Письма в ЖТФ, том 18, вып. 8 26 апреля 1992 г.

01; 02

ОБ УЧЕТЕ НЕУПРУГИХ ПРОЦЕССОВ В ТЕОРИИ ИОН-АТОМНОГО РАССЕЯНИЯ

Г.Н. Потетюнко

Ион-атомное рассеяние принято рассматривать как упругое рассеяние заряженной частицы на короткодействующем потенциале. В реальной же ситуации наряду с упругими имеют место еще и неупругие процессы; при этом установлено, что (см., например, [1-3]) потери энергии на неупругие процессы зависят от угла рассеяния. Естественно предположить, что имеет место и обратное влияние - неупругие процессы (наряду с упругими) влияют на угол рассеяния. Некоторые аспекты этой проблемы и рассматриваются в настоящей заметке. Имея в виду лишь оценку вышеуказанного влияния, ограничимся энергиями ионов, лежащими ниже максимума электронной тормозной способности вещества, и возьмем за основу теорию О.Б. Фирсова [4] потерь энергии на неупругие процессы.

Согласно модели О.Б. Фирсова сила, действующая на ион, движущийся по прямой помимо покоящегося атома на достаточно большом от него расстоянии, равна общему импульсу, перенесенному электронами при их максимальном сближении

$$\vec{F}=-m\dot{\vec{r}}\int\limits_S \Phi\, dS. \qquad (1)$$

Здесь $\dot{\vec{r}}$ - вектор относительной скорости иона и атома; Φ - плотность потока электронов между ионом и атомом; S - плоскость, проходящая через точку минимума потенциала, образованного сталкивающимися партнерами, перпендикулярно соединяющей их прямой и при $Z_1=Z_2$ делящая ее пополам. Согласно [4], для (1) имеем:

$$F=-\frac{m^2e^2\dot{\vec{r}}}{4\pi^2\hbar^3}\int\limits_S U^2(R)\,dS, \qquad (2)$$

где

$$U(R)=\frac{(Z_1+Z_2)e^2}{R}\,\varphi\left(\frac{R}{a}\right); \qquad (3)$$

R - расстояние от точки на плоскости до одного из ядер; для функции экранирования $\varphi(R/a)$ О.Б. Фирсовым берется аппроксимация Титца [5]:

$$\varphi\left(\frac{R}{a}\right)=\frac{1}{\left(1+\left(\frac{\pi}{8}\right)^{2/3}\frac{R}{a}\right)^2}. \qquad (4)$$

Погрешность аппроксимации (4) по сравнению, например, с потенциалом WHB составляет 17.5% для $R/a=1$ и уменьшается до 5% с ростом R/a до 5, что для оценки вполне достаточно.

Вычисляя с учетом (3) и (4) входящий в (2) интеграл, получаем:

$$\left.\begin{aligned}
&\vec{F}=-F(r)\,\dot{\vec{r}}\,;\\
&F(r)=\frac{m^2e^4}{2\pi\hbar^3}\left(Z_1+Z_2\right)^2\left[\ln\frac{t_0}{t_0-1}-\frac{1}{t_0}-\frac{1}{2t_0}-\frac{1}{3t_0^3}\right];\\
&t_0=1+\frac{1}{2}\left(\frac{\pi}{8}\right)^{2/3}\frac{r}{a}.
\end{aligned}\right\} \qquad (5)$$

Соответствующие уравнения Лагранжа с учетом диссипативных сил имеют вид:

$$\left.\begin{aligned}
&m\ddot{r}=mr\dot{\vartheta}^2-\frac{dU(r)}{dr}-F(r)\dot{r}\,;\\
&\frac{1}{r}\frac{d}{dt}\left(mr^2\dot{\vartheta}\right)=-F(r)\,r\dot{\vartheta}.
\end{aligned}\right\}. \qquad (6)$$

Решение второго уравнения в (6) находится элементарно:

$$\dot{\vartheta}=\frac{C}{mr^2}\,e^{-\frac{F(r)t}{m}}. \qquad (7)$$

Константу C в решении (7) находим из следующего условия: при $F(r)=0$ должен получиться известный результат, что дает

$$C=m\rho V_0, \qquad (8)$$

где ρ – прицельное расстояние; V_0 – начальная скорость.

С учетом (7) и (8) первое уравнение в (6) принимает вид

$$m\ddot{r}=\frac{2\rho^2E_0}{r^3}\,e^{-2F(r)t/m}-\frac{dU(r)}{dr}-F(r)\cdot\dot{r}. \qquad (9)$$

При получении уравнения (9) мы использовали лишь тот факт, что тормозящая сила $\vec{F}$ пропорциональна вектору скорости $\dot{\vec{r}}$ (см. (5)); это условие и определяет область его применяемости.

В общем случае уравнение (9) поддается лишь численному интегрированию, что не входит, однако, в нашу задачу. Но в некоторых частных случаях возможны достаточно корректные приближения и уравнение (9) может быть проинтегрировано аналитически. При больших прицельных расстояниях (а теория О.Б. Фирсова только в этом случае и справедлива) изменением скорости иона в процессе его прохождения мимо атома можно пренебречь, что позволяет в последнем слагаемом в (9) положить

$$\dot{r} = V_0 . \tag{10}$$

Кроме того, показатель экспоненты $2F(r)t/m$ в (9) заметно отличен от нуля лишь в случае больших Z_1 и Z_2 и достаточно низких энергий (ниже $V_0/v_0 \approx 1$; v_0 – скорость Бора). В остальных случаях он имеет величину порядка $10^{-2}-10^{-4}$ и экспонентой можно пренебречь. Окончательно в этих случаях уравнение (9) принимаеи вид

$$m\ddot{r} = \frac{2\rho^2 E_0}{r^3} - \frac{dU(r)}{dr} - F(r)\cdot V_0 . \tag{11}$$

Вводим в (11) эффективный потенциал согласно равенству

$$\frac{dW(r,E_0)}{dr} = \frac{dU(r)}{dr} + F(r)\cdot V_0 \tag{12}$$

и в итоге получаем стандартный вид классической задачи рассеяния с той лишь разницей, что на этот раз потенциал $W(r, E_0)$ зависит также и от энергии E_0 в соответствии с (10).

Сравним численные значения обоих слагаемых в правой части в (12). Будем сравнивать их в точке наибольшего сближения между ионом и атомом, когда расстояние между ними с хорошей точностью равно прицельному расстоянию ρ. Для этого случая имеем:

$$\frac{dU(r)}{dr} = \frac{392}{a_0} F_S(Z_1,Z_2)\frac{1+1.608\rho}{\rho^2(1+0.536\rho)^3}\ \frac{\text{эВ}}{\text{нм}} ; \tag{13}$$

$$F(r) = \frac{136}{\pi a_0} F_e(Z_1,Z_2)\frac{V_0}{v_0}\times$$

$$\times\left[\ln\frac{t_0}{t_0-1} - \frac{1}{t_0} - \frac{1}{2t_0^2} - \frac{1}{3t_0^3}\right]\frac{\text{эВ}}{\text{нм}} . \tag{14}$$

Численные значения упругой и неупругой компонент в равенстве (12) (множители F_s и F_e в (13) и (14) опущены; V_0/v_0 =1)

ρ	Упругая компонента, эВ/нм	Неупругая компонента, эВ/нм
1	531.1	23.8
2	87.3	8.0
3	26.8	3.6
4	11.0	1.8
5	5.4	1.0
6	2.9	0.55
7	1.7	0.26
8	1.1	0.24
9	0.72	0.21

Здесь a_0 – радиус Бора; $\rho = p/a$:

$$t_0 = 1 + 0.536\rho;$$

$$F_s(Z_1, Z_2) = (Z_1 + Z_2)^2;$$

$$F_e(Z_1, Z_2) = Z_1 Z_2 \left(Z_1^{1/2} + Z_2^{1/2}\right)^{4/3}.$$

В таблице представлены численные значения упругой и неупругой компонент в (12), посчитанные по формулам (13) и (14) соответственно без множителей $F_s(Z_1, Z_2)$ и $F_e(Z_1, Z_2)$ для V_0/v_0 =1.

Из таблицы видно, что при $\rho > 1$ неупругая компонента по своей величине соизмерима с упругой и должна учитываться наряду с последней. При уменьшении ρ от единицы до нуля обе компоненты растут, но упругая компонента растет значительно быстрее неупругой и в этой области ρ доминирует во взаимодействии. Учет множителей F_s, F_e и V_0/v_0 несколько деформирует количественную картину, ничего не меняя в качественном плане.

Список литературы

[1] Iferov G.A., Zhukova Y.N. // Phys. Stat. Sol. (b). 1982. V. 110. P. 653.

[2] Ishiwari R., Shiomi N., Sakamoto N. // Phys. Rev. A. 1984. V. 30. P. 82.

[3] Eckardt Y.C., Lanotshnev G.H., Yakas M.M., Ponce V.H.//Nud. Ynsfr. Meth. B. 1984. V. 2. P. 168.

[4] Ф и р с о в О.Б. // ЖЭТФ. 1959. Т. 36. С. 1517.
[5] T i t z T. // Nuovo Cim. 1955. V. 1. P. 955.

Поступило в Редакцию
9 марта 1992 г.