнительную информацию о строении отражающей поверхности.

Рассмотрим ДУРМ (2.2) как функцию от числа слоев n_1 отражающей поверхности кристалла $D(n_1)$ при шести фиксированных параметрах $\vartheta, \gamma, v, \omega, l_1, r_{\text{cor}}$.

$$D(n_1) = \frac{1}{2\pi^2 l_2} \left(\frac{\cos^2(\pi n_1) - \cos(\pi n_1) \cos\left(\sqrt{\frac{a^2 + b^2}{d^2}} l_2 / \eta\right)}{\left(\pi n_1 / l_2\right)^2 - \left(\sqrt{\frac{a^2 + b^2}{d^2}} l_2 / \eta\right)^2} - \frac{\cos\left(\pi n_1 + \sqrt{\frac{a^2 + b^2}{d^2}} l_2 / \eta\right) - 1}{\left(\pi n_1 / l_2 + \sqrt{\frac{a^2 + b^2}{d^2}} / \eta\right)^2} \right) \times \left| \frac{d(a'_v b'_\omega - a'_\omega b'_v) + c'_v (ba'_\omega - ab'_\omega)}{d^2 \sqrt{a^2 + b^2}} \right|, \quad (2.5)$$

где

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

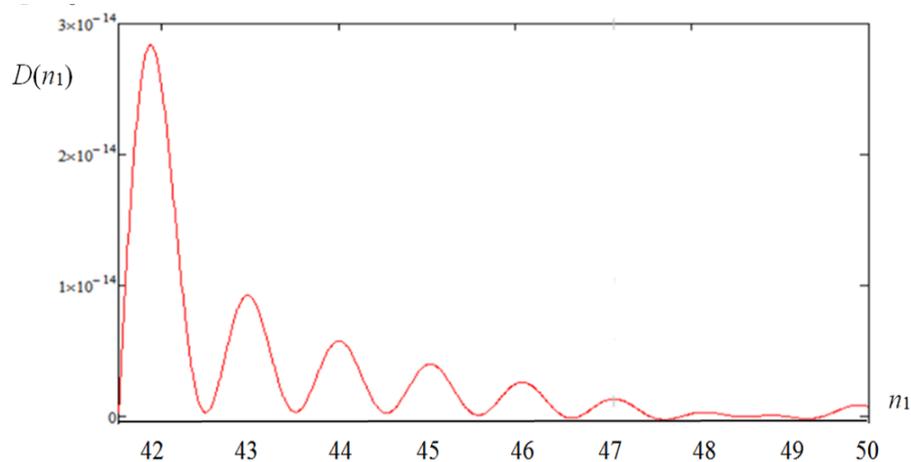
Результаты расчетов по формуле (2.5) как функции от n_1 показаны на рис. 2.5а.

С учетом того, что число слоев кристалла, на которые проникают падающие микрочастицы (в частности, электроны), 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. 2.5б).

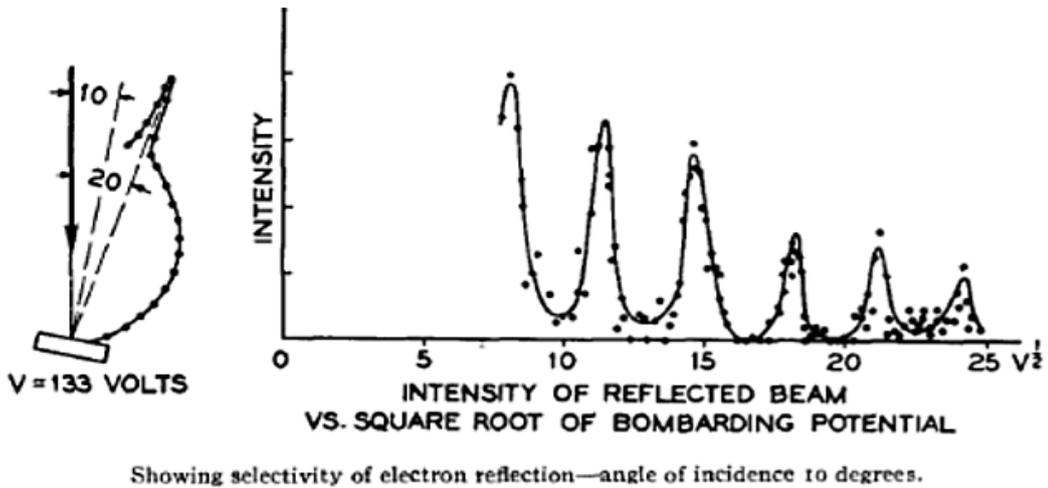
Формула (2.5) позволяет выполнить расчеты в значительно более широком диапазоне значений n_1 , как показано в пункте 4 §3.2 в [3].

Таким образом, формула (2.2), полученная в [3] на базе стохастической модели рассеяния микрочастиц на статистически неровной многослойной поверхности кристалла, адекватно отражает известные экспериментальные данные.

Вместе с тем, стохастическая формула (2.2) имеет ощутимые преимущества над условием Вульфа-Брэгга (1.3), основанном на идее существования волн материи де Бройля. Подборкой параметров \mathcal{G} , l_1 , n_1 и r_{cor} в формуле (2.2) можно добиться сходства с экспериментально полученными электроннограммами или рентгенограммами, при этом раскрывается более детальная информация о строении кристалла.



а)



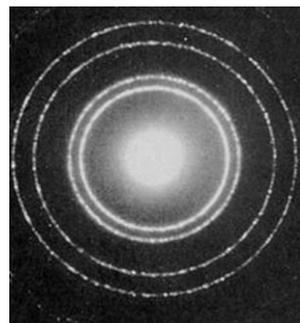
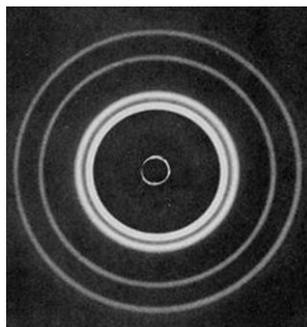
б)

Рис. 2.5 а) Результат расчета зависимости ДУРМ $D(n_1)$ от числа слоев n_1 отражающей поверхности кристалла, которые, в свою очередь, зависят от скорости v (точнее, от энергии E) микрочастиц, падающих на эту поверхность. Расчеты выполнены по формуле (2.5), 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, $r_{\text{cot}} = 9 \cdot 10^{-9}$ см; **б)** Интенсивность пучка электронов I , рассеянных 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 Дэйвиссоном и Лестером Джермером [1] и послужила одной из причин принятия гипотезы Луи де Бройля о волновых свойствах материи

2.4 Четное и нечетное число слоев кристалла

Из диаграмм, показанных на рис. 2.3, видно, что если в отражении микрочастиц эффективно участвует четное количество слоев n_1 , то в самом центре концентрической 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. 2.6), что еще раз подтверждает адекватность предложенной стохастической модели рассеяния микрочастиц на многослойной поверхности кристалла.

Совокупность вышеуказанных совпадений результатов расчетов по формуле (2.2) с экспериментальными данными (рис. 2.3 – 2.6) позволяет предложить стохастическую интерпретацию дифракционных явлений, как альтернативу гипотезе Л. де Бройля о существовании волновых свойств материи.



а)

б)

Рис. 2.6 а) В ряде экспериментов по дифракции микрочастиц на кристаллах в центре электронограммы или рентгенограммы наблюдается темное пятно. б) В ряде других подобных экспериментах 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. 2.10).

2.5 Настройка масштабного параметра η

Масштабный параметр (2.3)

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

получен в [3, 14] при переходе от ФПРВ высот неровностей случайного процесса к ФПРВ его производной при учете изменения только второго центрального момента (т.е. дисперсии). Более высокие центральные моменты были оставлены без внимания (смотрите выражения (16) – (65) в [14]), т.к. их влияние во многих случаях незначительно.

Чтобы компенсировать данный недостаток, а также учесть другие особенности кристаллической решетки масштабный параметр η 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_{cor} :

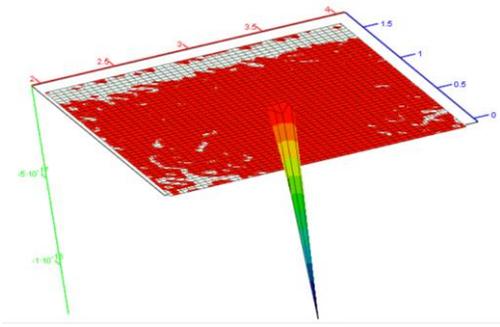
$$\eta = \frac{l_1^2 (\pi^2 n_1^2 - 3)}{12\pi^2 r_{cor}} \quad \text{или} \quad \eta = \frac{l_1^2 (\pi^2 n_1^2 - 127)}{16\pi^2 r_{cor}} \quad \text{или} \quad \eta = \frac{l_1^2 (4\pi^2 n_1^2 - 33)}{12\pi^2 r_{cor}} \quad \text{и т.п.} \quad (2.6)$$

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

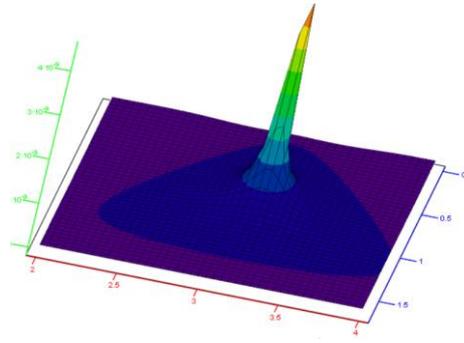
Возможно такая «подстройка» η приведет к большему сходству результатов вычислений по формуле (2.2) с реальными электронограммами или рентгенограммами. Вместе с тем, «подстройка» масштабного параметра может позволить оценить дополнительные особенности структуры и/или дефектов кристаллической решетки.

2.6 Рассеяние микрочастиц на одном слое кристалла

При рассеянии микрочастиц на одном слое кристалла (т.е. при $n_1 = 1$) расчет по формуле (2.2) приводит к результатам, показанным на рис. 2.7 а,б.



а) при $n_1 = 1$, $\vartheta = 45^\circ$, $\gamma = 0^\circ$,
 $l_1 = 10^{-11}$ см, $r_{\text{cor}} = 6 \cdot 10^{-9}$ см

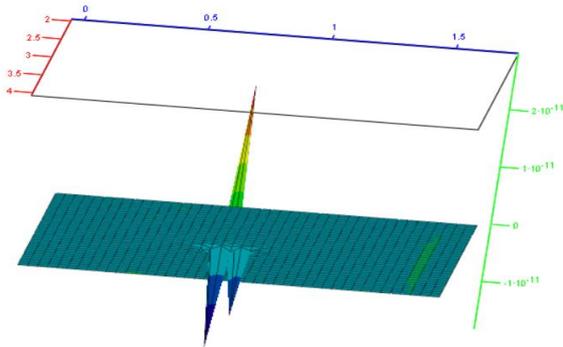


б) при $n_1 = 1$, $\vartheta = 45^\circ$, $\gamma = 0^\circ$,
 $l_1 = 10^{-8}$ см, $r_{\text{cor}} = 6 \cdot 10^{-9}$ см

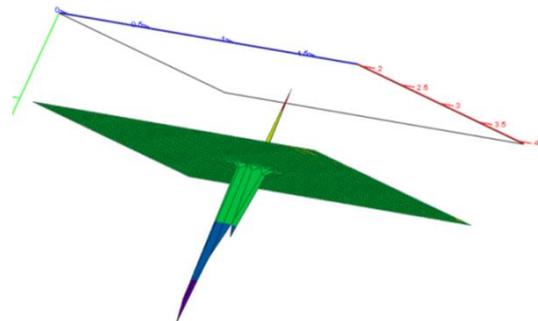
Рис. 2.7 Диаграммы упругого рассеяния микрочастиц на одном слое кристалла ($n_1 = 1$), рассчитанные по формуле (2.2) при различных l_1

Если толщина одного атомного слоя $l_1 = 10^{-11}$ см, то результат расчета по формуле (2.2) получается отрицательным (рис. 2.7 а). Это можно объяснить тем, что микрочастицы не отражаются от данного слоя, а проходят сквозь него. Если этот слой толще, например, $l_1 = 10^{-8}$ см, то отражение от такого слоя показано на рис. 2.7 б. При этом концентрических диаграмм не образуется.

Интересный результат расчета по формуле (2.2) наблюдается при $n_1 = 1$ и $l_1 = 4 \cdot 10^{-10}$ см (рис. 2.8). Это случай можно интерпретировать как предсказание того, что часть микрочастиц отразится от одного слоя кристалла, а другая часть микрочастиц пройдет сквозь него.



а) при $n_1 = 1$, $\vartheta = 45^\circ$, $\gamma = 0^\circ$,
 $l_1 = 4 \cdot 10^{-10}$ см, $r_{\text{cor}} = 6 \cdot 10^{-9}$ см

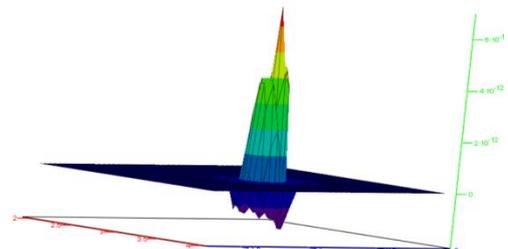
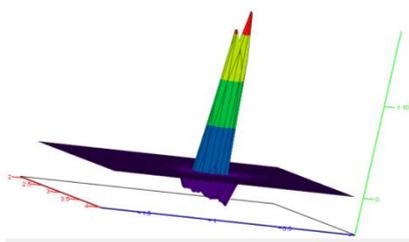


б) при $n_1 = 1$, $\vartheta = 45^\circ$, $\gamma = 0^\circ$,
 $l_1 = 3,4 \cdot 10^{-10}$ см, $r_{\text{cor}} = 6 \cdot 10^{-9}$ см

Рис. 2.8 Диаграмма упругого рассеяния микрочастиц на одном слое кристалла, рассчитанная по формуле (2.2) при $n_1 = 1$, а) $l_1 = 4 \cdot 10^{-10}$ см и б) $l_1 = 3,4 \cdot 10^{-10}$ см

2.7 Рассеяние микрочастиц на двух, трех и четырех слоях кристалла

Диаграммы упругого рассеяния микрочастиц на двух, трех и четырех слоях кристалла, рассчитанные по формуле (2.2), показаны на рис. 2.9 и 2.10.



а) при $n_1 = 2$, $\vartheta = 45^\circ$, $\gamma = 0^\circ$,
 $l_1 = 3 \cdot 10^{-10}$ см, $r_{\text{cor}} = 6 \cdot 10^{-9}$ см

б) при $n_1 = 3$, $\vartheta = 45^\circ$, $\gamma = 0^\circ$,
 $l_1 = 1,1 \cdot 10^{-10}$ см, $r_{\text{cor}} = 6 \cdot 10^{-9}$ см

Рис. 2.9 ДУРМ на двух (а) и трех (б) слоях кристалла, рассчитанные по формуле (2.2)

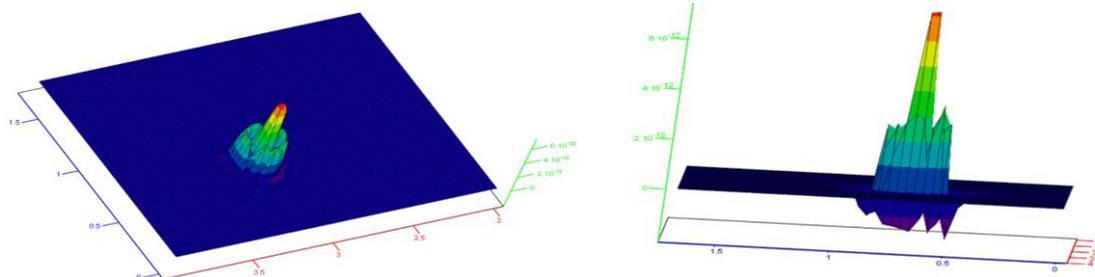
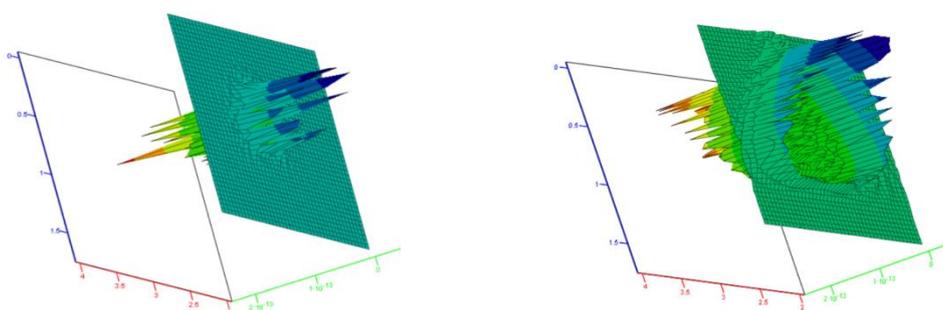


Рис. 2.10 Два ракурса ДУРМ на четырех слоях кристалла, рассчитанные по формуле (2.2) при $n_1 = 4$, $\vartheta = 45^\circ$, $\gamma = 0^\circ$, $l_1 = 1,2 \cdot 10^{-10}$ см, $r_{\text{cor}} = 9 \cdot 10^{-9}$ см

2.8 Дифракция микрочастиц на тонких пленках

Методика расчета ДУРМ, представленная в [3], 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 (2.2) позволяет рассчитать диаграмму рассеяния и при прохождении микрочастиц сквозь тонкие пленки. На рис. 2.11 приведены результаты расчетов по формуле (2.2) диаграмм рассеяния микрочастиц на пленках, состоящих из 14 и 15 атомных слоев.



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

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

Рис. 2.11 Дифракционные максимумы микрочастиц, проходящих сквозь тонкие пленки, рассчитанные по формуле (2.2)

Необходимо отметить, что данные дифракционные максимумы получаются при падении микрочастиц на тонкие пленки под углами скольжения ϑ от 25° до 65° . 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 $\vartheta = 90^\circ$) расчеты по формуле (2.2) приводят к абсурдным результатам. То есть метод расчета ДУРМ, предложенный в статье [3], к данному случаю не применим.

2.9 Пятый параметр γ

Как было показано выше, подбором четырех параметров ϑ , l_1 , n_1 , r_{cor} можно добиться, чтобы расчеты по формуле (2.2) соответствовали различным вариантам дифракции микро-частиц на многослойной статистически неровной поверхности кристалла.

Пятый параметр – угол γ (рис. 1.2), во всех ранее рассмотренных случаях оставался равным нулю ($\gamma = 0^\circ$).

При выводе формулы (2.2) в [3] учитывалось, что все азимутальные поперечные сечения в разных направлениях однородной и изотропной неровной поверхности кристалла одинаковые. Поэтому ожидалось, что при изменении азимутального угла γ диаграмма рассеяния должна оставаться неизменной, а изменяться должно только ее азимутальное направление.

Из диаграмм, показанных на рис. 2.12, видно, что при небольших углах γ равных 35° и 55° смещается только азимутальное направление всей диаграммы в целом.

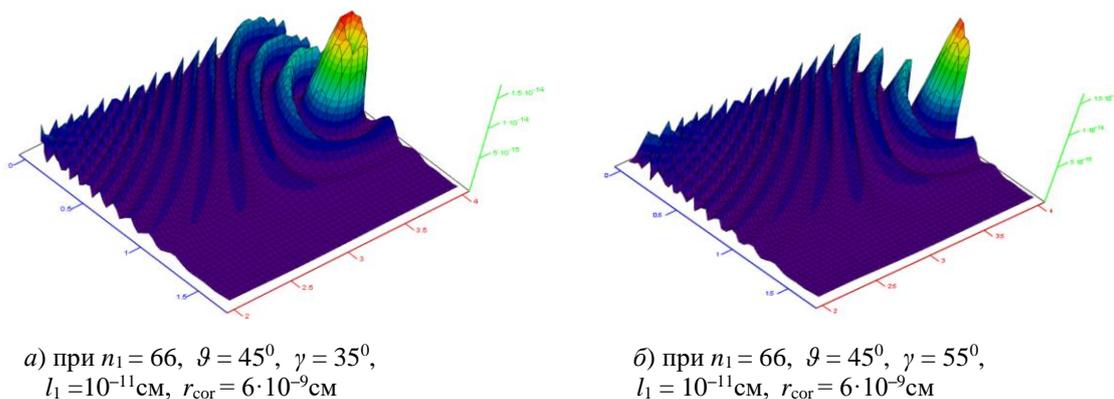


Рис. 2.12 ДУРМ на кристалле, рассчитанные по формуле (2.2), при одинаковых ϑ , n_1 , l_1 , r_{cor} и различных углах γ

Но при дальнейшем увеличении угла γ диаграмма рассеяния значительно изменяется при неизменных остальных четырех параметрах ϑ , l_1 , n_1 , r_{cor} (рис. 2.13).

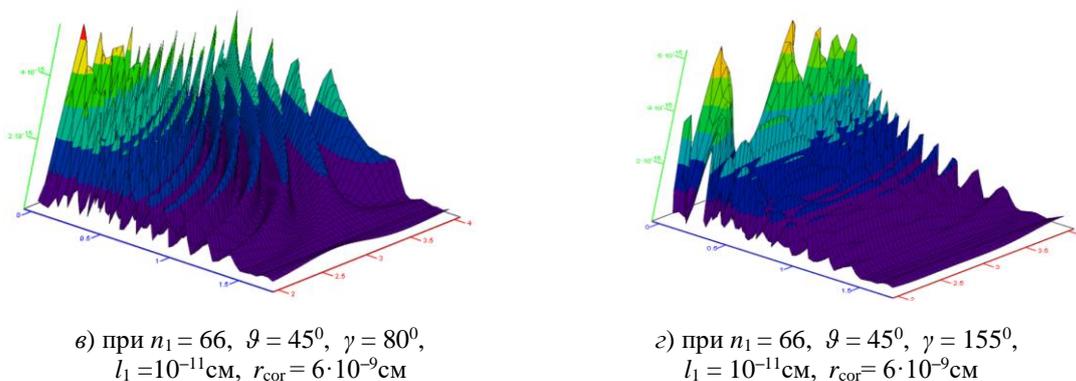


Рис. 2.13 ДУРМ на кристалле, рассчитанные по формуле (2.2), при одинаковых ϑ , n_1 , l_1 , r_{cor} и различных углах γ

На данном этапе исследования сложно установить является ли это изменение недостатком формулы (2.2), или это отражение реальности, которое может быть подтверждено экспериментально.

Можно предположить, что ДУРМ зависит от угла α между проекцией азимутального направления движения падающих микрочастиц на плоскость XOY и направлением рядов атомов в кристаллической решетке (рис. 2.14).

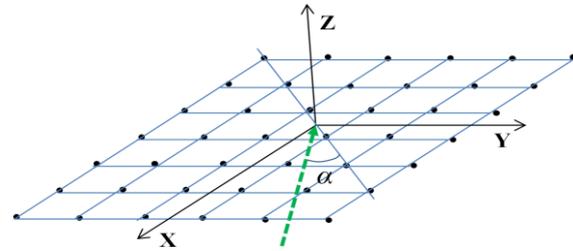
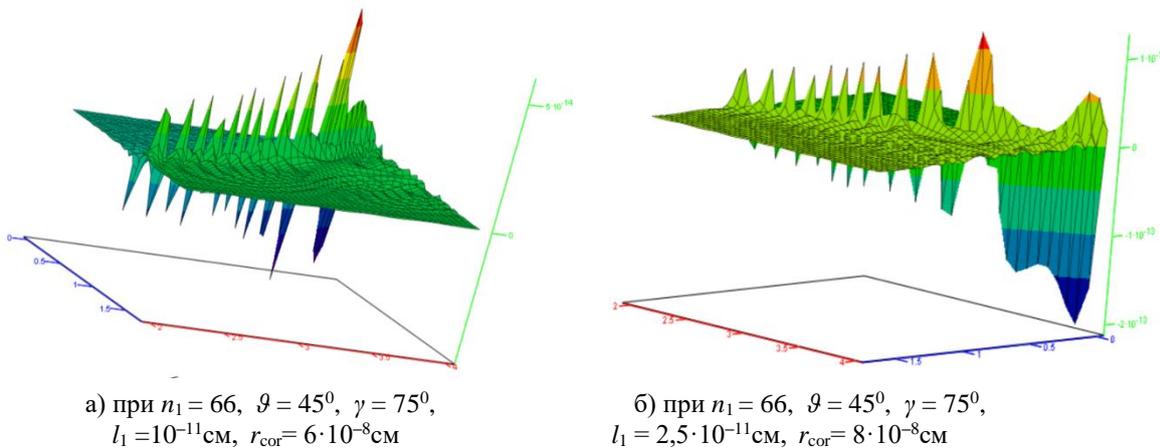


Рис. 2.14 Угол α между проекцией азимутального направления движения падающих микрочастиц на плоскость XOY и направлением рядов атомов в кристаллической решетке

Из рис. 2.14 видно, что поворот плоскости падения микрочастиц на угол α сопровождается эффектом увеличения расстояния между атомами кристаллической решетки, эффективно участвующими в их рассеянии. Этот эффект можно учесть путем увеличения радиуса автокорреляции высот неровностей поверхности r_{cor} . Диаграммы рассеяния при $\gamma = 75^0$ и увеличенных по сравнению с предыдущим случаем r_{cor} и l_1 , показаны на рис. 2.15.



а) при $n_1 = 66$, $\vartheta = 45^0$, $\gamma = 75^0$,
 $l_1 = 10^{-11}$ см, $r_{cor} = 6 \cdot 10^{-8}$ см

б) при $n_1 = 66$, $\vartheta = 45^0$, $\gamma = 75^0$,
 $l_1 = 2,5 \cdot 10^{-11}$ см, $r_{cor} = 8 \cdot 10^{-8}$ см

Рис. 2.15 ДУРМ, рассчитанные по формуле (2.2), при $\gamma = 75^0$ и увеличенных r_{cor} и l_1

Данные результаты расчетов по формуле (2.2) подлежат экспериментальной проверке. Если искажения ДУРМ из-за изменения угла γ не подтвердятся экспериментально, то этот недостаток можно компенсировать изменением ориентации системы отсчета. Во многих случаях ось координат, от которой отсчитывается угол γ 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 $\gamma = 0^0$.

2.10. Рассеяние микрочастиц на поверхности кристалла с анизотропными слоями

Если каждый слой кристалла имеет одинаковую анизотропию, например, типа (2.23) в [3], то в этом случае в [3] получилась следующая формула для расчета объемных ДУРМ на анизотропной поверхности кристалла

$$D(v, \omega / \vartheta, \gamma) = \frac{2}{\pi^2 l_2} \left(\frac{b^2}{a^2 + b^2} \right) \left[\frac{\cos^2(\pi n_1) - \cos(\pi n_1) \cos\left(\sqrt{\frac{a^2 + b^2}{d^2}} l_2 / \eta\right)}{\left(\pi n_1 / l_2\right)^2 - \left(\sqrt{\frac{a^2 + b^2}{d^2}} l_2 / \eta\right)^2} - \frac{\cos\left(\pi n_1 + \sqrt{\frac{a^2 + b^2}{d^2}} l_2 / \eta\right) - 1}{\left(\pi n_1 / l_2 + \sqrt{\frac{a^2 + b^2}{d^2}} / \eta\right)^2} \right] \times \left| \frac{d(a'_v b'_\omega - a'_\omega b'_v) + c'_v (b a'_\omega - a b'_\omega)}{d^2 \sqrt{a^2 + b^2}} \right|. \quad (2.7)$$

где масштабный параметр η задается выражением (2.3).

Результаты расчетов по формуле (2.7) показаны на рис. 2.16.

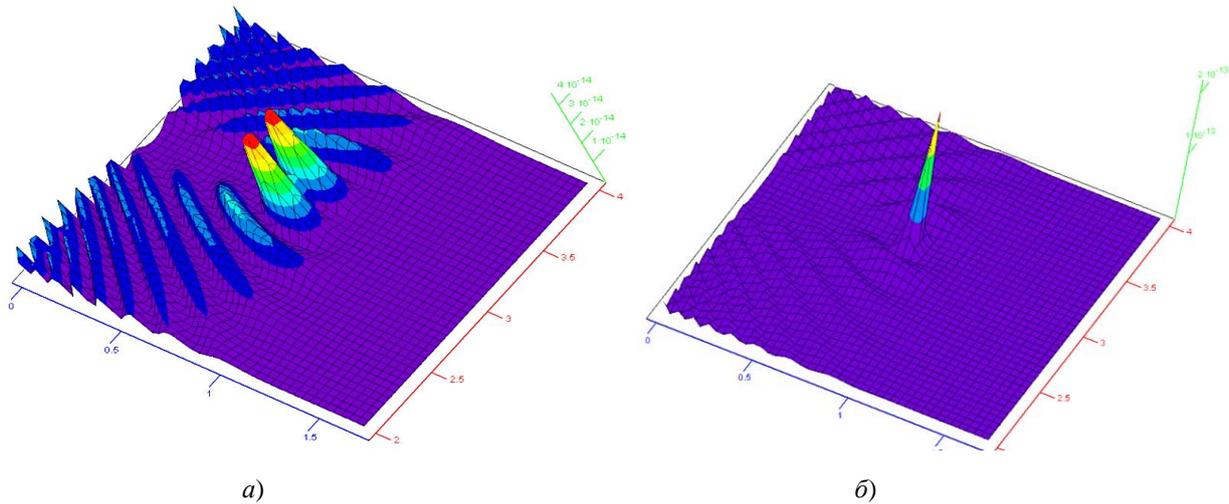


Рис.2.16 Объемные ДУРМ на многослойной неанізотропной поверхности кристалла, рассчитанные по формуле (2.7) при $\vartheta = 45^\circ$, $\gamma = 0^\circ$, а) $n_1 = 48$ и б) $n_1 = 47$, $l_1 = 10^{-11}$ см, $r_{\text{cor}} = 4 \cdot 10^{-9}$ см

Если каждый слой кристалла имеет одинаковую анизотропию типа (2.23а) в [3], то для этого случая аналогично получается следующая формула для расчета объемных ДУРМ

$$D(v, \omega / \vartheta, \gamma) = \frac{4}{\pi^2 l_2} \left(\frac{a^2 b^2}{(a^2 + b^2)^2} \right) \left[\frac{\cos^2(\pi n_1) - \cos(\pi n_1) \cos\left(\sqrt{\frac{a^2 + b^2}{d^2}} l_2 / \eta\right)}{\left(\pi n_1 / l_2\right)^2 - \left(\sqrt{\frac{a^2 + b^2}{d^2}} l_2 / \eta\right)^2} - \frac{\cos\left(\pi n_1 + \sqrt{\frac{a^2 + b^2}{d^2}} l_2 / \eta\right) - 1}{\left(\pi n_1 / l_2 + \sqrt{\frac{a^2 + b^2}{d^2}} / \eta\right)^2} \right] \times \left| \frac{d(a'_v b'_\omega - a'_\omega b'_v) + c'_v (b a'_\omega - a b'_\omega)}{d^2 \sqrt{a^2 + b^2}} \right|. \quad (2.8)$$

где масштабный параметр η задается выражением (2.3).

Результаты расчетов по формуле (2.8) показаны на рис. 2.17.

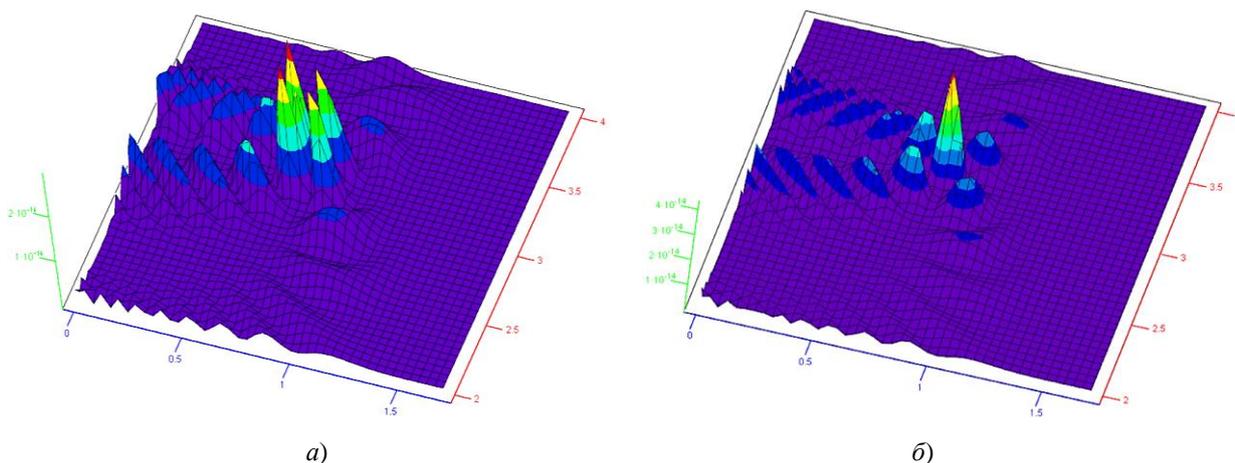


Рис.2.17 Объемные ДУРМ на многослойной изотропной поверхности кристалла, рассчитанные по формуле (2.8) при $\vartheta = 45^\circ$, $\gamma = 0^\circ$, а) $n_1 = 42$ и б) $n_1 = 37$, $l_1 = 10^{-11}$ см, $r_{\text{cor}} = 4 \cdot 10^{-9}$ см

Дискуссия

Исследованию дифракции элементарных частиц (в частности электронов и нейтронов) и электромагнитных волн (в частности, гамма-лучей) на кристаллах различных веществ посвящена обширная литература.

В основном, объяснение и описание данного явления основано на том, что кристалл представляется в виде 3-мерной узловой периодической структуры (3-мерной атомной решетки), от которой отражаются волны. В случае лазерных или гамма лучей – это электромагнитные волны с соответствующей длиной волны, а в случае элементарных частиц – это волны де Бройля с длиной волны (2). В рамках этого метода условие возникновения интерференции отраженных волн от атомных плоскостей определяется законом Вульфа-Брегга (3), поэтому явления рассеяния волн на кристалле называют Брегговской дифракцией.

Начиная с оригинальных работ [Bragg, W.L., 1914] и [Davisson, C.J. & Germer, L.H., 1928], данный подход применяется в большинстве современных статей, например, [Bartell, L.S. & Carroll, B.L., 1965], [Baudin, T.; Chastel, Y.; Penelle, R., 1998], [Bendersky, L.A. & Gayle, F.W., 2001], [Bennett, H.E. & Porteus, J.O., 1961], [Blazhevich, S.V.; Kos'kova, T.V.; Noskov, A.V., 2015], [Bond, A.D., 2016], [Ching-Chuan, S. 2002], [Eisberg, R. & Resnick, R., 1986], [Gehrenbeck, K.R., 1978], [Kuznetsov, V.L.; Kuznetsova, E.V.; Litvin, V.S., 2015], [McMahon, M. (2013)], [Mikula, P.; Vrana, M.; Saroun, J.; Em, V., 2017], [O'Donnell, K.A. & Mendez, E.R., 1987], [Ogilvy, J.A. & Merklinger, H.M., 1991]. [Oleynikov, P & Hovmüller, S, & Zou, X. D., 2007], [Pendry, J.B., 1980], [Prokes, K. & Mezei, F. & Gukasov, A., 2019], [Shi, D & Nannenga, B. L. & Iadanza, M. G. & Gonen, T., 2013], [Shintake, T. (2021)]. [Shorokhova, E. A. & Kashin, A.V., 2005], [Suzuki, M. & Suzuki, I.S., 2013], [Vainshte, B.K., 1964], [Winkelmann, A. & Vos, M. 2011].

Вместе с тем имеются работы, где описание экспериментов по дифракции фотонов и электронов на кристалле описывается в терминах амплитуд вероятностей и пространственно-временной формулировки квантовой механики Фейнмана. Такой подход предложен, например, в статье [Field, J.H., 2013]. Также имеются другие методы объяснения Брегговской дифракции, например, в статье [Logiurato, F.; Gratton, L.; Oss, S., 2020], предложена геометрическая модель для объяснения картины дифракции волн на двумерной решетке.

Предложенный в [Batanov-Gaukhman, 2020a] и в данной статье стохастический подход к исследованию рассеяния микрочастиц на статистически неровных слоях кристалла, полностью отличаются от всех известных автору методов решения данной задачи. По мнению автора, данный подход позволяет объяснить причину исследуемого явления на основании принципов классической теории вероятности и статистической физики, т.е. без привлечения гипотезы де Бройля о возможном существовании волн материи. Также этот метод позволяет рассчитать объемные концентрические диаграммы рассеяния микрочастиц на кристалле, которые хорошо согласуются с экспериментальными данными. Тогда как, ни один другой метод объяснения Брегговской дифракции, из известных автору, не позволяет вычислить такие диаграммы.

3 ЗАКЛЮЧЕНИЕ И ВЫВОДЫ

Формулы (2.2), (2.7) и (2.8), полученные автором в статье [3, [arXiv:2007.13527](https://arxiv.org/abs/2007.13527)] и проанализированные в данной статье, открывают широкие возможности для исследования свойств многослойных поверхностей кристаллов, посредством анализа результатов рассеяния на них микрочастиц.

Подбором пяти параметров:

$$\theta, \quad l_1, \quad n_1, \quad r_{\text{cor}}, \quad \gamma$$

которые связаны с различными свойствами атомной или молекулярной структуры кристалла, можно добиться сходства диаграммы рассеяния, рассчитанной по формуле (2.2) {или (2.7) и (2.8)} с электронограммой или рентгенограммой, и тем самым получить информацию о строении данного тела.

Расчеты по формуле (2.2) хорошо согласуются с результатами экспериментов по дифракции электронов и других микрочастиц на кристаллах, тонких пленках и экспериментов К. Дэвиссона и Л. Джермера (рис. 2.3 – 2.6). Это позволяет предложить стохастическую интерпретацию данных дифракционных явлений, изложенную в статье автора [3] и в этой статье. Стохастическое объяснение этих экспериментов может послужить альтернативой гипотезе Л. де Бройля о существовании волновых свойств материи.

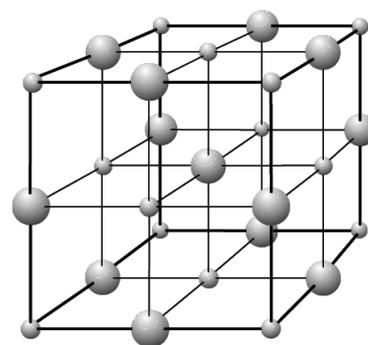
В целом, формулы (2.2), (2.7) и (2.8) с пятью параметрами ϑ , l_1 , n_1 , r_{cor} и γ порождает бесконечное множество двумерных поверхностей (миры Басса-Фукса), в котором могут существовать отдельные формы, отражающие очертания или суть процессов в окружающей реальности.

Вместе с тем, все эти двумерные поверхности обладают общим свойством. Поскольку формулы (2.2), (2.7) и (2.8) являются функциями плотности распределения вероятности $D(\nu, \omega / \vartheta, \gamma) = \rho(\nu, \omega / \vartheta, \gamma) |G_{\nu\omega}|$, то двойной интеграл от всех этих функций по углам ν и ω от 0 до 2π равен единице

$$\int_0^{2\pi} \int_0^{2\pi} \rho(\nu, \omega / \vartheta, \gamma) |G_{\nu\omega}| d\nu d\omega = 1.$$

Формулы (2.2), (2.7) и (2.8) подходят для описания дифракции не только элементарных частиц, атомов и фотонов, но и для рассеяния макроскопических упругих тел (типа футбольный мяч) 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.



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 (2.2). Действительно, если вместо $l_1 = 10^{-11}$ см, $r_{\text{cor}} = 6 \cdot 10^{-9}$ см и $n_1 = 66$ в масштабный параметр η (2.3) подставить $l_1 = 50$ см, $r_{\text{cor}} = 3400$ см и $n_1 = 18$, то диаграмма упругого рассеяния футбольных мячей на такой кубической решетке, рассчитанная по формуле (2.2), будет примерно такой же, как показана на рис. 2.3а.

Если случай дифракции футбольных мячей подтвердится экспериментально, то мы сможем утверждать, что формула (2.2) оказалась универсальной в отношении различных масштабов исследуемых событий, а дифракционные явления микромира неотличимы от явлений макромира (при аналогичных условиях).

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

Помимо решения 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 вероят-

ностные методы статистической физики позволили, по мнению автора, объяснить дифракцию элементарных частиц и атомов на кристаллах без привлечения данной гипотезы Луи де Бройля. 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.

4 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, к.пс.н. Т.С. Леви.

5 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] M. Batanov-Gaukhman, The Diffraction of Microparticles on Single-layer and Multi-layer Statistically Uneven Surfaces. URL [arXiv:2007.13527](https://arxiv.org/abs/2007.13527) [v1] Tue, 7 Jul 2020
- [4] F. G. Bass, I. M. Fuks, Wave Scattering from Statistically Rough Surfaces, Pergamon Press, Oxford (1979).
- [5] K. R. Gehrenbeck, "Electron diffraction: fifty years ago". Physics Today. 31 (1):34–41(1978). doi:10.1063/1.3001830.
- [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] B. K. Vainshtein, Structure Analysis by Electron Diffraction, Pergamon Press, Oxford (1964), p. 430, ISBN: 9781483164755.
- [9] L. S. Bartell, B. L. Carroll, Electron-Diffraction Study of the Structure of B(CH₃)₃ J. Chem. Phys. vol. **42**, 3076 (1965); <https://doi.org/10.1063/1.1696383>.

- [10] 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.
- [11] 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>.
- [12] 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>
- [13] 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>
- [14] M. Batanov-Gaukhman, Derivation of the Generalized Time-independent Schrödinger Equation. The New Stochastic Quantum Mechanics: “Think and Calculate”, Avances en Ciencias e Ingeniería - ISSN: 0718-8706 Av. cien. ing.: vol. 11(4), 75-113 (October/December, 2020) Article 6, URL <https://www.executivebs.org/publishing.cl/avances-en-ciencias-e-ingenieria-vol-11-nro-4-ano-2020-articulo-6/>