01;02

Аналитическая формула для поправки Баркаса в теории торможения заряженных частиц

© *Д.Н. Макаров, В.И. Матвеев, К.А Макарова*

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

Поступило в Редакцию 9 декабря 2014 г.

Непертурбативными методами нерелятивистской квантовой механики найдена поправка Баркаса в простом аналитическом виде при произвольных значениях заряда налетающего иона и скоростей столкновения, больших или сравнимых с атомными. В теорию вводится эффективный радиус взаимодействия, который взят из известной теории Бора по торможению быстрых заряженных частиц.

В настоящее время для расчетов ионизационных потерь энергии при столкновениях быстрых заряженных с атомами вещества обычно используют формулу Бете–Блоха со стандартными поправками [1–4], одной из которых является поправка Баркаса. Необходимость ее введения в теорию потерь энергии Бете–Блоха появилась в результате экспериментального обнаружения [5] разницы в несколько процентов между пробегами π^+- и π^--мезонов одинаковой энергии в фотоэмульсии. Пока поправка Баркаса мала, возможен ее численный расчет во втором порядке теории возмущений [6] в области ее применимости, т. е. при $Z/v \ll 1$, где Z — заряд налетающей на мишень частицы, v — ее скорость (здесь и везде далее используются атомные единицы). Но если рассматривать потери энергии не легких заряженных частиц, а тяжелых ионов, то эта поправка может давать большие (около 100% к теории Бете–Блоха) значения [1,7–10] и становится необходимым непертурбативное рассмотрение. Квантово-механического, точного непертурбативного решения этой проблемы нет и в настоящее время. Поэтому обычно поправка Баркаса там, где она существенна, рассчитывается с различными подгоночными параметрами или грубыми приближениями, используя классическую физику [5,7]. Квантово-механический расчет возможен лишь в простых случаях при численном решении уравнения

Шредингера [11]. Поправка Баркаса добавляет в формулу Бете–Блоха слагаемые, зависящие лишь от нечетных степеней заряда тормозящейся частицы. Поэтому часто используют модельные потенциалы взаимодействия иона с атомом, причем, если потенциалы короткодействующие, то рассчитанное точно эффективное торможение содержит как четные, так и нечетные степени заряда иона. Значит, именно слагаемые, зависящие нечетных степеней заряда, представляют поправку Баркаса, хотя и в этих случаях приходится численно решать уравнения Шредингера [12]. При выборе модельного потенциала вводится некоторый эффективный радиус взаимодействия α. Обычно (см., например, [10,12]) выбирается потенциал типа Юкавы и считается, что $\alpha = v/\omega$, где ω — характерная частота атома, v — скорость иона. Такой выбор α основан на совпадении потерь энергии на короткодействующем потенциале с параметром α с классической формулой Бора для потерь энергии при условии $Z/v^2 \ll 1$ и $\omega/v \ll 1$ [13]. Следует сказать, что потенциал Юкавы не является единственно возможным из короткодействующих, можно выбрать и другие потенциалы, качественно повторяющие поведение потенциала Юкавы и позволяющие без потери точности найти поправку Баркаса. Таким образом, из всех стандартных поправок к формуле Бете–Блоха, несмотря на ее широкое использование, именно поправка Баркаса относится к числу наименее изученных и не имеющих общепринятого представления.

В нашей работе будет выбран такой модельный потенциал, который методами квантовой механики позволяет аналитически найти поправку Баркаса и дает возможность просто ее рассчитывать без потери точности и без использования численного решения уравнения Шредингера. Найдена поправка Баркаса в простом аналитическом виде при произвольных значениях заряда иона и скоростей, больших и сравнимых с атомными.

Рассмотрим рассеяние электрона в области короткодействующего потенциала, более простого, чем потенциал Юкавы, что в итоге приведет к аналитическим выражениям. Выберем потенциал в виде [10]

$$V = \begin{cases} \dfrac{-Z}{r}\left(1 - \dfrac{r}{\alpha}\right), & r < \alpha, \\ 0, & r > \alpha, \end{cases} \tag{1}$$

где Z — заряд иона, параметр α — граница короткодействующего потенциала (эффективный радиус). Далее рассмотрим потери энергии на таком потенциале в квантовом случае. Используя известное [14] соотношение между эффективным торможением и транспортным сечением, легко представить тормозное число L в виде [15]

$$L = \frac{1}{\eta^2} \sum_{l=0}^{\infty} (l+1) \sin^2(\delta_l - \delta_{l+1}), \tag{2}$$

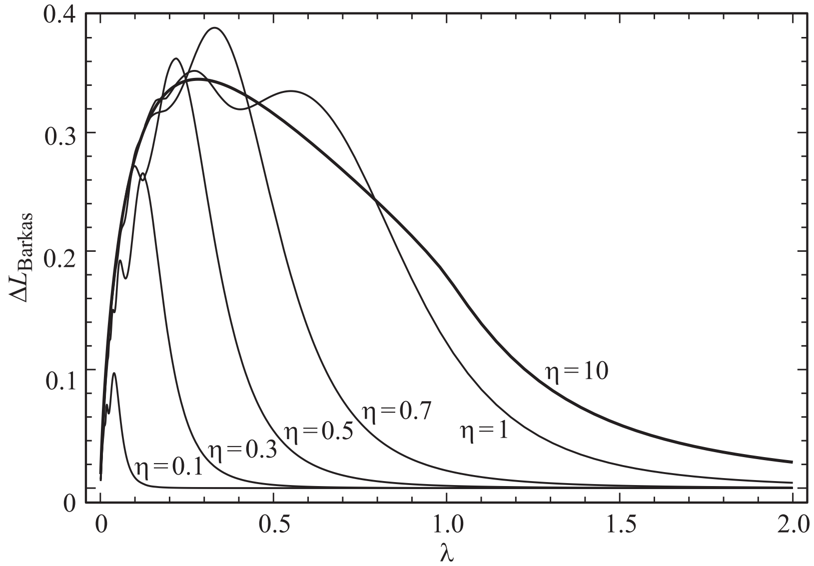
где $\eta = Z/v$ — кулоновский параметр, а δ_l — фазовый сдвиг. Также известно, что фазовый сдвиг на обрезанном потенциале с границей α можно представить так ([16,17], формула (3.44)):

$$\delta_l = \frac{j_l(v\alpha) - \frac{f}{v} j_l'(v\alpha)}{n_l(v\alpha) - \frac{f}{v} n_l'(v\alpha)}, \tag{3}$$

где $j_l(x)$ — сферические функции Бесселя, $n_l(x)$ — сферические функции Неймана, $j_l'(x) = dj_l(x)/dx$ и $n_l'(x) = dn_l(x)/dx$, а $f = (1/R_l)(dR_l/dr)$ — логарифмическая производная по координате r от $R_l(r)$ — радиальной волновой функции электрона на границе области действия потенциала, т. е. при $r = \alpha$, l — орбитальный момент импульса. Для того чтобы найти $R_l(r)$, не обязательно решать радиальное уравнение Шредингера, а достаточно воспользоваться известным результатом для кулонового поля, с той лишь разницей, что скорость v следует заменить на $v\sqrt{1-2\lambda}$, где $\lambda = Z/v^2\alpha$. Такая замена становится очевидна, если увидеть, что $V = -Z/r + Z/\alpha$, так что в нашем случае уравнение Шредингера не будет отличаться от уравнения для кулоновского потенциала, если энергию $E = v^2/2$ заменить на $v^2/2 - Z/\alpha$. В итоге радиальная волновая функция будет иметь вид

$$R_l(r) = c_l (2vr\sqrt{1-2\lambda})^l e^{(-ivr\sqrt{1-2\lambda})} \times F\left(1 + l + i\frac{\eta}{\sqrt{1-2\lambda}}; 2l+2; 2ivr\sqrt{1-2\lambda}\right), \tag{4}$$

где c_l — нормировочная константа, которая исчезает во входящей в формулу (3) функции f, а $F(a;b;y)$ — вырожденная гипергеометрическая функция. Используя формулы (2), (3) и (4), можно представить тормозное число L в виде довольно громоздкого ряда, суммирование которого удобно выполнить численно. Отметим, что полученное таким образом L является функцией от Z, т. е. $L = L(Z)$, содержащей как



Поправка Баркаса ΔL_{Barkas}, рассчитанная по формуле (5) в квантовом случае для одного электрона, как функция от безразмерного параметра $\lambda = Z/v^2\alpha$ при $\eta = (01, 0.3, 0.5, 0.7, 1, 10)$. Сплошная жирная линия показывает сливающиеся при всех $\eta > 10$ зависимости ΔL_{Barkas}, соответствующие классическому случаю.

четные, так и нечетные степени Z. Поправка Баркаса содержит лишь нечетные степени Z и выражается через $L(Z)$ следующим образом:

$$\Delta L_{\text{Barkas}} = \frac{L(Z) - L(-Z)}{2}. \tag{5}$$

Таким образом, рассчитав $L(Z)$ и $L(-Z)$, мы нашли значения поправки Баркаса. Как нетрудно заметить из формул (2), (3) и (4), ΔL_{Barkas} зависит от двух независимых безразмерных параметров $\lambda = Z/v^2\alpha$ и $\eta = Z/v$. На рисунке приведено поведение поправки Баркаса в зависимости от параметра λ при различных значениях η. Видно, что чем больше η, тем ближе были графики друг к другу. Мы не приводим графики для $\eta > 10$, поскольку в этих случаях графики сливаются с линией, соответствующей $\eta = 10$. Отметим, что $\eta \gg 1$ соответствует переходу в область классической физики при любых значениях λ

(действительно в системе СГС $\eta = Ze^2/\hbar v$, а $\lambda = Ze^2/mv^2\alpha$ не зависит от постоянной Планка $\hbar$). Причем наш результат при $\eta \gg 1$ совпадает с приведенными в [1] результатами расчетов поправки Баркаса методами классической механики. Как видно из рисунка, результаты квантового расчета довольно значительно отличаются от результатов расчетов методами классической механики. В принципе как указывалось ранее, точный квантовый расчет можно представить в виде суммы, где под знаком суммы стоит громоздкое аналитическое выражение, поэтому мы его не приводим. Для того чтобы найти простую аппроксимацию этого громоздкого аналитического выражения, нам понадобится решение поставленной задачи методами классической механики. В классическую область можно перейти используя предельный переход $\eta \to \infty$ в квантово-механическом решении, что крайне затруднительно сделать, но проще будет решить классическую задачу о рассеянии на таком потенциале. Эффективное торможение, рассчитываемое в рамках классической механики, обозначим как $\kappa^{cl} = 2v^2 \int \sin^2(\chi(b)/2) d^2\mathbf{b}$, где $\chi(b)$ — угол рассеяния, $\mathbf{b}$ — вектор параметра удара [14], $b = |\mathbf{b}|$. Проведя элементарные выкладки, получим

$$\kappa^{cl} = 4\pi \left(\frac{Z}{v}\right)^2 L^{cl}, \tag{6}$$

где классическое тормозное число равно

$$L^{cl} = \frac{1}{2(1-2\lambda)^2}\left(2\lambda - 1 + (\lambda - 1)^2 \ln\left(\frac{\lambda - 1}{\lambda}\right)^2\right), \tag{7}$$

а $\lambda = Z/v^2\alpha$. Далее, L^{cl} является функцией от Z, т.е. $L^{cl} = L^{cl}(Z)$, поэтому классическая поправка Баркаса равна

$$\Delta L^{cl}_{\mathrm{Barkas}} = \frac{L^{cl}(Z) - L^{cl}(-Z)}{2}. \tag{8}$$

Вернемся к результатам вышеописанного квантового расчета с использованием формул (2)–(5). В принципе этот метод получения поправки Баркаса не накладывает ограничения на скорость и заряд иона. Ограничимся областью скоростей иона, больших или сравнимых с атомными $v \geqslant 1$ и произвольными Z. В этом случае нам удалось подобрать аналитическую аппроксимацию квантового (5) расчета $\Delta L_{\mathrm{Barkas}}$

с неплохой (погрешность не превышает 5%) точностью

$$\Delta L_{\mathrm{Barkas}} = \Delta L^{cl}_{\mathrm{Barkas}} \frac{1 + \frac{\eta\lambda}{1+6\lambda^2} e^{-\eta}}{1 + \left(\frac{\lambda}{0.4\eta(1+1.5\eta)}\right)^{4.5} e^{-0.5\lambda^2\eta^2}}. \tag{9}$$

Причем из-за связи $\lambda = Z/v^2\alpha$ поправка $\Delta L_{\mathrm{Barkas}}$ зависит от эффективного радиуса взаимодействия — параметра $\alpha = v/\omega$.

Таким образом, нами найдена аналитическая формула для расчетов поправки Баркаса. Несмотря на то что полученная формула (9) является приближенной, она дает возможность быстро, не прибегая к численным расчетам, оценивать вклад поправки Баркаса в торможение быстрых заряженных частиц в веществе в широком диапазоне скоростей столкновения $v \geqslant 1$ и произвольных значениях заряда налетающего иона. Кроме того, известные теории по поправке Баркаса также являются приближенными, но их недостаток в сложности расчета и оценки [1]. Причем в известных теориях существуют аналитические аппроксимации поправки Баркаса, но для скоростей иона много больше атомных $v \gg 1$. В нашем же случае на скорость иона нет таких ограничений.

Работа выполнена в рамках КГЗ Министерства образования и науки РФ (№ 3.1726.2014/K).

Список литературы

[1] *Ziegler J. F.* // Rev. Appl. Phys. 1999. V. 85. P. 1249.
[2] *Матвеев В.И., Макаров Д.Н.* // Письма в ЖЭТФ. 2011. Т. 94. С. 3–7.
[3] *Матвеев В.И., Макаров Д.Н., Гусаревич Е.С.* // Письма в ЖЭТФ. 2010. Т. 92. С. 317–323.
[4] *Матвеев В.И., Макаров Д.Н., Гусаревич Е.С.* // ЖЭТФ. 2011. Т. 139. С. 868–882.
[5] *Barkas W.H., Dyer J.W., Heckman H.H.* // Phys. Rev. Letters. 1963. V. 11. P. 26.
[6] *Hennig H.M., Sigmund P.* // Phys. Rev. A. 1989. V. 40. P. 101.
[7] *Ashley J.C., Ritchie R.H., Brandt W.* // Phys. Rev. B. 1972. V. 5. P. 2393.
[8] *Jackson J.D., McCarthy R.L.* // Phys. Rev. B. 1972. V. 6. P. 4131.
[9] *Basko M.M.* // Eur. Phys. J. D . 2005. V. 32. P. 9.
[10] *Schinner A. and Sigmund P.* // Nucl. Instrum. Methods. B. 2000. V. 164–165. P. 220.
[11] *Miraglia J.E., Gravielle M.S.* // Phys. Rev. A. 2005. V. 72. P. 042 902.
[12] *Arista N.R., Sigmund P.* // Phys. Rev. A. 2007. P. 76. P. 062 902.

[13] *Бор Н.* // Избранные труды. М.: Наука, 1970. Т. 1. 584 с.
[14] *Ландау Л.Д., Лифщиц Е.М.* Механика. М.: Наука, 1988. Т. 1. 214 с.
[15] *Lindhard J., Sorensen A.* // Phys. Rev. A. 1996. V. 53. P. 2443.
[16] *Бабиков В.В.* Метод фазовых функций в квантовой механике. М.: Наука, 1976. 287 с.
[17] *Балашов В.В.* Квантовая теория столкновений. М.: МАКС Пресс, 2012. 292 с.