Письма в ЖТФ, том 20, вып. 12 26 июня 1994 г.

02

О ВКЛАДЕ НЕУПРУГИХ ПРОЦЕССОВ В ИОН-АТОМНОМ РАССЕЯНИИ

Г.Н.Потетюнко

В работе [1] сделана попытка оценить вклад неупругих процессов в формирование угла рассеяния при ион-атомном соударении и показано, что в диапазоне энергий, где тормозная, способность вещества пропорциональна скорости иона, в рамках модели О.Б.Фирсова [2] вклад неупругих процессов существен лишь для прицельных расстояний $p \gtrsim a$ (a — длина экранирования), а при малых углах рассеяния для всех Z_1 и Z_2 и энергий выше 1 КэВ/нукл их учет с хорошей точностью сводится к замене в классическом интеграле рассеяния

$$\Psi = \int\limits_{r_0}^{\infty} \frac{pdr}{r^2\sqrt{1 - p^2/r^2 - U(r)/E}} \tag{1}$$

экранированного кулоновского потенциала $U(r)$ эффективным потенциалом

$$W(r, V_0) = U(r) + V_0 \int F(r)dr. \tag{2}$$

Здесь V_0 — начальная скорость иона,

$$F(r) = \frac{m^2e^4}{2\pi\hbar^3}\Big(Z_1 + Z_2\Big)^2 \left[\ln\frac{t}{t-1} - \frac{1}{t} - \frac{1}{2t^2} - \frac{1}{3t^3}\right],$$

$$t = 1 + \alpha r/a, \qquad \alpha = \frac{1}{2}\left(\frac{\pi}{8}\right)^{2/3},$$

m — масса электрона.

Вычисляя в (2) интеграл и вводя вместо r безразмерную переменную $x = a/r$, а вместо энергии E — безразмерную энергию Линдхарда ε, получаем

$$\frac{V_0}{E}\int F(r)dr = \gamma I(x)/\varepsilon^{1/2},$$

$$I(x) = \frac{1}{x} \ln\left(1 + \frac{x}{\alpha}\right) + \frac{x^2}{2\alpha(\alpha + x)^2} - \frac{1}{\alpha + x},$$

$$\gamma = \frac{\hbar a^{3/2}}{\pi e a_0^2 \sqrt{2M}} \frac{(Z_1 + Z_2)^2}{\sqrt{Z_1 \cdot Z_2}}, \qquad a_0 = \hbar^2 / m e^2.$$

Для длины экранирования берем выражение [2]:

$$a = 0.8853 a_0 \Big/ \left(Z_1^{1/2} + Z_2^{1/2}\right)^{2/3}.$$

В итоге получаем

$$\gamma = 4.376 \cdot 10^{-3} \cdot f(Z_1, Z_2) \Big/ A^{1/2},$$

$$f(Z_1, Z_2) = \frac{(Z_1 + Z_2)^2}{(Z_1 \cdot Z_1)^2 \left(Z_1^{1/2} + Z_2^{1/2}\right)^{2/3}}.$$

Здесь M и A — приведенные масса и массовое число.

В интеграле рассеяния (1) также вводим безразмерные величины $x = a/r$, $\rho = p/a$ и энергию Линдхарда ε. Окончательно интеграл (1) принимает вид

$$\Psi = \rho \varepsilon^{1/2} \int_0^{x_0} \frac{dx}{\sqrt{\varepsilon(1 - \rho^2 x^2) - x\varphi(1/x) - \gamma \varepsilon^{1/2} I(x)}}. \tag{3}$$

Здесь x_0 — нуль подкоренного выражения, $\varphi(1/x)$ — функция экранирования.

Особенность на верхнем пределе в (3) легко устраняется: умножаем и делим подкоренное выражение на $x_0 - x$ и вводим новую переменную интегрирования $t^2 = x_0 - x$. После сокращения числителя и знаменателя на t остающееся подкоренное выражение при $t = 0$ (т.е. при $x = x_0$) уже отлично от нуля и равно

$$\left\{ \left[2\varepsilon\rho^2 + \varphi'_x(1/x)\right] x + \varphi(1/x) + \gamma \varepsilon^{1/2} I'_x(x) \right\}_{x = x_0}.$$

В таблице в качестве иллюстрации приведены значения углов рассеяния ионов H^+ на In для различных значений ρ (первая колонка) и трех значений ε: 0.1 (0.608), 1.0 (6.08) и 2.0 (12.16 КэВ). Для каждого значения ε приведены углы

Угол рассеяния, радианы						
ρ	$\varepsilon = 0.1$		$\varepsilon = 1.0$		$\varepsilon = 2.0$	
	$\gamma = 0$	$\gamma \neq 0$	$\gamma = 0$	$\gamma \neq 0$	$\gamma = 0$	$\gamma \neq 0$
1.0	1.85	2.13	0.554	0.760	0.308	0.447
2.0	1.00	1.44	0.182	0.384	0.0952	0.239
3.0	0.537	1.04	0.0748	0.267	0.0383	0.176
4.0	0.295	0.810	0.0357	0.214	0.0180	0.145
5.0	0.171	0.663	0.0191	0.183	0.0096	0.126

рассеяния при $\gamma = 0$ (без учета неупругих процессов) и при $\gamma \neq 0$ (с учетом неупругих процессов).

Из таблицы видно, что при $\rho = 1$ вклад неупругих процессов в полный угол рассеяния растет от 13% для $\varepsilon = 0.1$ до 33 для $\varepsilon = 2.0$; с ростом ρ до 5 для всех значений ε вклад неупругих процессов растет и при $\rho = 5$ он составляет 74% для $\varepsilon = 0.1$ и 92% для $\varepsilon = 2.0$. Таким образом, в данном конкретном случае околонулевые углы рассеяния формируются главным образом за счет неупругих процессов.

Вышеприведенные результаты приводят к необходимости сформулировать метод решения задачи учета неупругих процессов в ион-атомном соударении в постановке более общей, чем в [1].

В теории Фирсова исходным является равенство

$$\mathbf{F} = -m\dot{\mathbf{r}} \int \Phi dS = -F(r)v\mathbf{n}$$

(Φ — плотность потока электронов между ионом и атомом; $\mathbf{n}$ — единичный вектор направления движения иона), определяющее неупругую силу, действующую на протекающий мимо атома ион, как величину, пропорциональную скорости иона и направленную в сторону, противоположную направлению его движения. В общем же случае для силы, направленной против направления движения иона

$$\mathbf{F} = -F(r, v)\mathbf{n}.$$

Диссипативная функция равна, согласно [3],

$$D(r, v) = F(r, v) \cdot v/2.$$

Если направление действия силы и направление движения иона образуют некий произвольный угол, то вышеприведенное выражение для $D(r, v)$ необходимо умножить на косинус этого угла. Однако этот случай мы рассматривать не будем.

Обобщенные силы в уравнениях Лагранжа определяются равенствами [4]:

В аналитическом виде система (5) в общем случае не решается, поэтому при ее решении допустимы лишь численные алгоритмы. Но и в рамках численных алгоритмов в важном для нас случае малых углов рассеяния возможны некоторые упрощения.

При малых ϑ величина $\dot\vartheta$ также мала и правую часть второго уравнения в (5) можно либо разложить в ряд по $\dot\vartheta$, ограничившись первой степенью, либо представить ее линейным двучленом по $\dot\vartheta$, используя тау-метод Ланцоша [5], обеспечивающий наилучшее приближение. Вводя в качестве неизвестной функции величину $r^2\dot\vartheta$, имеем вместо второго уравнения в (5)

$$m\frac{d}{dt}(r^2\dot\vartheta) = -a(r,\dot r) - b(r,\dot r)\cdot r^2\dot\vartheta.$$

Решение этого уравнения имеет вид

$$Q_r = \partial D(r,v)/\partial\dot r, \qquad Q_\vartheta = \partial D(r,v)/\partial\dot\vartheta;$$

$$v = \sqrt{v_r^2 + v_\vartheta^2}, \quad v_r = \dot r, \quad v_\vartheta = r\dot\vartheta, \tag{4}$$

а уравнения Лагранжа принимают вид

$$m\ddot r = mr\dot\vartheta^2 - \frac{dU(r)}{dr} - Q_r(r,v);$$

$$\frac{d}{dt}(mr^2\dot\vartheta) = -Q_\vartheta(r,v). \tag{5}$$

$$\dot\vartheta = \frac{1}{r^2}\left[pV_0\, e^{-\frac{1}{m}\int\limits_0^t b[r(\tau),\dot r(\tau)]d\tau} - \frac{1}{m}\int\limits_0^t a\left[r(t'),\dot r(t')\right] e^{-\frac{1}{m}\int\limits_{t'}^t b[r(\tau),\dot r(\tau)]d\tau}\, dt'\right]. \tag{6}$$

Подставляя (6) в первое уравнение системы (5), получаем обыкновенное дифференциальное уравнение, численное решение которого — задача несравненно более простая, чем решение системы (5). Полагая в (6) $a(r,\dot r) = 0$ и $b(r,\dot r) = F(r)$, получаем случай, описываемый моделью Фирсова.

Список литературы

[1] *Потетюнко Г.Н.* // Письма ЖТФ. 1992. Т. 18. В. 8. С. 40.
[2] *Фирсов О.Б.* // ЖЭТФ. 1959. Т. 36. С. 1517.
[3] *Бухгольц Н.Н.* Основной курс теоретической механики. Ч. 1. М.: Наука, 1965. 467 с.
[4] *Терлецкий Я.П.* Теоретическая механика. М., 1987. 158 с.
[5] *Ланцош К.* Практические методы прикладного анализа. М., 1961. 524 с.

Ростовский государственный университет

Поступило в Редакцию
19 августа 1993 г.
В окончательной редакции
14 марта 1994 г.