Журнал технической физики, 2015, том 85, вып. 4

01

Потери энергии при столкновении заряженных частиц с осциллятором

© Д.Н. Макаров

Северный (Арктический) федеральный университет им. М.В.Ломоносова,
163002, Архангельск, Россия
e-mail: makarovd0608@yandex.ru

(Поступило в Редакцию 16 июня 2014 г.)

Рассмотрены потери энергии быстрых заряженных частиц при столкновениях с осциллятором в дипольном приближении. В этом приближении задача решается точно и находятся потери энергии осциллятора из начального состояния $|m\rangle = |0\rangle$ в виде суммы одномерных интегралов. Показано, что можно в предельном переходе получить теорию Бете для атома при малости возмущений, а в случае сильных полей поправку к теории Бете, аналогичную поправке Блоха, кроме того, возможен классический предел, совпадающий с формулой Бора.

Введение

В настоящее время существует большое количество теорий по потерям энергии при столкновении быстрых заряженных частиц с атомами [1]. Например, в обзорной работе [1], которая состоит из различных подходов и методов, потери энергии представлены как теория Бете с различного рода поправками $\kappa = 4\pi(Z/v)^2 L$, где Z, v — соответственно заряд налетающей частицы и ее скорость, а $L = \ln(2v^2/I) + \Delta L^{\text{Bloch}} + \Delta L^{\text{Shell}} + \Delta L^{\text{Barkas}}$, где I — ионизационный потенциал рассматриваемого атома, ΔL^{Bloch} — поправка Блоха, которая является непертурбативной поправкой [2–7], ΔL^{Shell} — поправка к первому порядку теории возмущений [1,8,9], корректирующая теорию Бете, которая получена в предположении, что $v \gg v_a$, где $v_a \approx 1$ — атомная скорость электрона, ΔL^{Barkas} — поправка Баркаса [1,10–12], которая получена в следующих порядках теории возмущений и учитывает поляризацию атома при взаимодействии с налетающей частицы (здесь и везде далее используется атомная система единиц). В этих теориях активно используются подходы, в которых атом рассматривается как квантовый осциллятор с частотой ω и обычно ее считают равной потенциалу ионизации атома $\omega = I$ [9,11]. В целом подходы, где атом заменяется осциллятором, основаны на том, что для атома даже в теории возмущений не удается получить выражения, которые уточняли бы теорию Бете, т.е. давали поправки к ней, для осциллятора такие уточнения можно сделать. Рассматривая атом как осциллятор и используя теорию возмущений, можно получить, хотя и не в аналитическом виде, поправки к теории Бете [1,9,11], в частности это оболочечная поправка и поправка Баркаса. Большим недостатком этих теории является то, что поправки рассчитываются, используя теорию возмущений, которой, конечно, нельзя пользоваться при $v \approx v_a$, так как при этих скоростях параметр $Z/v \approx 1$ либо $Z/v \gg 1$ для тяжелых ионов. Поэтому область скоростей, где $v \approx v_a$, остается мало исследованной, и для того, чтобы ее изучать, нужны непертурбативные методы, причем эйконал и приближение внезапных возмущений здесь не подойдет, так как в этих приближениях считается, что $v \gg v_a$ [13]. Поэтому исследование потерь энергии возможно только при использовании точных модельных методов, один из которых представлен в этой работе.

Постановка решаемой задачи. Метод решения

Рассмотрим 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

$$i\,\frac{\partial \Psi}{\partial t} = \left(-\frac{\Delta}{2} + \frac{\omega^2 r^2}{2} - \frac{Z}{|\mathbf{R}-\mathbf{r}|} + \frac{Z}{|\mathbf{R}|}\right)\Psi, \qquad (1)$$

где $\Delta = \partial^2/\partial x^2 + \partial^2/\partial y^2 + \partial^2/\partial z^2$, $r^2 = x^2 + y^2 + z^2$, x, y, z — координаты электрона, $\mathbf{R} = \mathbf{b} + \mathbf{v}t$, $\mathbf{b}$ — параметр удара, t — время, $\mathbf{v}$ — скорость налетающей частицы. Уравнение (1) точно решить нельзя, поэтому рассмотрим его в дипольном приближении, т. е. $R \gg r$, тогда его можно представить как

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

Следует сказать, что мы пренебрегли оператором $-\frac{\Delta(\mathbf{R})}{2}$, это действительно можно сделать, так как мы рассматриваем нейтральный атом, и взаимодействие ядра с налетающей частицей на больших расстояниях мало, а на малых расстояниях время взаимодействия слишком мало, чтобы две массивные частицы отклонились на заметный угол. Уравнение такого вида (2) решено [14]. Обобщив результат в [14] на случай трехмерного осциллятора [15], получим амплитуду перехода из начальных квантовых состояний m_x, m_y, m_z в конечные n_x, n_y, n_z при $n_x \geq m_x$, $n_y \geq m_y$, $n_z \geq m_z$ [16]

$$|a_{n,m}|^2 = \frac{m_z! m_x! m_y!}{n_z! n_x! n_y!}\left(\frac{|Q_z|^2}{2\omega}\right)^{n_z-m_z} \times \left(\frac{Q_x^2}{2\omega}\right)^{n_x-m_x}\left(\frac{Q_y^2}{2\omega}\right)^{n_y-m_y},$$

$$\left(L_{m_z}^{n_z-m_z}\left(\frac{|Q_z|^2}{2\omega}\right)\right)^2\left(L_{m_x}^{n_x-m_x}\left(\frac{Q_x^2}{2\omega}\right)\right)^2 \times \left(L_{m_y}^{n_y-m_y}\left(\frac{Q_y^2}{2\omega}\right)\right)^2 \exp\left(-\frac{\mathbf{QQ}^*}{2\omega}\right), \quad (3)$$

где

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

$\mathbf{k}$ — единичная орта, K_0 и K_1 — функции Макдональда, * — комплексное сопряжение, $|x|^2 = xx^*$, L_b^a — полином Лагерра. Аналогично получается 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 замены в выражении (3) на $m_x \to n_x, n_x \to m_x, m_y \to n_y, n_y \to m_y, m_z \to n_z, n_z \to m_z$. 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: $q(x) = \theta(x) - \theta(-x)$, которая $g(x) = \{1, x > 0;\ 0,\ x = 0;\ -1,\ x < 0\}$, $\theta(x)$ — тэта-функция Хевисайда, тогда

$$|a_{n,m}|^2 = \exp\left(-\frac{1}{2\omega}\mathbf{QQ}^*\right)\left(\frac{m_z!}{n_z!}\right)^{g(n_z-m_z)} \times \left(\frac{m_x!}{n_x!}\right)^{g(n_x-m_x)}\left(\frac{m_y!}{n_y!}\right)^{g(n_y-m_y)},$$

$$\left(\frac{|Q_z|^2}{2\omega}\right)^{(n_z-m_z)g(n_z-m_z)}\left(\frac{Q_x^2}{2\omega}\right)^{(n_x-m_x)g(n_x-m_x)} \times \left(\frac{Q_y^2}{2\omega}\right)^{(n_y-m_y)g(n_y-m_y)} L, \quad (4)$$

где

$$L = \left(L_{1/2(m_z+n_z+(m_z-n_z)g(n_z-m_z))}^{(n_z-m_z)g(n_z-m_z)}\left(\frac{|Q_z|^2}{2\omega}\right)\right)^2 \times \left(L_{1/2(m_x+n_x+(m_x-n_x)g(n_x-m_x))}^{(n_x-m_x)g(n_x-m_x)}\left(\frac{Q_x^2}{2\omega}\right)\right)^2 \times \left(L_{1/2(m_y+n_y+(m_y-n_y)g(n_y-m_y))}^{(n_y-m_y)g(n_y-m_y)}\left(\frac{Q_y^2}{2\omega}\right)\right)^2.$$

Потери энергии

Известно, что потери энергии (эффективное торможение) из основного состояния находятся [13] как:

$$\kappa = \sum_{\text{All}}(\varepsilon_n - \varepsilon_0)\sigma_{n,0} = \sum_{n,0}(\varepsilon_n - \varepsilon_0)\int\limits_{b_{\min}\leq b\leq b_{\max}} d^2b|a_{n0}|^2, \quad (5)$$

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

$$|a_{n,0}|^2 = \exp\left(-\frac{1}{2\omega}\mathbf{QQ}^*\right)\frac{1}{n_z! n_x! n_y!}\left(\frac{|Q_z|^2}{2\omega}\right)^{n_z} \times \left(\frac{Q_x^2}{2\omega}\right)^{n_x}\left(\frac{Q_y^2}{2\omega}\right)^{n_y}. \quad (6)$$

Просуммировать выражение (5) напрямую нельзя, так как $b_{\max}$ зависит от n, характер зависимости покажем ниже. Можно увидеть, что, заменив одно квантовое число, например $n_z = n - n_x - n_y$, и соответственно заменив сумму в (5) на

$$\sum_{\text{All}} = \sum_{n_x=0}^{n_x^{\max}}\sum_{n_y=0}^{n_y^{\max}}\sum_{n_z=0}^{n_z^{\max}} = \sum_{n=0}^{n^{\max}}\sum_{n_y=0}^{n}\sum_{n_x=0}^{n-n_y}, \quad (7)$$

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

$$\kappa = \omega\sum_{n=0}^{n^{\max}} n \int\limits_{b_{\min}\leq b\leq b_{\max}} \sum_{n_y=0}^{n}\sum_{n_x=0}^{n-n_y}\frac{\exp\left(-\frac{1}{2\omega}\mathbf{QQ}^*\right)}{(n-n_x-n_y)! n_x! n_y!} \times \left(\frac{|Q_z|^2}{2\omega}\right)^{n-n_x-n_y}\left(\frac{Q_x^2}{2\omega}\right)^{n_x}\left(\frac{Q_y^2}{2\omega}\right)^{n_y} d^2b, \quad (8)$$

в результате после суммирования получим

$$\kappa = \omega\sum_{n=0}^{n^{\max}}\frac{n}{n!}\int\limits_{b_{\min}\leq b\leq b_{\max}} \exp\left(-\frac{1}{2\omega}\mathbf{QQ}^*\right) \times \left(\frac{1}{2\omega}\mathbf{QQ}^*\right)^n d^2b, \quad (9)$$

$\frac{\mathbf{QQ}^*}{2}$ является классической энергией переданной электрону при столкновении [9,17]. Для дальнейших расчетов удобно интегрировать не по b, а сделать замену переменных $y = \frac{\omega}{v} b$, которая является безразмерной величиной. Далее нужно определить $y_{\min}, y_{\max}$. Как было сказано ранее, минимальному параметру удара соответствует максимально переданная энергия (импульс), известно, что этой энергии соответствует $E_{\max} = 2v^2$ [13], тогда $2v = Q_{\max}$. Аналогично и для максимального параметра удара, который соответствует минимальной переданной энергии (импульсу), тогда $\omega n/v = Q_{\min}$ и $E_{\min} = Q_{\min}^2/2$ [13]. Также можно найти и $n^{\max}$, как было сказано выше из условия $E_{\max} = E_{\min}(n^{\max})$, а это $n_{\max} = [2v^2/\omega]$, где $[2v^2/\omega]$ следует понимать как наименьшее целое число, полученное при округлении $2v^2/\omega$. В итоге, решая численно уравнения

$$\left(\frac{Z\omega}{v^3}\right)^2 \left(K_1^2(y_{\min}) + K_0^2(y_{\min})\right) = 1, \qquad (10)$$

$$\left(\frac{2Z}{vn}\right)^2 \left(K_1^2(y_{\max}) + K_0^2(y_{\max})\right) = 1, \qquad (11)$$

найдем $y_{\min} = y_{\min}\left(\frac{Z\omega}{v^3}\right)$, а также $y_{\max} = y_{\max}\left(\frac{2Z}{vn}\right)$. В итоге выражение (9) запишем

$$\kappa = 2\pi \frac{v^2}{\omega} \sum_{n=0}^{\max} \frac{n}{n!} \int_{y_{\min}}^{y_{\max}} \exp\left(-\frac{1}{2\omega}\mathbf{QQ}^*\right) \times \left(\frac{1}{2\omega}\mathbf{QQ}^*\right)^n y dy. \qquad (12)$$

При расчетах потерь энергии выражением (12) пользоваться не удобно, поэтому сделав замену переменных на $x = \frac{\mathbf{QQ}^*}{2\omega} == 2\frac{Z\omega}{v^3}\frac{Z}{v}(K_1^2(y) + K_0^2(y))$, получим для потерь энергии

$$\kappa = \pi \frac{a}{b} \sum_{n=0}^{[a]} \frac{n}{n!} \int_{n^2/a}^{a} \exp(-x)x^n F(x/b)dx, \qquad (13)$$

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

$$F(x) = \frac{y(x)}{K_1(y(x))\,(3K_0(y(x)) + K_2(y(x)))}, \qquad (14)$$

где $y(x)$ находится при численном решении уравнения $x = K_1^2(y) + K_0^2(y)$. Представим решение этого уравнения следующей функцией $F(x)x^2$, график которой изображен на рис. 1. Выражение (13) является окончательным при расчетах потерь энергии с $m = 0$ состояния.

Также следует сказать о применимости рассмотренного подхода. Рассмотренный метод не учитывает поляризационную поправку(поправка Баркаса), которая появляется, если не использовать дипольное разложение, хотя эта проблема решается, используя работы других авторов, например [8], прибавляя поляризационную поправку к нашему результату. Несмотря на то, что в решении используются точные амплитуды, из (13) видно, что максимально возможный переданный импульс

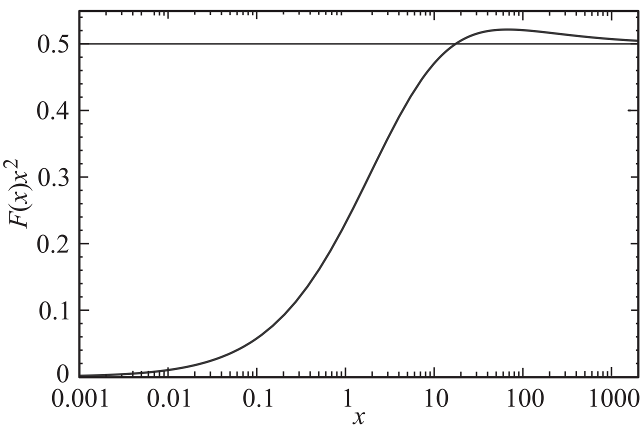

Рис. 1. Представлена зависимость величины $F(x)x^2$ в выражении (13), получаемая при численном решении уравнения (14).

больше минимально переданного, когда выполняется условие $a > n^2/a$, а суммирование в (13) ведется, начиная с $n = 1$, получим, что минимальное целое значение $[a] = 1$, значит, $a = \frac{2v^2}{\omega} > 1$. В итоге получим условие применимости рассмотренного подхода по скоростям $\frac{2v^2}{\omega} > 1$.

Теория возмущений

Обычно при расчетах потерь энергии используют предельные случаи [17–19], которые получаются при соответствующих для этих пределов предположениях. Поэтому необходимо рассмотреть их и определить более точные границы использования этих выражений. Рассмотрим сначала случай теории возмущений $Z/v \ll 1$.

Для того чтобы получить этот предельный случай, рассмотрим $F(x/b)$ в (13). Представим выражение (13) после замены переменных $z = x/b$ как $\kappa = 4\pi\eta^2 L$, где $\eta = \frac{Z}{v}$, а

$$L = \sum_{n=0}^{[a]} \frac{n}{n!b} \int_{n^2/(4\eta^2)}^{(v^2/(\omega\eta))^2} \exp(-zb)(zb)^n F(z)dz, \qquad (15)$$

где видно, что при $\eta \ll 1$ нужно $F(z)$ брать при больших z. Судя по рис. 1, можно увидеть, что $F(z)z^2 \to 1/2$, $z \gg 1$, это действительно можно показать и аналитически (Приложение 1). В итоге в первом порядке теории возмущений, перейдя обратно к переменной x, получим

$$L = 1/2 \sum_{n=0}^{[a]} \frac{n}{n!} \int_{n^2/a}^{a} \exp(-x)x^{n-2}dx. \qquad (16)$$

Похожее выражение в случае теории возмущений было получено в [9] при $a \gg 1$ и не нуждается в детальном разборе. Стоит сказать, что большие $a \gg 1$ соответствуют большим скоростям, и при этих a из (16) можно получить формулу Бете с аналитически выраженной оболочечной поправкой, используя асимптотическое разложение (16) при больших a [9]. Можно заметить, что в (16) подынтегральная функция берется аналитически [20], тогда

$$L = \sum_{n=0}^{[a]} \frac{\Gamma(-1+n, n^2/a) - \Gamma(-1+n, a)}{2(n-1)!}. \qquad (17)$$

Классический предел и формула Бора. Непертурбативная поправка к формуле Бете и поправка Блоха

Обычно при расчетах потерь энергии используют теорию Бете с поправкой Блоха и формула носит название формула Бете–Блоха. Покажем, что при рассмотрении представленной теории можно выделить поправку, аналогичную поправке Блоха. Следует сказать, что эту поправку можно выделить только в случае больших скоростей (много больше атомных $v_a \approx 1$). В общем виде (т.е. не только при больших скоростях) эти поправки выделить нельзя, и нужно пользоваться только формулой (13). Рассмотрим выражение (13). При $\omega/v^2 \ll 1$, $a \gg 1$ а коэффициент $b = 2(Z/v)^2\omega/v^2$ будем считать произвольным, так как $(Z/v)^2$ может принимать большие значения. Разобьем выражение (13) на четыре выражения $\kappa = k_1 - k_2 - k_3 - k_4$, где

$$\kappa_1 = \pi \frac{a}{b} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{n}{n!} \int_0^a \exp(-x) x^n F(x/b) dx, \qquad (18)$$

$$\kappa_2 = \pi \frac{a}{b} \sum_{n=[a]}^{\infty} \frac{n}{n!} \int_0^a \exp(-x) x^n F(x/b) dx, \qquad (19)$$

$$\kappa_3 = \pi \frac{a}{b} \int_0^{1/a} \exp(-x) x F(x/b) dx, \qquad (20)$$

$$\kappa_4 = \pi \frac{a}{b} \sum_{n=2}^{[a]} \frac{n}{n!} \int_0^{n^2/a} \exp(-x) x^n F(x/b) dx. \qquad (21)$$

Результатом суммирования выражения (18) и после замены переменных на $x/b = z$ получится $\kappa_1 = \pi ab \int_0^{a/b} zF(z)dz$, удобнее оставить это выражение в таком виде. Далее рассмотрим выражение (20), можно увидеть, что при $a \gg 1$ в подынтегральном выражении $\exp(-x) = 1$, тогда после замены переменных на $x/b = z$ получится

$$\kappa_1 + \kappa_3 = \pi ab \int_{\frac{1}{ab}}^{a/b} zF(z)dz. \qquad (22)$$

Можно увидеть, что κ_2, κ_4 будут стремиться к нулю при $a \gg 1$. В итоге, опуская пренебрежимо малые члены, получим $\kappa = 4\pi(Z/v)^2 L$, где

$$L = \int_{(v/2Z)^2}^{(v^3/Z\omega)^2} zF(z)dz. \qquad (23)$$

Из формулы (23) можно получить и классический результат (формулу Бора) и результат теории возмущения (формулу Бете). Действительно при $\hbar \to 0$ (так как в системе СГС $a = \frac{2mv^2}{\hbar\omega}$, $b/a = \frac{Z\omega e^2}{mv^3}$, $ab = (\frac{2Ze^2}{\hbar v})^2$) нижний предел в (23) будет стремиться к нулю и, перейдя опять к переменным y, которые использовались выше, получим классическую формулу для потерь энергии [18]

$$\kappa_{cl} = 4\pi \left(\frac{Z}{v}\right)^2 y_0 K_0(y_0) K_1(y_0), \qquad (24)$$

$$\left(\frac{Z\omega}{v^3}\right)^2 \left(K_1^2(y_0) + K_0^2(y_0)\right) = 1, \qquad (25)$$

а при условии Бора $\frac{Z\omega}{v^3} \ll 1$ сводится к формуле Бора, $k_{cl} = 4\pi(Z/v)^2 \ln(\frac{1.123v^3}{Z\omega})$ [17]. При переходе в теорию возмущений $Z/v \ll 1$ интеграл в (23) берется при больших z, где $F(z) = 1/(2z^2)$, после чего несложно получить формулу Бете. Далее рассмотрим переход в теорию Бете–Блоха, для этого рассмотрим формулу (23). Разобьем ее на два выражения, для этого представим в виде $\int_{(v/2Z)^2}^{(v^3/Z\omega)^2} = \int_0^{(v^3/Z\omega)^2} - \int_0^{(v/2Z)^2}$. После чего представим L как $L = \ln(2v^2/\omega) + \Delta L_1 + \Delta L_2$, предварительно найдя асимптотику интеграла (23) при больших пределах интегрирования (Приложение 2), где

$$\Delta L_1 = -I(2\eta) - \ln(\eta e^{\gamma}), \qquad (26)$$

$$\Delta L_2 = I\left(\frac{Z\omega}{v^3}\right) - \ln\left(\frac{2e^{-\gamma}v^3}{Z\omega}\right), \qquad (27)$$

где $I(y) = \int_0^{1/y^2} zF(z)dz$, γ — постоянная Эйлера. Поправку ΔL_1 можно считать непертурбативной поправкой. Хотя принято [2–4] считать непертурбативной поправкой $\Delta L^{\mathrm{Bloch}} = \Psi(1) - \mathrm{Re}\Psi(1 + i\eta)$ — поправку Блоха, где $\Psi(x)$ — логарифмическая производная гамма-функции, которая получается в приближении свободного электрона. Из рис. 2 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 обусловлена тем, что здесь рассматривается дипольное приближение. Представим графически (так как каждая поправка зависит от одного параметра) $\Delta L_1 = \Delta L_1(\eta)$ (изображена на рис. 2), также $\Delta L_2 = \Delta L_2(\frac{v^3}{Z\omega})$ (рис. 3). Откуда видно, что при $\eta > 1/2$ поправка $\Delta L_1 \gg \Delta L_2$, тогда

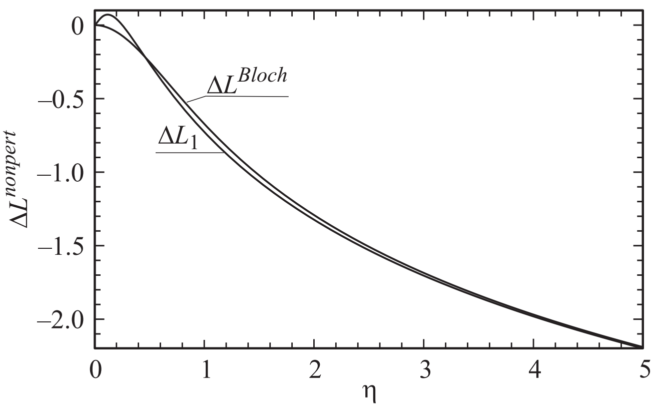

Рис. 2. Представлена зависимость величины ΔL_1 в выражении (26) и поправки Блоха.

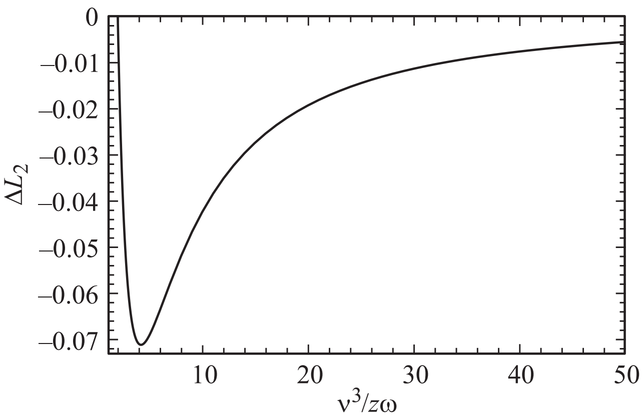

Рис. 3. Представленна зависимость величины ΔL_2 в выражении (27).

$L = \ln(2v^2/\omega) + \Delta L_1 \approx \ln(2v^2/\omega) + \Delta L^{\text{Bloch}}$ (с точностью до нескольких процентов), т. е. потери энергии практически совпадают с теорией Бете–Блоха (если ω принять за потенциал ионизации I [1]). Другими словами, с неплохой точностью (несколько процентов) во всех пределах параметра η наша теория при больших скоростях $v \gg v_a$ совпадает с потерями энергии на атоме в теории Бете–Блоха. Поправка ΔL_2 дает небольшой вклад, и ее можно не учитывать.

Заключение

Таким образом, развита теория по расчету 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. Причем в предельных случаях получается формула Бете с оболочечной поправкой — случай малости возмущения, формула Бете–Блоха — в случае непертурбативного рассмотрения и формула Бора — классический предел. Предельные случаи выполняются, когда скорость иона много больше атомных скоростей, когда же скорость сравнима с атомными скоростями, то такое разделение на поправки неприемлемо и нужно пользоваться точным выражением (13). Полученные результаты легко обобщить на случай многоэлектронного атома, для этого надо выражение (13) умножить на число электронов в атоме N_a и заменить $\omega = I$ [9].

Приложения

Приложение 1. Покажем, что $\lim_{z\to\infty} F(z)z^2 = 1/2$, где $F(z)$ — функция, определенная согласно (14). Так как переменная z находится при численном решении $z = K_1^2(y) + K_0^2(y)$, явно $y = y(z)$ не выразить, но нам нужна z при больших значениях, тогда несложно увидеть, что при этих значениях $z = 1/y^2$, отсюда $y = 1/z^{1/2}$, которую подставим в (14), в итоге

$$F(z)|_{z\to\infty} = \frac{1}{z^{1/2}K_1\left(z^{-1/2}\right)\left(3K_0(z^{-1/2}) + K_2(z^{-1/2})\right)}, \tag{28}$$

после чего воспользуемся формулами [16]

$$K_2(x) = 2/xK_1(x) + K_0(x), \quad \frac{dK_0(x)}{dx} = -K_1(x),$$

а также [21],

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

тогда получим, что

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

В итоге, подставив эти выражения в (28), получим

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

Приложение 2. Найдем асимптотическое значение интеграла

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

при больших значениях параметра a_1. Перейдем обратно к переменной y, используя (14), тогда получится

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

похожий интеграл рассчитан в [18] $J = y_0K_0(y_0)K_1(y_0)$, где y_0 — решение уравнения

$$\left(\frac{1}{a_1}\right)^2 \left(K_1^2(y_0) + K_0^2(y_0)\right) = 1 \tag{29}$$

при $a_1 \to \infty$, $y_0 \to 0$. Воспользовавшись асимптотиками для $K_1(y_0)$, $K_0(y_0)$, описанными в Приложении 1, получим

$$J|_{a_1\to\infty} = \ln(2e^{-\gamma}a_1), \tag{30}$$

где γ — постоянная Эйлера.

Список литературы

[1] *Ziegler J.F.J.* Appl. Phys // Rev. Appl. Phys. 1999. Vol. 85. P. 1249.
[2] *Bloch F.* // Ann. der Phys. 1933. Vol. 16. P. 285.
[3] *Lindhard J., Sorensen A.* // Phys. Rev. A. 1996. Vol. 53. P. 2443.
[4] *Khodyrev V.* // J. Phys. B. 2000. Vol. 33. P. 5045.
[5] *Матвеев В.И., Макаров Д.Н., Гусаревич Е.С.* // Письма в ЖЭТФ. 2010. Т. 92. С. 317–323.
[6] *Матвеев В.И., Макаров Д.Н., Гусаревич Е.С.* // ЖЭТФ. 2011. Т. 139. С. 868–882.
[7] *Матвеев В.И., Макаров Д.Н.* // Письма в ЖЭТФ. 2011. Т. 94. С. 3–7.
[8] *Schinner A. and Sigmund P.* // Nucl. Instrum. Methods B. 2000. Vol. 164–165. P. 220.
[9] *Sigmund P., Haagerup U.* // Phys. Rev. A. 1986. Vol. 34. P. 892.
[10] *Barkas W.H., Birnbaum W., Smith F.M.* // Phys. Rev. 1956. Vol. 101. P. 778.
[11] *Hennig H.M., Sigmund P.* // Phys. Rev. A. 1989. Vol. 40. P. 101.
[12] *Khodyrev V.A.* // NIMB. 1996. Vol. 115. P. 332.
[13] *Ландау Л.Д., Лифщиц Е.М.* // Квантовая механика. М.: Наука. 1989. 768 с.
[14] *Базь А.И., Зельдович Я.Б., Переломов А.М.* // Рассеяние, реакции и распады в нерялитивистской квантовой механике. М.: Наука, 1971. 544 с.
[15] *Дыхне А.М., Юдин Г.Л.* // УФН. 1978. Т. 125. С. 377.
[16] *Прудников А.П., Брычков Ю.А., Маричев О.И.* // Интегралы и ряды. Специальные функции. М.: Наука, 1983. 752 с.
[17] *Бор Н.* // Избранные труды. М.: Наука. Т. 1. 1970. 584 с.
[18] *Sigmund P.* // Phys. Rev. A. 1996. Vol. 54. P. 3113.
[19] *Bethe H.A.* // Ann. Phys., Lpz. 1930. Vol. 5. P. 324.
[20] *Прудников А.П., Брычков Ю.А., Маричев О.И.* // Интегралы и ряды. Элементарные функции. М.: Наука, 1981. 800 с.
[21] *Грандштейн И.С., Рыжик И.М.* // Таблицы интегралов, сумм, рядов и произведений. М.: Физматгиз, 1963. 1100 с.