

ФЛУКТУАЦИЯ ПОТЕРЬ ЭНЕРГИИ ПРИ СТОЛКНОВЕНИИ ЗАРЯЖЕННЫХ ЧАСТИЦ С ОСЦИЛЛЯТОРОМ

Д. Н. Макаров*

Северный (Арктический) федеральный университет им. М. В. Ломоносова
163002, Архангельск, Россия

Поступила в редакцию 16 апреля 2014 г.

Рассмотрены флуктуации потерь энергии быстрых заряженных частиц при столкновениях с осциллятором в дипольном приближении. В этом приближении задача решается точно и находятся флуктуации потерь энергии осциллятора из начального состояния $|m\rangle = |0\rangle$ в виде суммы одномерных интегралов. Показано, что в классическом предельном переходе можно получить формулы теории Бора для флуктуации, а при скоростях иона, много больших атомных, можно получить аналоги формулы Фано в теории возмущений и формулы Титейка в непертурбативном случае.

DOI: 10.7868/S0044451014100058

1. ВВЕДЕНИЕ

Теоретические исследования потерь энергии и флуктуаций потерь энергии при взаимодействии быстрых заряженных частиц с различного рода материалами проводятся во многих научных центрах. В случае изучения процессов потерь энергии применяемые в настоящее время теории развиваются вполне «синхронно» с экспериментальными исследованиями, при этом теоретические исследования флуктуаций потерь энергии быстрыми тяжелыми ионами на связанных атомных электронах в значительной степени отстают от экспериментальных потребностей [1], особенно в случае многозарядных тяжелых ионов. До сих пор лишь немного попыток было сделано, чтобы улучшить результат Бора [2, 3] для флуктуаций энергетических потерь (здесь и везде ниже используется атомная система единиц):

$$\Omega_B^2 = 4\pi Z^2 N_a, \quad (1)$$

где Z — заряд налетающей частицы, N_a — число электронов в атоме. Формула Бора основана на классической картине рассеяния электронов кулоновским потенциалом иона. Первым квантовомеханическим обобщением формулы Бора является основанная на теории возмущений формула Ливингсто-

на и Бете [4], более распространенную модификацию которой предложил Фано [5]:

$$\Omega_F^2 = 4\pi Z^2 N_a \left(1 + \frac{4}{3} \frac{K}{v^2} \ln \frac{2v^2}{I_F} \right), \quad (2)$$

где v — скорость налетающей частицы, K — средняя кинетическая энергия электрона в атоме, I_F — средний ионизационный потенциал Фано. Однако сильные поля высокозарядных ионов не позволяют использовать теорию возмущений. Выход за рамки теории возмущений на основе подхода Блоха и формулы Бете–Блоха [6] позволил Титейка [7] получить следующую формулу:

$$\Omega_T^2 = 4\pi Z^2 N_a \left[1 + \frac{4}{3} \frac{K}{v^2} (L^{Bethe} + \Delta L^{Bloch}) \right], \quad (3)$$

где величина $L^{Bethe} = \ln(2v^2/I)$ рассчитана Бете [8] в низшем порядке теории возмущений, I — средний потенциал ионизации мишени,

$$\Delta L^{Bloch} = -\operatorname{Re} \psi(1 + i\eta) + \psi(1)$$

— поправка Блоха [6], имеющая непертурбативный характер, $\psi(x)$ — логарифмическая производная Г-функции, $\eta = Z/v$ — кулоновский параметр. Скорость снаряда всегда должна быть много больше характерных скоростей электронов мишени. Поскольку средний ионизационный потенциал I , средний ионизационный потенциал Фано I_F и величина

*E-mail: makarovd0608@yandex.ru

(4/3) K численно близки друг к другу, формулу Тейка часто записывают в виде

$$\Omega_T^2 = 4\pi Z^2 N_a \times \left[1 + \frac{4K}{3v^2} \left(\ln \frac{2v^2}{I} + \psi(1) - \operatorname{Re} \psi(1 + i\eta) \right) \right]. \quad (4)$$

Следует сказать, что представленные подходы используют различные приближения, которые основаны на неточном непertурбативном рассмотрении, что приводит к некоторым ошибкам для флуктуаций [9, 10] и для потерь энергии [11, 12]. При вычислении потерь энергии активно используются подходы, в которых атом рассматривается как квантовый осциллятор с частотой ω и эта частота соответствует ионизационному потенциалу Бете I [13, 14], а значит $\omega \approx I \approx I_F \approx (4/3)K$. Рассматривая атом как осциллятор и используя теорию возмущений можно получить, хотя и не в аналитическом виде, поправки к теории Бете [13–15], в частности оболочечную поправку и поправку Баркаса для потерь энергии. Большим недостатком этих теорий является то, что поправки рассчитываются с применением теории возмущений, которой, конечно, нельзя пользоваться при $v \approx v_a$, где v_a — атомная скорость электрона, так как при этих скоростях параметр $Z/v \approx 1$ либо $Z/v \gg 1$ для тяжелых ионов. Поэтому область скоростей, где $v \sim v_a$, остается мало исследованной. Для ее изучения нужны непertурбативные методы, причем эйконал и приближение внезапных возмущений здесь не подойдет, так как в этих приближениях считается, что $v \gg v_a$ [16]. Исследование потерь энергии возможно только при использовании точных модельных методов, один из которых представлен в этой статье.

2. ПОСТАНОВКА РЕШАЕМОЙ ЗАДАЧИ. МЕТОД РЕШЕНИЯ

Изучим столкновение быстрой заряженной частицы с нейтральным атомом водорода, который рассмотрим как квантовый осциллятор. Скорость заряженной частицы больше или равна скорости атомных электронов. Тогда уравнение Шредингера в системе отсчета, связанной с атомом, запишем в виде

$$i \frac{\partial \Psi}{\partial t} = \left(-\frac{\Delta}{2} + \frac{\omega^2 r^2}{2} - \frac{Z}{|\mathbf{R} - \mathbf{r}|} + \frac{Z}{|\mathbf{R}|} \right) \Psi, \quad (5)$$

где

$$\Delta = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}, \quad r^2 = x^2 + y^2 + z^2,$$

x, y, z — координаты электрона, $\mathbf{R} = \mathbf{b} + \mathbf{v}t$, \mathbf{b} — параметр удара, t — время, \mathbf{v} — скорость налетающей частицы. Уравнение (5) точно решить нельзя, поэтому рассмотрим его в дипольном приближении, т. е. при $R \gg r$, тогда его можно представить как

$$i \frac{\partial \Psi}{\partial t} = \left(-\frac{\Delta}{2} + \frac{\omega^2 r^2}{2} - \frac{Z\mathbf{R} \cdot \mathbf{r}}{R^3} \right) \Psi. \quad (6)$$

Следует сказать, что мы пренебрегли оператором $-\Delta(\mathbf{R})/2$. Это действительно можно сделать, так как мы рассматриваем нейтральный атом и на больших расстояниях взаимодействие ядра с налетающей частицей незначительно, а на малых расстояниях время взаимодействия слишком мало, чтобы две массивные частицы отклонились на заметный угол. Уравнение вида (6) решено [17], покажем, что это уравнение можно решить в «представлении взаимодействия», применяя разложение Магнуса, которое легче использовать в дальнейших вычислениях. Представим решения уравнения (6) [18] в виде

$$\Psi(r, t) = \exp(-i\hat{H}_0 t) \hat{S} \Psi(r, t = -\infty). \quad (7)$$

Здесь

$$\hat{H}_0 = -\frac{\Delta}{2} + \frac{\omega^2 r^2}{2}$$

— гамильтониан до взаимодействия, \hat{S} — оператор эволюции, который равен [18]

$$\hat{S} = \exp(\hat{A}_1 + \hat{A}_2 + \dots), \quad (8)$$

где

$$\hat{A}_1 = -i \int_{-\infty}^t \hat{W}(t) dt, \quad (9)$$

$$\hat{A}_2 = \frac{1}{2} (-i)^2 \int_{-\infty}^t dt_1 \int_{-\infty}^{t_1} [\hat{W}(t_1), \hat{W}(t_2)] dt_2, \quad (10)$$

$$\hat{W}(t) = \exp(i\hat{H}_0 t) \left(-\frac{Z\mathbf{R} \cdot \mathbf{r}}{R^3} \right) \exp(-i\hat{H}_0 t). \quad (11)$$

Выражение (11) после преобразований можно представить в более простом виде

$$\hat{W}(t) = -\frac{Z}{R^3} \left(\mathbf{R} \cdot \mathbf{r} \cos(\omega t) - \frac{i}{\omega} \sin(\omega t) \mathbf{R} \cdot \nabla \right). \quad (12)$$

Далее рассмотрим коммутатор в выражении (10), который после преобразований записывается как

$$[\hat{W}(t_1), \hat{W}(t_2)] = \frac{i}{\omega} \left(\frac{Z}{R^2} \right)^2 \sin(\omega(t_2 - t_1)). \quad (13)$$

Очевидно, что все другие члены ($\hat{A}_3, \hat{A}_4, \dots$) в (8) будут равны нулю, а \hat{A}_2 даст фазу, от которой не будет зависеть вероятность перехода, тогда $\hat{S} = \exp(\hat{A}_1)$, а амплитуду перехода осциллятора из состояния $|m\rangle$ в состояние $|n\rangle$ можно представить в виде

$$a_{n,m} = \langle n | \times \exp \left(iZ \int_{-\infty}^{\infty} \frac{1}{R(t)^3} \left(\mathbf{R}(t) \cdot \mathbf{r} \cos(\omega t) - \frac{i}{\omega} \sin(\omega t) \mathbf{R}(t) \cdot \nabla \right) dt \right) | m \rangle. \quad (14)$$

Пока выражение (14) записано в общем виде и непригодно для расчетов, поэтому нужно его представить в удобном виде, для этого используя разложение Магнуса, а также соотношение

$$|m\rangle = \left(\frac{\omega}{\pi}\right)^{3/4} (2^{m_x} m_x!)^{-1/2} (2^{m_y} m_y!)^{-1/2} \times (2^{m_z} m_z!)^{-1/2} \exp\left(-\frac{\omega r^2}{2}\right) H_{m_x}(\omega^{1/2} x) \times H_{m_y}(\omega^{1/2} y) H_{m_z}(\omega^{1/2} z), \quad (15)$$

где m_x, m_y, m_z — квантовые числа соответственно для координат x, y, z , а $H_m(t)$ — полином Эрмита. Получим

$$\hat{S}|m\rangle = \exp(i\phi) \times \exp \left(iZ \int_{-\infty}^{\infty} \frac{1}{R(t)^3} \mathbf{R}(t) \cdot \mathbf{r} \cos(\omega t) \right) \times \exp(\mathbf{d}\nabla) |m\rangle = \exp(i\phi) \left(\frac{\omega}{\pi}\right)^{3/4} \times (2^{m_x} m_x!)^{-1/2} (2^{m_y} m_y!)^{-1/2} \times (2^{m_z} m_z!)^{-1/2} \exp\left(-\frac{\omega(\mathbf{r} + \mathbf{d})^2}{2}\right) \times H_{m_x}(\omega^{1/2}(x + d_x)) H_{m_y}(\omega^{1/2}(y + d_y)) \times H_{m_z}(\omega^{1/2}(z + d_z)), \quad (16)$$

где

$$\mathbf{d} = \frac{Z}{\omega} \int_{-\infty}^{\infty} 1/R(t)^3 \sin(\omega t) \mathbf{R}(t) dt,$$

d_x, d_y, d_z — проекции вектора \mathbf{d} на соответствующие оси, $\phi \neq \phi(x, y, z)$ — несущественная фаза. В итоге выражение (14) с точностью до фазы представим в виде

$$a_{n,m} = A_{n,m} \exp\left(\frac{1}{2\omega} Q_z^2\right) \times \int \exp(i\mathbf{Q} \cdot \mathbf{r}) H_{m_x}(\omega^{1/2} x) H_{m_y}(\omega^{1/2} y) \times H_{m_z}\left(\omega^{1/2}\left(z - \frac{iQ_z}{\omega}\right)\right) H_{n_x}(\omega^{1/2} x) \times H_{n_y}(\omega^{1/2} y) H_{n_z}(\omega^{1/2} z) \exp(-\omega r^2) d\mathbf{r}, \quad (17)$$

где

$$\mathbf{Q} = \frac{2Z\omega}{v^2} \left(K_1 \left(\frac{\omega}{v} b\right) \frac{\mathbf{b}}{b} + iK_0 \left(\frac{\omega}{v} b\right) \mathbf{k} \right),$$

$$A_{n,m} = \left(\frac{\omega}{\pi}\right)^{3/2} (2^{m_x} m_x!)^{-1/2} (2^{m_y} m_y!)^{-1/2} \times (2^{m_z} m_z!)^{-1/2} (2^{n_x} n_x!)^{-1/2} (2^{n_y} n_y!)^{-1/2} (2^{n_z} n_z!)^{-1/2}.$$

В итоге, проинтегрировав выражение (17) по x, y, z , получим при $n_x \geq m_x, n_y \geq m_y, n_z \geq m_z$, т.е. при $n = n_x + n_y + n_z \geq m_x + m_y + m_z$ [19, с. 503, формула (10)]:

$$|a_{n,m}|^2 = \frac{m_z! m_x! m_y!}{n_z! n_x! n_y!} \left(\frac{|Q_z|^2}{2\omega}\right)^{n_z - m_z} \times \left(\frac{Q_x^2}{2\omega}\right)^{n_x - m_x} \left(\frac{Q_y^2}{2\omega}\right)^{n_y - m_y} \times \left(L_{m_z}^{n_z - m_z} \left(\frac{|Q_z|^2}{2\omega}\right)\right)^2 \left(L_{m_x}^{n_x - m_x} \left(\frac{Q_x^2}{2\omega}\right)\right)^2 \times \left(L_{m_y}^{n_y - m_y} \left(\frac{Q_y^2}{2\omega}\right)\right)^2 \exp\left(-\frac{\mathbf{Q} \cdot \mathbf{Q}^*}{2\omega}\right), \quad (18)$$

где звездочка обозначает комплексное сопряжение, $|x|^2 = xx^*$, L_b^a — полином Лагерра. Аналогично проводятся вычисления для $m_x \geq n_x, m_y \geq n_y, m_z \geq n_z$ (тогда $m = m_x + m_y + m_z \geq n_x + n_y + n_z$), для этого нужно сделать следующие замены в выражении (18): $m_x \rightarrow n_x, n_x \rightarrow m_x, m_y \rightarrow n_y, n_y \rightarrow m_y, m_z \rightarrow n_z, n_z \rightarrow m_z$. В итоге можно представить общее выражение для переходов, не зависящее от того, с какого уровня энергии на какой уровень переходит частица, предварительно введя следующую ступенчатую функцию: $g(x) = \theta(x) - \theta(-x)$, которая равна

$$g(x) = \{1, x > 0; 0, x = 0; -1, x < 0\},$$

$\theta(x)$ — тета-функция Хевисайда. Тогда имеем

$$|a_{n,m}|^2 = \exp\left(-\frac{1}{2\omega}\mathbf{Q}\cdot\mathbf{Q}^*\right)\left(\frac{m_z!}{n_z!}\right)^{g(n_z-m_z)} \times \\ \times \left(\frac{m_x!}{n_x!}\right)^{g(n_x-m_x)}\left(\frac{m_y!}{n_y!}\right)^{g(n_y-m_y)} \times \\ \times \left(\frac{|Q_z|^2}{2\omega}\right)^{(n_z-m_z)g(n_z-m_z)}\left(\frac{Q_x^2}{2\omega}\right)^{(n_x-m_x)g(n_x-m_x)} \times \\ \times \left(\frac{Q_y^2}{2\omega}\right)^{(n_y-m_y)g(n_y-m_y)} L, \quad (19)$$

где

$$L = \left(L_{\binom{n_z-m_z}{m_z+n_z+(m_z-n_z)g(n_z-m_z)}/2}\left(\frac{|Q_z|^2}{2\omega}\right)\right)^2 \times \\ \times \left(L_{\binom{n_x-m_x}{m_x+n_x+(m_x-n_x)g(n_x-m_x)}/2}\left(\frac{Q_x^2}{2\omega}\right)\right)^2 \times \\ \times \left(L_{\binom{n_y-m_y}{m_y+n_y+(m_y-n_y)g(n_y-m_y)}/2}\left(\frac{Q_y^2}{2\omega}\right)\right)^2.$$

3. ФЛУКТУАЦИИ ПОТЕРЬ ЭНЕРГИИ

Известно, что флуктуации потерь энергии из основного состояния находятся как [3, 5]

$$\Omega^2 = \sum_{All} (\epsilon_n - \epsilon_0)^2 \sigma_{n,0} = \\ = \sum_{n,0} (\epsilon_n - \epsilon_0)^2 \int_{b_{min} \leq b \leq b_{max}} db |a_{n0}|^2, \quad (20)$$

где $n = n_x + n_y + n_z$, суммирование ведется по всем состояниям, где $b_{max} \geq b_{min}$, поскольку для осциллятора при переходах из одного состояния в другое всегда найдется такое n при малых переданных импульсах, а значит, при больших параметрах удара, где энергия перехода будет равна максимально переданной энергии, т. е. $E_{max} = E_{min}(n^{max})$. Суммирование ведется до некоторого n^{max} , связанного с минимальной переданной энергией электрону. Известно, что энергия трехмерного квантового осциллятора $\epsilon_n = \omega(n + 3/2)$, тогда $\Omega^2 = \omega^2 \sum_{All} n^2 \sigma_{n,0}$, где

$$|a_{n,0}|^2 = \exp\left(-\frac{1}{2\omega}\mathbf{Q}\cdot\mathbf{Q}^*\right)\frac{1}{n_z!n_x!n_y!} \times \\ \times \left(\frac{|Q_z|^2}{2\omega}\right)^{n_z}\left(\frac{Q_x^2}{2\omega}\right)^{n_x}\left(\frac{Q_y^2}{2\omega}\right)^{n_y}. \quad (21)$$

Провести суммирование в выражении (20) напрямую нельзя, так как b_{max} зависит от n , характер зависимости покажем ниже. Можно увидеть, что, за-

менив одно квантовое число, например $n_z = n - n_x - n_y$, и соответственно заменив сумму в (20) на

$$\sum_{All} = \sum_{n_x=0}^{n^{max}} \sum_{n_y=0}^{n^{max}} \sum_{n_z=0}^{n^{max}} = \sum_{n=0}^{n^{max}} \sum_{n_y=0}^n \sum_{n_x=0}^{n-n_y}, \quad (22)$$

где n_x, n_y, n_z — любые квантовые числа при выполнении условия $n^{max} = n_x^{max} + n_y^{max} + n_z^{max}$, получим

$$\Omega^2 = \omega^2 \sum_{n=0}^{n^{max}} n^2 \times \\ \times \int_{b_{min} \leq b \leq b_{max}} \sum_{n_y=0}^n \sum_{n_x=0}^{n-n_y} \frac{\exp\left(-\frac{1}{2\omega}\mathbf{Q}\cdot\mathbf{Q}^*\right)}{(n-n_x-n_y)!n_x!n_y!} \times \\ \times \left(\frac{|Q_z|^2}{2\omega}\right)^{n-n_x-n_y} \left(\frac{Q_x^2}{2\omega}\right)^{n_x} \left(\frac{Q_y^2}{2\omega}\right)^{n_y} db. \quad (23)$$

В результате после суммирования имеем

$$\Omega^2 = \omega^2 \sum_{n=0}^{n^{max}} \frac{n^2}{n!} \int_{b_{min} \leq b \leq b_{max}} \exp\left(-\frac{1}{2\omega}\mathbf{Q}\cdot\mathbf{Q}^*\right) \times \\ \times \left(\frac{1}{2\omega}\mathbf{Q}\cdot\mathbf{Q}^*\right)^n db, \quad (24)$$

где $\mathbf{Q}\cdot\mathbf{Q}^*/2$ является классической энергией, переданной электрону при столкновении [3, 13]. Для дальнейших расчетов удобно интегрировать не по b , а по безразмерной переменной $y = (\omega/v)b$. Теперь нужно определить y_{min}, y_{max} . Как было сказано ранее, минимальному параметру удара соответствует максимально переданная энергия (импульс), известно, что этой энергии соответствует $E_{max} = 2v^2$, тогда $2v = Q_{max}$ [16]. Аналогично и для максимального параметра удара, который соответствует минимальной переданной энергии (импульсу), тогда $\omega n/v = Q_{min}$ и $E_{min} = Q_{min}^2/2$ [16]. Также можно найти и n^{max} , как было предложено выше, из условия $E_{max} = E_{min}(n^{max})$: $n^{max} = [2v^2/\omega]$, где $[2v^2/\omega]$ следует понимать как наименьшее целое число, полученное при округлении $2v^2/\omega$. Решая численно уравнения

$$\left(\frac{Z\omega}{v^3}\right)^2 (K_1^2(y_{min}) + K_0^2(y_{min})) = 1, \quad (25)$$

$$\left(\frac{2Z}{vn}\right)^2 (K_1^2(y_{max}) + K_0^2(y_{max})) = 1, \quad (26)$$

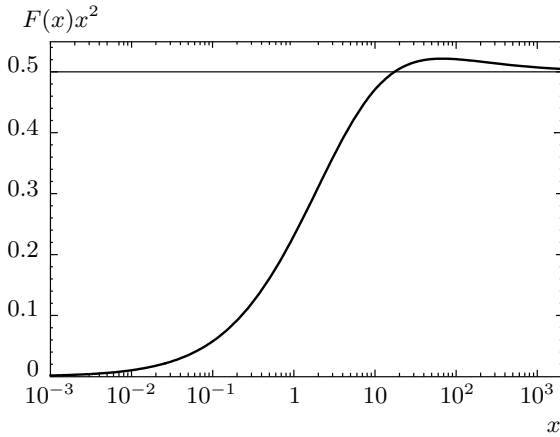


Рис. 1. Зависимость $F(x)x^2$ в выражении (28), получаемая при численном решении уравнения (29)

найдем, что $y_{min} = y_{min}(Z\omega/v^3)$, а также $y_{max} = y_{max}(2Z/vn)$. В итоге выражение (24) запишем в виде

$$\Omega^2 = 2\pi v^2 \sum_{n=0}^{n^{max}} \frac{n^2}{n!} \int_{y_{min}}^{y_{max}} \exp\left(-\frac{1}{2\omega} \mathbf{Q} \cdot \mathbf{Q}^*\right) \times \left(\frac{1}{2\omega} \mathbf{Q} \cdot \mathbf{Q}^*\right)^n y dy. \quad (27)$$

При расчетах флуктуаций потерь энергии выражением (27) пользоваться неудобно, поэтому сделав замену переменных на

$$x = \frac{\mathbf{Q} \cdot \mathbf{Q}^*}{2\omega} = 2 \frac{Z\omega}{v^3} \frac{Z}{v} (K_1^2(y) + K_0^2(y)),$$

получим для потерь энергии:

$$\Omega^2 = \pi\omega \frac{a}{b} \sum_{n=0}^{[a]} \frac{n^2}{n!} \int_{n^2/a}^a \exp(-x)x^n F\left(\frac{x}{b}\right) dx, \quad (28)$$

где

$$b = 2 \frac{Z\omega}{v^3} \frac{Z}{v}, \quad a = \frac{2v^2}{\omega},$$

$$F(x) = \frac{y(x)}{K_1(y(x))(3K_0(y(x)) + K_2(y(x)))}, \quad (29)$$

$y(x)$ находится при численном решении уравнения $x = K_1^2(y) + K_0^2(y)$. Представим решение этого уравнения функцией $F(x)x^2$, график которой изображен на рис. 1. Выражение (28) является окончательным при расчетах флуктуаций потерь энергии из состояния $m = 0$.

4. ТЕОРИЯ ВОЗМУЩЕНИЙ. ФОРМУЛА ФАНО

Обычно при расчетах флуктуаций потерь энергии используют формулы для предельных случаев [3, 5, 7], которые получаются при соответствующих предположениях. Поэтому необходимо рассмотреть эти формулы и определить более точные границы их использования. Рассмотрим сначала случай теории возмущений, т.е. $Z/v \ll 1$. Для того чтобы изучить этот предельный случай, рассмотрим $F(x/b)$ в (28). Представим выражение (28) после замены переменных $z = x/b$ как $\Omega^2 = 4\pi Z^2 L$, где

$$L = \sum_{n=0}^{[a]} \frac{2n^2}{n!ab} \int_{n^2/4\eta^2}^{(v^2/\omega\eta)^2} \exp(-zb)(zb)^n F(z) dz, \quad (30)$$

а $\eta = Z/v$. При $\eta \ll 1$ нужно брать функцию $F(z)$ при больших z . На рис. 1 можно увидеть, что $F(z)z^2 \rightarrow 1/2$ при $z \gg 1$, это можно показать и аналитически (см. Приложение А). В итоге в первом порядке теории возмущений, перейдя обратно к переменной x , получим

$$L = \sum_{n=0}^{[a]} \frac{n^2}{an!} \int_{n^2/a}^a \exp(-x)x^{n-2} dx, \quad (31)$$

похожее выражение в случае теории возмущений было получено в работе [13] и не нуждается в детальном разборе. Стоит сказать, что большие $a \gg 1$ соответствуют большим скоростям и при таких значениях a из (31) можно получить формулу Фано [13]. Более простым способом формула Фано выведена в разд. 5 при $a \gg 1$. Можно заметить, что в (31) подынтегральная функция берется аналитически [20], и тогда

$$L = \sum_{n=0}^{[a]} n \frac{\Gamma(-1+n, n^2/a) - \Gamma(-1+n, a)}{a(n-1)!}. \quad (32)$$

5. КЛАССИЧЕСКИЙ ПРЕДЕЛ И ФОРМУЛА БОРА ДЛЯ ФЛУКТУАЦИЙ. НЕПЕРТУРБАТИВНАЯ ПОПРАВКА К ФОРМУЛЕ ФАНО И ФОРМУЛА ТИТЕЙКА

Обычно при расчетах флуктуаций потерь энергии используют теорию Титейка. Покажем, что при рассмотрении представленной теории можно выделить поправку, аналогичную поправке Титейка к теории Фано. Следует сказать, что эту поправку можно выделить только в случае больших скоростей

(много больше атомных $v_a \sim 1$). В общем виде (т.е. не только при больших скоростях) эти поправки выдѣлать нельзя и нужно пользоваться только формулой (28).

Рассмотрим выражение (28). При $\omega/v^2 \ll 1$ величина $a \gg 1$, а коэффициент $b = 2(Z/v)^2\omega/v^2$ будем считать произвольным, так как $(Z/v)^2$ может принимать большие значения. Разобьем выражение (28) на четыре выражения: $\Omega^2 = \Omega_1^2 - \Omega_2^2 - \Omega_3^2 - \Omega_4^2$, где

$$\Omega_1^2 = \pi\omega \frac{a}{b} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{n^2}{n!} \int_0^a \exp(-x)x^n F\left(\frac{x}{b}\right) dx, \quad (33)$$

$$\Omega_2^2 = \pi\omega \frac{a}{b} \sum_{n=[a]}^{\infty} \frac{n^2}{n!} \int_0^a \exp(-x)x^n F\left(\frac{x}{b}\right) dx, \quad (34)$$

$$\Omega_3^2 = \pi\omega \frac{a}{b} \int_0^{1/a} \exp(-x)x F\left(\frac{x}{b}\right) dx, \quad (35)$$

$$\Omega_4^2 = \pi\omega \frac{a}{b} \sum_{n=2}^{[a]} \frac{n^2}{n!} \int_0^{n^2/a} \exp(-x)x^n F\left(\frac{x}{b}\right) dx. \quad (36)$$

Далее рассмотрим выражения (33) и (35). При $a \gg 1$ в подынтегральном выражении (35) можно положить $\exp(-x) = 1$, тогда после замены переменных на $x/b = z$ получим

$$\begin{aligned} \Omega_1^2 + \Omega_3^2 &= \\ &= \pi ab\omega \left(\int_{1/ab}^{a/b} z F(z) dz + b \int_0^{a/b} z^2 F(z) dz \right). \end{aligned} \quad (37)$$

Можно увидеть, что Ω_2^2, Ω_4^2 будут стремиться к нулю при $a \gg 1$, и далее их не будем учитывать. В итоге $\Omega^2 = 4\pi Z^2 L$, где

$$L = \frac{2}{a} \int_{1/ab}^{a/b} z F(z) dz + \frac{2b}{a} \int_0^{a/b} z^2 F(z) dz. \quad (38)$$

Из формулы (38) можно получить и классический результат (формулу Бора), и результат теории возмущений (формулу Фано). Действительно, при $\hbar \rightarrow 0$ первый интеграл в (38) будет равен нулю, так как в системе СГС

$$a = \frac{2mv^2}{\hbar\omega}, \quad \frac{b}{a} = \frac{Z\omega e^2}{mv^3}, \quad ab = \left(\frac{2Ze^2}{\hbar v}\right)^2.$$

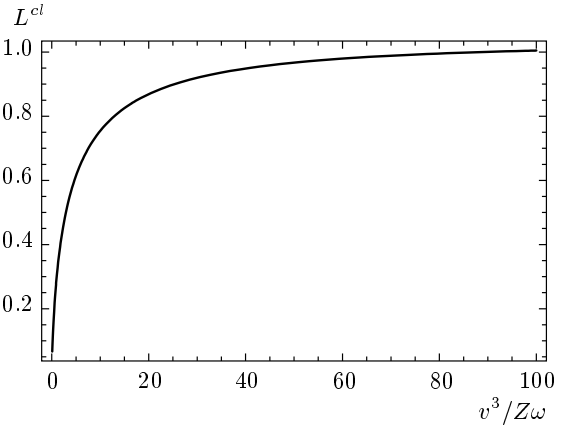


Рис. 2. Зависимость L^{cl} от $v^3/Z\omega$ в выражении (39)

Перейдя опять к переменным z , которые использовались выше, получим классическую формулу для флуктуации потерь энергии:

$$L^{cl} = 2 \frac{Z\omega}{v^3} \int_0^{v^3/Z\omega} z^2 F(z) dz. \quad (39)$$

Зависимость L^{cl} от $v^3/Z\omega$ приведена на рис. 2. При условии Бора $Z\omega/v^3 \ll 1$ формула (39) сводится к классической формуле Бора для флуктуаций, $L_B = 1$ [3]. При переходе к теории возмущений, в рамках которой $Z/v \ll 1$, интегралы в (38) нужно брать при больших z при $F(z) = (2z^2)^{-1}$, после чего несложно получить формулу Фано для осциллятора:

$$L_F = 1 + \frac{\omega}{v^2} \ln\left(\frac{2v^2}{\omega}\right). \quad (40)$$

Рассмотрим переход в непертурбативный случай и к формуле Титейка. Разобьем первый интеграл формулы (38) на два выражения, для этого введем

$$J = \frac{(v^3/Z\omega)^2}{(v/2Z)^2} = \int_0^{(v^3/Z\omega)^2} - \int_0^{(v/2Z)^2}.$$

После чего представим J как

$$J = \ln(2v^2/\omega) + \Delta L_1 + \Delta L_2,$$

предварительно найдя асимптотику интеграла (38) при больших пределах интегрирования (Приложение В), где

$$\Delta L_1 = -I(2\eta) - \ln(\eta e^\gamma), \quad (41)$$

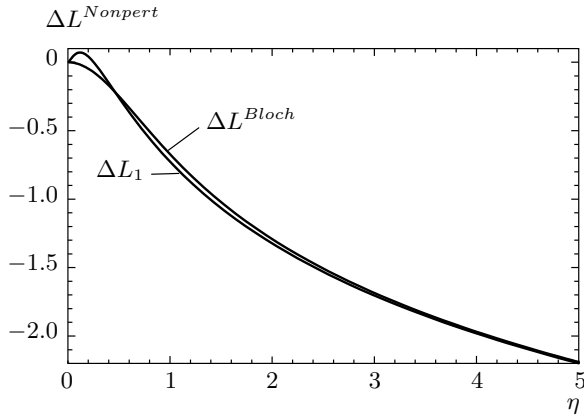


Рис. 3. Зависимости от η величины ΔL_1 в выражении (41) и поправки Блоха

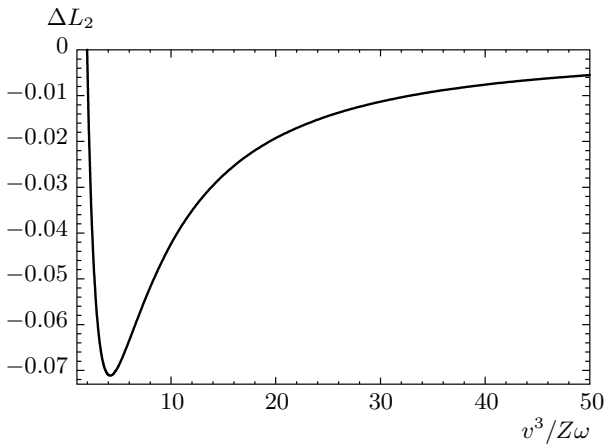


Рис. 4. Зависимость от $v^3/Z\omega$ величины ΔL_2 в выражении (42)

$$\Delta L_2 = I\left(\frac{Z\omega}{v^3}\right) - \ln\left(\frac{2e^{-\gamma}v^3}{Z\omega}\right), \quad (42)$$

а

$$I(y) = \int_0^{1/y^2} zF(z) dz,$$

γ — постоянная Эйлера. Поправку ΔL_1 можно считать непертурбативной поправкой. Хотя принято [6] считать непертурбативной поправку Блоха,

$$\Delta L^{Bloch} = \Psi(1) - \text{Re} \Psi(1 + i\eta),$$

которая получается в приближении свободного электрона. Из рис. 3 видно, что эти непертурбативные поправки схожи, кроме того, при $\eta > 1/2$ их можно считать равными, при $\eta < 1/2$ разница между поправками максимальна, хотя и не велика, и обуслов-

лена тем, что здесь рассматривается дипольное приближение. Представим графически (поскольку каждая поправка зависит от одного параметра) зависимости $\Delta L_1 = \Delta L_1(\eta)$ (рис. 3) и $\Delta L_2 = \Delta L_2(v^3/Z\omega)$ (рис. 4). Из рис. 3, 4 видно, что при $\eta \gtrsim 1/2$ поправка $\Delta L_1 \gg \Delta L_2$, и тогда $\Delta L_1 \approx \Delta L^{Bloch}$ (с точностью до нескольких процентов). Второй интеграл в (38) рассмотрен выше и представлен на рис. 2. При больших скоростях иона $v \gg 1$ и $Z/v \sim 1$ основной вклад в интеграл дает область при больших z , что позволяет заменить подынтегральное выражение на $1/2$. В итоге получим формулу Титейка для осциллятора:

$$L_T = 1 + \frac{\omega}{v^2} \left(\ln \frac{2v^2}{\omega} + \Delta L_1 \right). \quad (43)$$

6. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Таким образом, развита теория по расчету флуктуаций потерь энергии при столкновении быстрых заряженных частиц с атомом, где атом рассматривается как гармонический осциллятор. В этой модели, если считать, что взаимодействие иона с осциллятором дипольное, задача решается точно. В предельных случаях получаются следующие результаты: формула Фано в случае малости возмущения, формула Титейка в случае непертурбативного рассмотрения и формула Бора в классическом пределе. Метод для предельных случаев применим, когда скорость иона много больше атомных скоростей; когда же скорость сравнима с атомными скоростями, рассмотренное разделение на поправки неприемлемо и нужно пользоваться точным выражением (28). Полученные результаты легко обобщить на случай многоэлектронного атома, для этого надо выражение (28) умножить на число электронов в атоме N_a и заменить $\omega = I$ [13]. Следует сказать, что мы рассматривали задачу в дипольном приближении, но предельные случаи соответствуют и теориям, в которых оно не предполагается.

Также следует сказать о применимости рассмотренного подхода. Представленный метод не учитывает поляризационную поправку, которая появляется, если не использовать дипольное разложение. Эта проблема решается с учетом работ других авторов, например [21], с помощью прибавления поляризационной поправки к полученному нами результату. Несмотря на то что в решении используются точные амплитуды, из (28) видно, что максимально возможный переданный импульс больше минимально переданного при выполнении условия $a > n^2/a$, а суммирование в (28) начинается

с $n = 1$. Поэтому получим, что минимальное целое значение $[a] = 1$, значит $a = 2v^2/\omega > 1$. Как было сказано, если считать $\omega = I$, то получим условие применимости рассмотренного подхода по скоростям: $2v^2/I > 1$. Все рассмотренные предельные случаи выполняются, когда $2v^2/I \gg 1$.

Автор выражает благодарность В. И. Матвееву за обсуждение статьи. Работа выполнена в рамках КГЗ Министерства образования и науки РФ (№ 3.1726.2014/К), стипендии Президента РФ (СП-2046.2012.1) и частично при поддержке Программы развития САФУ.

ПРИЛОЖЕНИЕ А

Покажем, что $\lim_{z \rightarrow \infty} F(z)z^2 = 1/2$, где $F(z)$ — функция, определенная согласно (29). Переменная z находится при численном решении уравнения $z = K_1^2(y) + K_0^2(y)$, поэтому выразить явно $y = y(z)$ не удастся. Но мы рассматриваем большие значения z , и тогда несложно увидеть, что при этих значениях $z = 1/y^2$, отсюда переменная $y = 1/z^{1/2}$, которую подставим в (29). В итоге имеем

$$F(z)|_{z \rightarrow \infty} = \left\{ z^{1/2} K_1 \times \right. \\ \left. \times \left(z^{-1/2} \right) \left(3K_0(z^{-1/2}) + K_2 \left(z^{-1/2} \right) \right) \right\}^{-1}. \quad (44)$$

После этого воспользуемся формулами [19, с. 730]

$$K_2(x) = \frac{2}{x} K_1(x) + K_0(x), \quad \frac{dK_0(x)}{dx} = -K_1(x),$$

а также [22, с. 975]

$$K_0(x)|_{x \rightarrow 0} = -\ln(z/2) - \Psi(1),$$

тогда найдем, что

$$K_1(x)|_{x \rightarrow 0} = \frac{1}{x}, \quad K_2(x)|_{x \rightarrow 0} = \frac{2}{x^2}.$$

В итоге, подставив эти выражения в (44), получим

$$\lim_{z \rightarrow \infty} F(z)z^2 = 1/2.$$

ПРИЛОЖЕНИЕ В

Найдем асимптотическое значение интеграла

$$J = \int_0^{a_1^2} z F(z) dz$$

при больших значениях параметра a_1 . Перейдем обратно к переменной y , используя (29), тогда получится

$$J = \int_{y_0}^{\infty} (K_1^2(y) + K_0^2(y)) y dy,$$

похожий интеграл рассчитан в работе [23]:

$$J = y_0 K_0(y_0) K_1(y_0),$$

где y_0 — решение уравнения

$$\left(\frac{1}{a_1} \right)^2 (K_1^2(y_0) + K_0^2(y_0)) = 1 \quad (45)$$

при $a_1 \rightarrow \infty, y_0 \rightarrow 0$. Воспользовавшись асимптотиками для $K_1(y_0), K_0(y_0)$, описанными в Приложении А, получим

$$J|_{a_1 \rightarrow \infty} = \ln(2e^{-\gamma} a_1), \quad (46)$$

где γ — постоянная Эйлера.

ЛИТЕРАТУРА

1. P. K. Sigmund, *Special issue on Ion Beam Science: Solved and Unsolved Problems*, ed. by P. Sigmund, Dan. Vidensk. Selsk. Mat. Fys. Medd. **52**, 557 (2006).
2. N. Bohr, Mat.-Fys. Medd. Dansk. K. Vidensk Selsk. **18** (1948).
3. Н. Бор, *Избранные труды*, т. 1, Наука, Москва (1970).
4. M. S. Livingston and H. Bete, Rev. Mod. Phys. **9**, 245 (1937).
5. U. Fano, Ann. Rev. Nucl. Sci. **13**, 1 (1963).
6. F. Bloch, Ann. der Phys. **16**, 285 (1933).
7. S. Titeica, Bul. Soc. Romanaie Phys. **38**, 81 (1939).
8. H. A. Bethe, Ann. Phys., Lpz. **5**, 324 (1930).
9. Д. Н. Макаров, В. И. Матвеев, Письма в ЖЭТФ **95**, 131 (2012).
10. Д. Н. Макаров, В. И. Матвеев, ЖЭТФ **143**, 453 (2013).
11. В. И. Матвеев, Д. Н. Макаров, Е. С. Гусаревич, ЖЭТФ **139**, 868 (2011).
12. В. И. Матвеев, Д. Н. Макаров, Письма в ЖЭТФ **94**, 3 (2011).

13. P. Sigmund and U. Haagerup, *Phys. Rev. A* **34**, 892 (1986).
14. H. M. Hennig and P. Sigmund, *Phys. Rev. A* **40**, 101 (1989).
15. J. F. Ziegler, *J. Appl. Phys.* **85**, 1249 (1999).
16. Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц, *Квантовая механика*, Наука, Москва (1989).
17. А. И. Базь, Я. Б. Зельдович, А. М. Переломов, *Рассеяние, реакции и распады в нерелятивистской квантовой механике*, Наука, Москва (1971).
18. А. М. Дыхне, Г. Л. Юдин, *УФН* **125**, 377 (1978).
19. А. П. Прудников, Ю. А. Брычков, О. И. Маричев, *Интегралы и ряды. Специальные функции*, Наука, Москва (1983).
20. А. П. Прудников, Ю. А. Брычков, О. И. Маричев, *Интегралы и ряды. Элементарные функции*, Наука, Москва (1981).
21. A. Schinner and P. Sigmund, *Nucl. Instr. Meth. B* **164–165**, 220 (2000).
22. И. С. Градштейн, И. М. Рыжик, *Таблицы интегралов, сумм, рядов и произведений*, Физматгиз, Москва (1963).
23. P. Sigmund, *Phys. Rev. A* **54**, 3113 (1996).