

01:02

©1994 г.

УГЛОВОЕ И ЭНЕРГЕТИЧЕСКОЕ РАСПРЕДЕЛЕНИЕ ДЕЛЬТА-ЭЛЕКТРОНОВ В КВАЗИКЛАССИЧЕСКОМ ПРИБЛИЖЕНИИ ДЛЯ АТОМОВ

С.А.Герасимов

Использование квазиклассического приближения ВКБ и первого борновского приближения позволило получить в общем виде решение задачи о вычислении дважды дифференциального сечения эмиссии дельта-электронов в столкновениях быстрых тяжелых заряженных частиц с многоэлектронными атомами. Проведено сравнение результатов расчетов с имеющимся набором экспериментальных данных для различных атомов.

Введение

В ряде случаев для различных областей физики предпочтительнее иметь пусть не очень строгие, но простые аналитические решения, чем набор таблиц или графиков, даваемых более точной, но сложной теорией, если таковая существует. Особенно ценными являются модели, допускающие дальнейшие аналитические решения. Если же погрешность получаемых результатов находится в пределах погрешностей известных экспериментальных данных, то они могут рассчитываться на самое широкое применение. В физике неупругого взаимодействия ионизирующего излучения с веществом к такого рода решениям относятся модель бинарных столкновений [1] и борновское приближение [2]. Использование ряда существенных допущений в модели бинарных столкновений сделало эту модель практически замкнутой, не допускающей значительных улучшений. Как следствие, модель бинарных столкновений оказывается совершенно бесполезной при описании углового и энергетического распределения дельта-электронов, испускаемых при больших углах вылета [3]. Более того, как оказалось, эта модель вносит существенные погрешности в описание спектра вторичных электронов также при малых углах вылета. Попытки в рамках схемы бинарных столкновений описать искривление траектории вторичной частицы полем атома оказались возможными лишь при еще более сильных предположениях [4].

Борновское приближение является более универсальным и поэтому находится в несколько лучшем положении. Однако все его преимущества исчезают при расчетах спектров дельта-электронов, испускаемых

многочастичными атомами. В этом случае необходимо использовать волновые функции атомных электронов, полученные методом самосогласованного поля. Если модель бинарных столкновений допускает в этом случае использование статистического метода [5], то пока совершенно неясно, как это сделать в рамках борновского приближения. Проблемой является описание волновой функции непрерывного спектра. Конечно, как и в схеме бинарных столкновений, можно предположить, что волновой функцией выбитого электрона является плоская волна. Этот вопрос обсуждался в литературе [6]. Такая модель была бы полезна в случае больших энергий вторичных электронов и в области малых и промежуточных углов вылета. Поскольку поток вторичных электронов, испускаемых назад, по крайней мере на порядок меньше потока дельта-электронов, испускаемых при малых углах вылета, то такая модель была бы пригодна также для расчета распределения вторичных электронов по их энергиям. Вероятно, из-за трудностей, которые будут отмечены ниже, заметный прогресс в этом вопросе достигнут не был.

В настоящей работе идет речь о совместном использовании борновского и квазиклассического приближений. При этом квазиклассическое приближение ВКБ применяется для описания начального состояния атома. Выводы, сделанные ниже, не являются частным случаем наиболее корректного и строгого приложения квазиклассического приближения ВКБ [7] к задачам такого рода. Отмеченный здесь метод [7] относится к неупругому рассеянию первичных электронов и позволяет исследовать лишь дифференциальное по энергии выбитого электрона сечение эмиссии. Как выясняется, использование борновского приближения сопряжено с рядом специфических условий и в свою очередь приводит к простому и наглядному решению конкретной задачи — описанию углового и энергетического распределения вторичных электронов, испускаемых в столкновениях быстрых тяжелых заряженных частиц с атомами.

Импульсное представление

Исходным приближением настоящего рассмотрения является приближение независимых частиц, движущихся в самосогласованном поле. Мы рассматриваем переход из состояния падающей частицы с импульсом $\hbar\mathbf{k}_i$ и атомного электрона с энергией E_{nl} в состояние рассеянной частицы с импульсом $\hbar\mathbf{k}_s$ и выбитого электрона с импульсом $\hbar\mathbf{x}$. Мы пренебрегаем эффектом отдачи. В соответствии с этим энергии налетающей частицы до и после рассеяния связаны с соответствующими энергиями электрона законом сохранения энергии, а дифференциальное сечение процесса в борновском приближении может быть записано в виде [8]

$$d\sigma_{d\mu} = \frac{1}{(2\pi)^5 \hbar} |M_{if}|^2 \delta \left[\hbar^2 (k_i^2 - k_s^2) / 2m_1 + \hbar^2 x^2 / 2m - E_{nl} \right] dk_s d\mathbf{x}, \quad (1)$$

где

$$M_{if} = \frac{4\pi m_1^{1/2} Z_1 e^2}{(\hbar k_i)^{1/2} q^2} \int e^{i\mathbf{q}\mathbf{r}} \psi_f^*(\mathbf{r}) \psi_i(\mathbf{r}) d\mathbf{r}. \quad (2)$$

Здесь $Z_1 e$ — заряд налетающей частицы; m_1 — ее масса; m — масса электрона; $\mathbf{q} = \mathbf{k}_s - \mathbf{k}_i$; $\psi_f(r)$ — волновая функция электрона в состоянии непрерывного спектра; n, l и μ — главное, орбитальное и магнитное квантовые числа электрона в состоянии с энергией E_{nl} и волновой функцией $\psi_i(r)$. Используя обычную процедуру

$$\psi_f(\mathbf{r}) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int \Phi_f(\mathbf{k}_e) \exp(i\mathbf{k}_e \mathbf{r}) d\mathbf{k}_e,$$

$$\psi_i(\mathbf{r}) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int \Phi_i(\mathbf{k}) \exp(i\mathbf{k} \mathbf{r}) d\mathbf{k}, \quad (3)$$

переходим к импульсному представлению в выражении (2) для матричного элемента неупругого рассеяния. Учитывая, что

$$\int d\mathbf{r} \exp[i(\mathbf{k}_i - \mathbf{k}_s - \mathbf{k}_e + \mathbf{k})\mathbf{r}] = (2\pi)^3 \delta(\mathbf{k}_i - \mathbf{k}_s - \mathbf{k}_e + \mathbf{k}), \quad (4)$$

и интегрируя по \mathbf{k} , получаем

$$M_{if} = \frac{4\pi m_1^{1/2} Z_1 e^2}{\hbar^{1/2} k_i^{1/2} q^2} J(\mathbf{k}), \quad (5)$$

где

$$J(\mathbf{k}) = \int \Phi_f^*(\mathbf{k}_e) \Phi_i(\mathbf{k}_e + \mathbf{k}_s - \mathbf{k}_i) d\mathbf{k}_e \quad (6)$$

Принимая во внимание, что $d\mathbf{k}_s = k_s^2 dk_s d\Omega_s$ и $d\boldsymbol{\kappa} = \kappa^2 d\kappa d\Omega_e$, выражение (1) можно теперь проинтегрировать по всем k_s . Это приводит к следующему выражению для дважды дифференциального сечения эмиссии дельта-электронов с энергией $\varepsilon_e = \hbar^2 \kappa^2 / 2m$ в элемент телесного угла $d\Omega_e$

$$\frac{d^2 \sigma_{nl\mu}}{d\varepsilon_e d\Omega_e} = \frac{Z_1^2 e^4 m_1^2 m k_s \kappa}{2\pi^3 \hbar^6 k_i} \int \frac{|J(\mathbf{k})|^2}{q^4} d\Omega_s, \quad (7)$$

где k_i, k_s, ε_e и E_{nl} связаны законом сохранения энергии

$$\frac{\hbar^2 k_s^2}{2m_1} - \frac{\hbar^2 k_i^2}{2m_1} + \varepsilon_e - E_{nl} = 0. \quad (8)$$

Эти выражения отвечают состоянию электрона в атоме с квантовыми числами n, l и μ .

Векторы \mathbf{k}_e и \mathbf{k} в выражениях (3) имеют смысл импульсов электрона в непрерывном спектре и в связанном состоянии. В общем случае \mathbf{k}_e ни по направлению, ни по модулю не совпадает с вектором $\boldsymbol{\kappa}$. Из (4) следует, что волновые векторы $\mathbf{k}_i, \mathbf{k}_s, \mathbf{k}_e$ и \mathbf{k} связаны обычным законом сохранения импульса. Наконец, в выражении (7) перед интегралом стоит модуль $\boldsymbol{\kappa}$, а не \mathbf{k}_e . Это существенно для некоторого усовершенствования модели, разработанной ниже. Следуя известным результатам [2,9], такое различие проследить трудно.

Выражение (7) следует записать в явном виде, например в переменных k и q . Это может быть достигнуто рассмотрением кинематики рассеяния с использованием закона сохранения импульса.

Взаимное расположение векторов k_i, k_s, k_e, k, κ и q показано на рис. 1. Здесь ось z направлена вдоль вектора k_i . Азимутальные углы φ_e, φ_k и φ_s отсчитываются от плоскости, в которой лежат векторы k_i и κ . Полярные углы ϑ_s (между k_i и k_s) и ϑ' (между k_i и q) отсчитываются от направления k_i .

В качестве одной из переменных выберем модуль вектора q . В расчетах будем использовать закон сохранения импульса, записанный в форме

$$k_i - k_s - k_e + k = 0. \quad (9)$$

Очевидно,

$$q^2 = k_i^2 + k_s^2 - 2k_s k_i \cos \vartheta_s. \quad (10)$$

Из теоремы синусов для треугольника, образованного векторами k_i и k_s , следует, что

$$\sin \vartheta' = \frac{k_s \sin \vartheta_s}{q}. \quad (11)$$

Неупругие столкновения быстрых заряженных частиц сопровождаются малой передачей импульса q по сравнению с k_i . Поэтому угол ϑ_s , разумеется, мал. Вектор q , однако, не направлен вдоль оси z . Оценки показывают, что угол ϑ' близок к π только в случае, если

$$|\sin \vartheta_s| \ll \Delta E / T_1,$$

где ΔE — энергия, переданная атомному электрону налетающей частицей; $T_1 = \hbar^2 k_i^2 / 2m_1$.

Из (10) следует, что

$$\cos \vartheta_s = (k_i^2 + k_s^2 - q^2) / 2k_i k_s \quad (12)$$

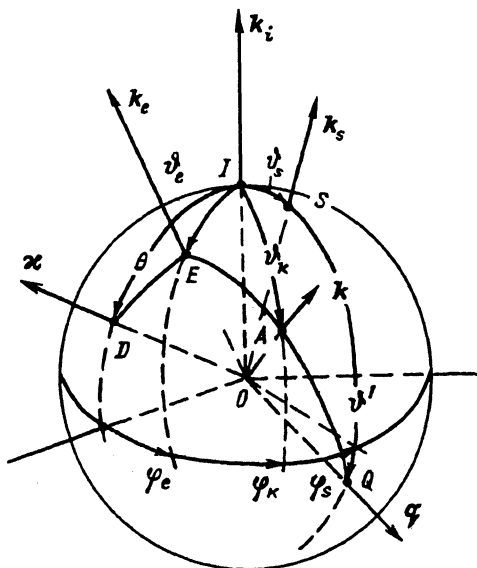


Рис. 1. К кинематике рассеяния.

$$\sin^2 \vartheta_s = \frac{[q^2 - (k_i - k_s)^2][(k_i + k_s)^2 - q^2]}{4k_i^2 k_s^2}. \quad (13)$$

Из последнего выражения вытекает условие

$$k_i - k_s < q < k_i + k_s, \quad (14)$$

накладывающее ограничения на область изменения q .

Введем в рассмотрение вектор $\mathbf{k}_0 = \boldsymbol{\nu} + \mathbf{q}$, где $\boldsymbol{\nu}$ — вектор, направленный вдоль импульса выбитого электрона \mathbf{x} . Очевидно, при $\boldsymbol{\nu} = \mathbf{k}_e$ вектор \mathbf{k}_0 будет совпадать с \mathbf{k} . Модуль вектора \mathbf{k}_0 выберем в качестве второй независимой переменной. По теореме косинусов сферической тригонометрии для треугольника DIQ можно найти угол $D0Q$ между векторами \mathbf{x} и \mathbf{q}

$$\cos D0Q = [\cos \theta(k_s \cos \vartheta_s - k_i) + k_s \sin \theta \sin \vartheta_s \cos \varphi_s] / q. \quad (15)$$

Модуль вектора \mathbf{k}_0 находится по теореме косинусов для треугольника, образованного векторами $\boldsymbol{\nu}$ и \mathbf{q} ,

$$k_0^2 = \nu^2 + q^2 + 2\nu \cos \theta(k_s \cos \vartheta_s - k_i) + 2\nu k_s \sin \theta \sin \vartheta_s \cos \varphi_s. \quad (16)$$

Отсюда

$$\sin \varphi_s = \pm \frac{(-aq^4 - 2q^2b - c)^{1/2}}{2k_i k_s \nu \sin \theta \sin \vartheta_s}, \quad (17)$$

где

$$\begin{aligned} a &= k_i^2 + \nu^2 - 2k_i \nu \cos \theta, \\ b &= -[(k_i^2 + k_s^2)\nu^2 \sin^2 \theta + (k_i - \nu \cos \theta)V], \\ c &= \nu^2(k_i^2 - k_s^2)^2 \sin^2 \theta + V^2, \\ V &= k_i(k_0^2 - \nu^2) + \nu \cos \theta(k_i^2 - k_s^2). \end{aligned} \quad (18)$$

Требование $b^2 - ac > 0$ означает

$$4k_s^2 y_0^2 > (k_0^2 - k_s^2 - y_0^2)^2, \quad (19)$$

где

$$y_0^2 = k_i^2 + \nu^2 - 2k_i \nu \cos \theta. \quad (20)$$

Принимая во внимание, что $\nu \ll k_i$ и $q \ll k_i$, получаем

$$\sin \varphi_s = \pm \frac{[a(q^2 - \Delta)(\delta - q^2)]^{1/2}}{2k_i k_s \nu \sin \theta \sin \vartheta_s}, \quad (21)$$

где

$$\Delta = [-b - (b^2 - ac)^{1/2}] / a, \quad \delta = [-b + (b^2 - ac)^{1/2}] / a. \quad (22)$$

Области допустимых значений q и k_0 определяются теперь следующими условиями

$$\Delta < q^2 < \delta, \quad k_0^2 > (k_i - k_s - \nu \cos \theta)^2. \quad (23)$$

Для вычисления интеграла (6) необходимо знать компоненты вектора $\mathbf{k} = \mathbf{k}_e + \mathbf{k}_s - \mathbf{k}_i$. Найдем сначала угол $E0Q$ между векторами \mathbf{k}_e и \mathbf{q} . Он может быть найден по теореме косинусов для сферического треугольника EIQ

$$\cos E0Q = (k_s \cos E0S - k_i \cos \vartheta_e) / q \quad (24)$$

и выражается через угол $E0S$ между векторами \mathbf{k}_e и \mathbf{k}_s .

Здесь следует сделать одно очень существенное замечание. Казалось бы, что процедуру вычисления компонент вектора \mathbf{k} можно было бы значительно упростить, воспользовавшись предположением, что $\vartheta_s \ll 1$. В этом случае $\cos E0S \approx \cos \vartheta_e$ и

$$\cos E0Q \approx (k_s - k_i) \cos \vartheta_e / q. \quad (25)$$

Это выражение, однако, несправедливо при углах ϑ_e , близких к $\pi/2$. Это видно, например, из сравнения выражений (24) и (25) при $\vartheta_e = \pi/2$. Далее; поскольку $\mathbf{k} = \mathbf{k}_e + \mathbf{q}$, то

$$k^2 = k_e^2 + q^2 + 2k_e(k_s \cos E0S - k_i \cos \vartheta_e), \quad (26)$$

где

$$\cos E0S = \cos \vartheta_e \cos \vartheta_s + \sin \vartheta_e \sin \vartheta_s \cos(\varphi_s - \varphi_e), \quad (27)$$

при этом угол ϑ_s определяется выражениями (12) и (13), а угол φ_s — из (16) и (21).

Из закона сохранения импульса (9) следует, что

$$k^2 + k_i^2 + 2kk_i \cos \vartheta_k = k_s^2 + k_e^2 + 2k_s k_e \cos E0S. \quad (28)$$

Подставляя в (28) выражение (26), получаем

$$\cos \vartheta_k = (k_s^2 - k_i^2 - q^2 + 2k_e k_i \cos \vartheta_e) / 2kk_i. \quad (29)$$

Угол $E0A$ между векторами \mathbf{k}_e и \mathbf{k} определяется по теореме косинусов для треугольника, образованного векторами \mathbf{k}_e и \mathbf{k} ,

$$\cos E0A = (q^2 - k^2 - k_e^2) / 2k_e k. \quad (30)$$

С другой стороны, из рассмотрения сферического треугольника EIA можно получить

$$\cos E0A = \cos \vartheta_e \cos \vartheta_k + \sin \vartheta_e \sin \vartheta_k \cos(\varphi_k - \varphi_e). \quad (31)$$

Отсюда

$$\cos(\varphi_k - \varphi_e) = \frac{q^2 - k^2 - k_e^2 - 2k_e k \cos \vartheta_e \cos \vartheta_k}{2k_e k \sin \vartheta_e \sin \vartheta_k}. \quad (32)$$

Полученные выражения (26), (28) и (32) полностью определяют компоненты вектора \mathbf{k} при заданных k_e , ϑ_e , φ_e , q и k_0 .

Если бы мы воспользовались приближенным соотношением (25), определяющим угол между \mathbf{k}_e и \mathbf{q} , получили бы следующее выражение:

$$k^2 \approx k_e^2 + q^2 + 2k_e(k_s - k_i) \cos \vartheta_e \quad (33)$$

для модуля вектора \mathbf{k} . В таком приближении k не зависит от k_0 . Следует заметить, что в этом случае при определенном k выражения для ϑ_k и φ_k совпадают с (29) и (32).

Для данных q и k_0 существуют два значения угла φ_s , отличающиеся знаком в (21). Поэтому можно рассматривать

$$d\Omega_s = 2|d\varphi_s d\cos \vartheta_s| \quad \text{при} \quad 0 \leq \varphi_s \leq \pi. \quad (34)$$

От интегрирования по φ_s и ϑ_s перейдем к интегрированию по q и k_0

$$d\Omega_s = 2 \left| \frac{\partial \varphi_s}{\partial q} \frac{\partial \cos \vartheta_s}{\partial k_0} - \frac{\partial \varphi_s}{\partial k_0} \frac{\partial \cos \vartheta_s}{\partial q} \right| dq dk_0$$

или, используя выражение (21), получаем

$$d\Omega_s = \frac{4k_0 q}{k_s a^{1/2} [(q^2 - \Delta)(\delta - q^2)]^{1/2}} dq dk_0. \quad (35)$$

Заметим, что

$$I(k_0) = \int_{\Delta}^{\delta} \frac{dq}{q^3 [(q^2 - \Delta)(\delta - q^2)]^{1/2}} = -\pi b a^{1/2} / 2c^{3/2}, \quad (36)$$

где параметры a , b и c определены выражениями (18).

Приближение плоских волн

Конечно, было бы интересно решить задачу полностью, т.е. получить аналитическое выражение для углового и энергетического распределений во всем диапазоне углов и энергий в области справедливости борновского и квазиклассического приближений. К сожалению, пока эта задача неразрешима. Основная трудность здесь связана с описанием волновой функции заряженной частицы в непрерывном спектре. Для этой цели мы не можем использовать известные результаты, например волновую функцию непрерывного спектра [8], полученную для кулоновского поля. Во-первых, даже в этом случае расчеты оказываются чрезвычайно сложными. Во-вторых, такой подход не решил

бы проблемы. Это следует из известных результатов использования борновского приближения к решению задач такого рода [3]. Простейшие оценки показывают, что учет искривлений траекторий первичной и вторичной частиц полем атома должен проводиться одновременно. Оба эти процесса могут вносить соизмеримый вклад в испускание вторичных электронов при больших углах ϑ_e . Поэтому здесь разумно воспользоваться самым простым подходом — предположить, что волновая функция дельта-электрона является плоской волной. В соответствии с вышесказанным отказ от такого предположения означал бы вообще отказ от использования борновского приближения для решения задач такого рода. Аргумент в пользу такого предположения содержится в постановке задачи, а именно в расчетах мы собираемся использовать квазиклассическое приближение ВКБ, являющееся асимптотическим решением при больших значениях орбитальных квантовых чисел. А если это так, то использование плоской волны в качестве волновой функции дельта-электрона вполне обосновано [6]. Ясно, что поскольку такой подход не содержит описания потерь энергии вторичного электрона и искривления его траектории в поле атома, то полученное решение будет справедливо при больших энергиях вторичных электронов и $\vartheta_e \leq 90^\circ$. Применение эйконального приближения [10] привело бы к учету только первого эффекта. Другой, наиболее простой способ учета потерь энергии будет отмечен ниже.

В рассматриваемом приближении

$$\Phi_f(\mathbf{k}_e) = (2\pi)^{3/2} \delta(\mathbf{k}_e - \mathbf{k}'_e), \quad (37)$$

и поэтому

$$J(\mathbf{k}) = (2\pi)^{3/2} \Phi_i(\mathbf{k}_s - \mathbf{k}_i + \mathbf{k}'_e).$$

В дальнейшем верхний индекс у вектора \mathbf{k}'_e опускаем. Теперь можно положить $\nu = \mathbf{k}_e$ и использовать выражения, полученные в предыдущем разделе.

Нас будет интересовать сечение, просуммированное по всем квантовым числам μ . Предполагая, что в атоме оболочки заполнены и, используя обычное представление

$$\Phi_i(\mathbf{k}) = \frac{1}{k} g_{nl}(k) Y_{l\mu}(\vartheta_k, \varphi_k),$$

можно записать с учетом спинового вырождения (коэффициент 2 перед суммой)

$$\frac{d^2 \sigma_{nl}}{d\varepsilon_e d\Omega_e} = \frac{16 Z_1^2 m_1^2 m e^4 \kappa}{\hbar^6 k_i a^{1/2}} 2 \sum_{\mu} \int dk \frac{|g_{nl}(k)|^2}{k} \int dq \frac{|Y_{l\mu}(\vartheta_k, \varphi_k)|^2}{q^3 [(q^2 - \Delta)(\delta - q^2)]^{1/2}}.$$

Используя

$$\sum_{\mu=-l}^l |Y_{l\mu}|^2 = \frac{2l+1}{4\pi}$$

и выражения (36) и (18) при $k_e \ll k_i$, получаем

$$\frac{d^2 \sigma_{nl}}{d\varepsilon_e d\Omega_e} = \frac{4Z_1^2 m_1^2 m e^4 \kappa}{\hbar^6 k_i^2} (2l+1) \int dk \frac{|g_{nl}(k)|^2}{k} f(k^2, E_{nl}), \quad (38)$$

где

$$f(k^2 E_{nl}) = (2k_e^2 \sin^2 \vartheta_e + y) / \left[4k_e^2 (k_i - k_s)^2 \sin^2 \vartheta_e + y^2 \right]^{3/2},$$

$$y = k^2 - k_e^2 + 2k_e (k_i - k_s) \cos \vartheta_e, \quad (39)$$

$$(k_i - k_s) = \frac{m_1}{\hbar^2 k_i} (\varepsilon_e - E_{nl}). \quad (40)$$

Пределы интегрирования в выражении (38) определяются условием

$$k^2 > \left[m_1 (\varepsilon_e - E_{nl}) / \hbar^2 k_i - k_e \cos \vartheta_e \right]^2. \quad (41)$$

Таким образом, в борновском приближении для конечного состояния электрона, задаваемого плоской волной (37), мы записали достаточно простое решение. Если угодно, оно может рассматриваться как вариант приближения бинарных столкновений, значительно отличающийся от известной модели [1]. Во-первых, оно значительно проще. Во-вторых, в расчетах не использовалась процедура усреднения, характерная для классической схемы. В-третьих, полученное решение, по-видимому, является более корректным. Так, известная модель [1] в конечном выражении содержит слагаемое $m\kappa^2/m_1 k_i^2$, что, вообще говоря, противоречит правилу перехода от случая неупругого рассеяния легких частиц к тяжелым [8].

Для вычисления углового и энергетического распределения дельта-электронов выражение (38) следует просуммировать по всем состояниям электрона в атоме. В случае использования одноэлектронных волновых функций при выполнении такой процедуры $2l+1$ в выражении (38) следует заменить на $n_e/2$, где n_e — число электронов в состоянии с квантовыми числами n и l . При этом $g_{nl}(k)$ представляет собой преобразование Фурье–Бесселя радиальной части волновой функции. Другой простой способ вычисления $d^2\sigma/d\varepsilon_e d\Omega_e$ заключается в использовании квазиклассического приближения ВКБ.

Квазиклассическое приближение

В квазиклассическом приближении импульсная волновая функция атомного электрона определяется выражениями [11,12]

$$g_{nl}^2(k) = \frac{k(\partial E_{nl}/\partial n)}{\pi \left[k^2 - (l+1/2)^2/r_0^2 \right]^{1/2} dU(r_0)/dr_0}, \quad (42)$$

где r_0 — точка стационарной фазы, для которой

$$E_{nl} = \hbar^2 k^2 / 2m + U(r_0) \quad (43)$$

и $U(r)$ — потенциальная энергия электрона в атоме.

В квазиклассическом приближении суммирование по n и l можно заменить интегрированием. Это дает следующее выражение для дважды дифференциального сечения эмиссии дельта-электронов:

$$\frac{d^2\sigma}{d\varepsilon_e d\Omega_e} = \frac{4Z_1^2 m_1^2 m e^4 \kappa}{\pi \hbar^6 k_i^2} \int dE_{nl} \int dl \int dk \frac{(2l+1)f(k^2, E_{nl}) dr_0/dU(r_0)}{[k^2 - (l+1/2)^2/r_0^2]^{1/2}}. \quad (44)$$

При заданном E_{nl} функция $f(k^2, E_{nl})$ и r_0 не зависят от l , поэтому, меняя порядок интегрирования в (44) и вычисляя интеграл по l аналитически, получаем

$$\frac{d^2\sigma}{d\varepsilon_e d\Omega_e} = \frac{4Z_1^2 m_1^2 m e^4 \kappa}{\pi \hbar^6 k_i^2} \int dr_0 \cdot r_0^2 \int dk^2 f(k^2, E_{nl}). \quad (45)$$

При вычислении внутреннего интеграла следует учитывать, что в соответствии с (43) правая часть неравенства (41) зависит от k^2 , а интегрирование по r_0 в выражении (45) должно проводиться при условии связанности атомных электронов в исходном состоянии ($E_{nl} < 0$). Это дает следующую систему неравенств, определяющую область интегрирования:

$$0 \leq k^2 \leq -2mU(r_0)/\hbar^2,$$

$$k_i^2 k^2 / m_1^2 > [(k_e^2 - k^2)/2m - k_i k_e \cos \vartheta_e / m_1 - U(r_0)/\hbar^2]^2. \quad (46)$$

Решение этой системы неравенств можно записать в виде

$$p < -w(\cos \vartheta_e - w^{1/2}/2)^2,$$

$$[1 - (d^2 + w \sin^2 \vartheta_e - p)^{1/2}]^2 \leq m_1^2 k^2 / m^2 k_i^2 \leq -p, \quad (47)$$

где

$$w = m_1^2 k_e^2 / m^2 k_i^2, \quad d = 1 - w^{1/2} \cos \vartheta_e, \quad p = 2m_1^2 U(r_0) / \hbar^2 m k_i^2. \quad (48)$$

Дальнейшие вычисления длинны, но элементарны

$$\frac{d^2\sigma}{d\varepsilon_e d\Omega_e} = \frac{2Z_1^2 m e^4 k_e}{\pi \hbar^2} \int_0^{r^*} dr_0 \frac{r_0^2}{U^2(r_0)} \left[(d^2 + w \sin^2 \vartheta_e - p)^{1/2} - \frac{d(p/w + d) + w \sin^2 \vartheta_e - p/2}{[w \sin^2 \vartheta_e + (p/w + d)^2]^{1/2}} \right], \quad (49)$$

где r^* — решение уравнения

$$-U(r^*) = \frac{\hbar^2 k_e^2}{2m} (\cos \vartheta_e - m_1 k_e / 2m k_i)^2, \quad (50)$$

т.е. соответствует условию, когда подинтегральное выражение (49) обращается в ноль.

Приближение малых углов

Угол ϑ_s остается малым и в предыдущем случае. Все дело в том, как учитывать этот угол при вычислении k , ϑ_k и φ_k . Вернемся к рассмотрению приближенного соотношения (33). В этом случае модуль вектора k не зависит от ϑ_s . Поэтому

$$d\Omega_s = \frac{2\pi q dq}{k_i k_s}. \quad (51)$$

Это приближение чрезвычайно часто используется при рассмотрении неупругого рассеяния быстрых заряженных частиц атомами [2,3]. Возможно, что оно достаточно при вычислении дифференциального по энергии выбитого электрона и интегрального сечения ионизации. В случае изучения углового распределения оно должно быть проверено. Здесь недостаточно замечания, сделанного при рассмотрении кинематики рассеяния, чтобы исключить это приближение из расчетов. Во-первых, можно ожидать, что оно окажется полезным в случае малых углов ϑ_e . Во-вторых, не следует забывать, что оно вошло в большое число работ, монографий и учебных пособий.

Повторяя расчеты, сделанные в предыдущем разделе, можно показать, что в приближении малых углов

$$\frac{d^2\sigma}{d\varepsilon_e d\Omega_e} = \frac{8Z_1^2 m_1^2 m e^4 k_e}{\pi \hbar^6 k_i^2} \int_{-\infty}^0 dE_{nl} \int_{q_0}^{\infty} dq \frac{r_0^2}{q^3 dU(r_0)/dr_0}. \quad (52)$$

Мы не можем вынести r_0^2 и $dU(r_0)/dr_0$ из-под знака внутреннего интеграла, поскольку теперь точка стационарной фазы определяется также значением q . Здесь

$$q_0 = \frac{m_1}{\hbar^2 k_i} (\varepsilon_e - E_{nl}). \quad (53)$$

Используя (33) и (43), можно найти уравнение, связывающее q и $U(r_0)$,

$$q^2 = -\frac{2m}{\hbar^2} \left[U(r_0) - (\varepsilon_e - E_{nl}) \left(1 - \frac{m_i k_e}{m k_i} \cos \vartheta_e \right) \right]. \quad (54)$$

Это дает возможность в выражении (52) сначала перейти от интегрирования по q к интегрированию по $U(r_0)$, поменять порядок интегрирования, а интеграл по E_{nl} вычислить аналитически. В результате мы получаем

$$\frac{d^2\sigma}{d\varepsilon_e d\Omega_e} = \frac{Z_1^2 m_1^2 e^4 k_e}{\pi \hbar^2 m T_1^2 d} \int_0^{r_m} dr_0 \cdot r_0^2 \left\{ \left[(d^2 - p)^{1/2} - d \right]^{-2} + \frac{m T_1}{m_1} \left[U(r_0) + \varepsilon_e d \right]^{-1} \right\}, \quad (55)$$

где r_m — решение уравнения

$$-U(r_m) = \varepsilon_e \left(\frac{m_1 \varepsilon_e}{4m T_1} + d \right), \quad (56)$$

Рис. 2. Энергетическое распределение вторичных электронов, испускаемых в столкновениях протонов с атомами меди (а) и серебра (б) при малых углах вылета

а — $\vartheta_e = 5^\circ$, $T_1 = 10$ МэВ;
 б — $\vartheta_e = 5^\circ$, $T_1 = 22$ МэВ.
 Сплошные кривые — расчет по формулам (49), (50), штриховые — результат расчета в приближении малых углов, точки — экспериментальные данные [15,16].

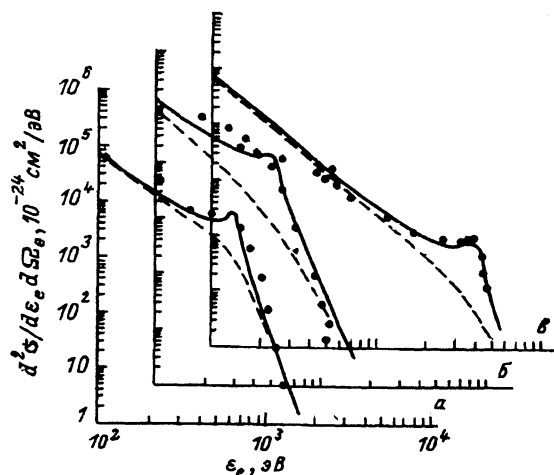
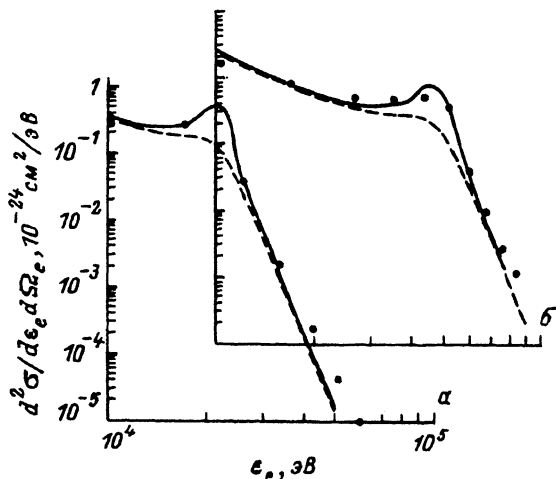
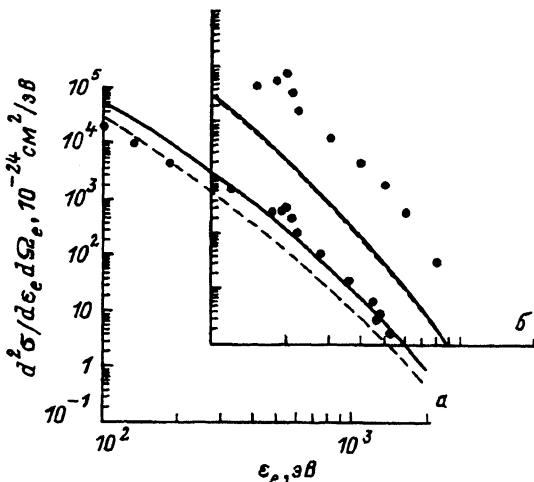


Рис. 3. Энергетическое распределение вторичных электронов, испускаемых в столкновениях протонов с атомами аргона (а) и ксенона (б,в) при промежуточных углах вылета

а — $\vartheta_e = 10^\circ$, $T_1 = 300$ кэВ;
 б — $\vartheta_e = 30^\circ$, $T_1 = 300$ кэВ;
 в — $\vartheta_e = 20^\circ$, $T_1 = 2$ МэВ.
 Обозначения такие же, как и на рис. 2. Для сравнения использованы экспериментальные данные [17,18].

Рис. 4. Распределение дельта-электронов по энергиям при больших углах эмиссии ϑ_e для ксенона (а) и аргона (б)

а — $\vartheta_e = 90^\circ$, $T_1 = 1$ МэВ;
 б — $\vartheta_e = 160^\circ$, $T_1 = 300$ кэВ.
 Обозначения такие же, как и на рис. 2. Использованы экспериментальные данные [17,18] для неупругого рассеяния протонов.



причем при $\epsilon_e < -4mT_1d/m_1$ верхний предел интегрирования в (56) должен быть положен равным бесконечности.

Таким образом, получены два разных решения одной и той же задачи. Безусловно, решение (49), (50) является более корректным. Однако заслуживает внимания и приближение малых углов. Выбор может быть сделан только после проведения конкретных расчетов и сравнения с экспериментальными данными.

Сравнение с экспериментальными данными

Выражения (49), (50) и (55), (56) содержат одну-единственную неопределенную величину — потенциальную энергию атомного электрона $U(r_0)$. Квазиклассический аналог для $U(r_0)$ известен. Это — модель Томаса-Ферми [13]. Для численных расчетов достаточно взять любую пригодную аналитическую аппроксимацию $U(r_0)$ [14]. В данной работе использовано хорошо известное представление Мольер для функции экранирования Томаса-Ферми.

Результаты расчетов для протонов ($Z_1 = 1$) по формулам (49), (50) и (55), (56) в сравнении с имеющимся набором экспериментальных данных для серебра [15], меди [16], аргона [17] и ксенона [18] для малых, промежуточных и больших углов ϑ_e приведены на рис. 2-4. По крайней мере для данного метода приближение малых углов следует признать неудачным. Нет оснований предполагать, что это приближение оправдывает себя и при использовании одноэлектронных волновых функций. При $\vartheta_e = 160^\circ$ результаты расчетов по обоим моделям практически совпадают. Как и ожидалось, описанный метод оказался пригодным в области углов $\vartheta_e \lesssim 90^\circ$ и больших энергий вторичных электронов. Тот факт, что при сравнительно малых энергиях ϵ_e метод плохо описывает экспериментальные данные, требует дальнейшего усовершенствования модели. Чтобы сделать это, нужно решить достаточно трудную задачу — в квазиклассическом приближении получить удобное аналитическое выражение для импульсной волновой функции сплошного спектра.

Заключение

Один из основных выводов настоящей работы заключается в том, что при квазиклассическом описании начального состояния атома приближение малых углов не является достаточно корректным. Второй результат — полученное в общем виде решение (49), (50), отличающееся от известных.

Следует отметить некоторые положения, которые было бы целесообразно обсудить подробно. Во-первых, это касается использования традиционной схемы расчета — с применением одноэлектронных волновых функций. Во-вторых, простота получаемых в квазиклассическом приближении результатов допускает аналитическое интегрирование $d^2\sigma/d\epsilon_e d\Omega_e$ по всем углам ϑ_e , другими словами, получение в аналитическом виде выражения для спектра дельта-электронов. В-третьих, описанный метод может быть улучшен введением простой поправки, а именно при вычислении квазиклассической волновой функции сплошного спектра возникает выражение

$$\hbar^2 \kappa^2 / 2m = \hbar^2 k_e / 2m + U(r^0),$$

определяющее точку стационарной фазы r^0 и аналогичное (43). Полагая $r^0 = r_0$ и повторив выкладки начиная с выражения (45), можно получить выражение, которое, вероятно, будет лучше описывать экспериментальные данные в области малых энергий ε_e . Эта поправка, очевидно, является моделью и требует специального обсуждения.

Список литературы

- [1] *Bonsen T.F.M., Vriens L.* // *Physica*. 1970. Vol. 47. N 2. P. 307-319.
- [2] *Мотт Н., Мессу Г.* Теория атомных столкновений. М.: Мир, 1969. 756 с.
- [3] *Rudd M.E.* // *Radiat. Res.* 1975. Vol. 64. P. 131-180.
- [4] *Gryziński M.* // *J. Phys. B: Atom. Mol. Phys.* 1987. Vol. 20. N 18. P. 4741-4758.
- [5] *Герасимов С.А.* // *ЖТФ*. 1986. Т. 56. Вып. 1. С. 3-7.
- [6] *Garcia J.D.* // *Phys. Rev.* 1967. Vol. 159. N 1. P. 39-41.
- [7] *Браун М.А., Очкур В.И.* // *Вопросы теории атомных столкновений*. Л., 1980. Вып. 2. С. 101-121.
- [8] *Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М.* Квантовая механика. М.: Наука, 1974. 752 с.
- [9] *Vriens L.* // *Physica*. 1970. Vol. 47. N 2. P. 267-276.
- [10] *Гольдбергер М., Ватсон К.* Теория столкновений. М.: Мир, 1967. 824 с.
- [11] *Gerasimov S.A.* // *Czech. J. Phys.* 1990. Vol. B40. P. 425-431.
- [12] *Герасимов С.А.* // *ЖТФ*. 1989. Т. 59. Вып. 6, С. 179-181.
- [13] *Мигдал А.Б., Крайнов В.П.* Приближенные методы квантовой механики. М.: Наука, 1966. 152 с.
- [14] *Готт Ю.В.* Взаимодействие частиц с веществом в плазменных исследованиях. М.: Атомиздат, 1978. 272 с.
- [15] *Bell F., Trollmann G., Böckl H., Betz H.D.* // *Nucl. Instrum. and Meth.* 1982. Vol. 194. P. 423-427.
- [16] *Bell F., Trollmann G., Böckl H., Betz H.D.* // *J. Phys. B*. 1982. Vol. 15. N 10. P. 1487-1497.
- [17] *Crooks J.B., Rudd M.E.* // *Phys. Rev. A*. 1971. Vol. 3. P. 1628-1634.
- [18] *Toburen L.H.* // *Phys. Rev. A*. 1974. Vol. 9. N 6. P. 2506-2517.

Ростовский-на-Дону университет
Научно-исследовательский институт физики

Поступило в Редакцию
2 ноября 1992 г.
В окончательной редакции
14 апреля 1993 г.