01

Поправка Блоха в теории потерь энергии быстрыми заряженными частицами

© В.И. Матвеев, Д.Н. Макаров

Северный (Арктический) федеральный университет им. М.В. Ломоносова,
163002 Архангельск, Россия
e-mail: mezon98@mail.ru

(Поступила в Редакцию 23 декабря 2011 г.)

Показано, что использование приближения эйконала является естественным путем получения поправки Блоха, допускающим корректный предельный переход от рассеяния ограниченных в пространстве волн к рассеянию неограниченных волн, оценены погрешности такого перехода и области изменения переданных импульсов и углов рассеяния, вносящих основной вклад в поправку Блоха

Поправка Блоха [1] к формуле Бете для потерь энергии быстрыми заряженными частицами при столкновениях с атомами обычно находится путем рассмотрения рассеяния на свободных электронах. Поправка имеет непертурбативный характер и позволяет получить формулу Бете–Блоха [1], справедливую как при квантовом, так и при классическом режимах столкновений и применимую при условиии $v \gg v_a$, где v — относительная скорость столкновения, v_a — характерная скорость атомных электронов.

Вывод поправки Блоха, приведенный в его знаменитой статье [1], громоздок, поэтому были предложены более простые и современные подходы [2,3]. При этом возникли затруднения [3] с анализом зависимостей поправки Блоха от параметров удара, моментов импульса и импульсов, вносящих основной вклад в поправку Блоха. Эффективное торможение на свободных электронах равно

$$\kappa = \int \varepsilon(\theta)\sigma(\theta)d\Omega, \tag{1}$$

где $\sigma(\theta)d\Omega$ — сечение рассеяния в телесный угол $d\Omega$, описанный вокруг угла рассеяния θ, $\varepsilon(\theta)$ — соответствующее изменение энергии. Формула (1), приводит к одинаковым потерям энергии при реализации как классического режима столкновений, так и квантового, причем в последнем случае кулоновский потенциал можно учитывать либо по теории возмущений, либо точно, поскольку во всех случаях сечение $\sigma(\theta)$ описывается одной и той же формулой Резерфорда. Будем считать, что сечение $\sigma(\theta)$ мы можем рассчитать непертурбативно в рамках нерелятивистской квантовой механики. Обозначим через $\sigma_0(\theta)$ сечение рассеяния, рассчитанное в первом порядке теории возмущений по рассеивающему потенциалу, и введем соответствующее эффективное торможение

$$\kappa_0 = \int \varepsilon(\theta)\sigma_0(\theta)d\Omega. \tag{2}$$

Рассмотрим разность

$$\Delta\kappa = \kappa - \kappa_0 = \int \varepsilon(\theta)\sigma(\theta)d\Omega - \int \varepsilon(\theta)\sigma_0(\theta)d\Omega. \tag{3}$$

Очевидно, что если подставить в формулы (1) и (2) вместо $\sigma(\theta)d\Omega$ и $\sigma_0(\theta)d\Omega$ сечение Резерфорда и проинтегрировать по всем углам, то получим в обоих случаях бесконечность. И создается впечатление, что в формуле (3) имеем дело с неопределенностью типа $\infty-\infty$. Однако если переписать (3) в виде

$$\Delta\kappa = \int \varepsilon(\theta)((\sigma(\theta) - \sigma_0(\theta))d\Omega, \tag{4}$$

то становится очевидно, что в этом случае $\Delta\kappa = 0$. Именно поэтому в работах [2,3] было предложено модифицировать формулу (1) для потерь энергии так, чтобы получалась неравная нулю и конечная разница $\Delta\kappa$. В [2] потери энергии рассчитывались через транспортное сечение, а в [3] использовалось выражение для работы поля налетающей частицы над электроном. В обоих подходах было получено выражение для поправки Блоха, однако выбор „стартовой“ формулы для расчета потерь энергии, по сути дела, основан лишь тем, что именно так получается поправка Блоха. Что, конечно же, мало способствует пониманию сложившейся ситуации [3]. То обстоятельство, что вышеуказанные расчеты, использующие в качестве состояний рассения неограниченные в пространстве кулоновские волны, носят, по сути дела, вспомогательный характер, недавно продемонстрировано в [4].

В настоящей работе, исходя из физически понятной постановки задачи [4], на основе рассмотрения в приближении эйконала рассеяния ограниченных в пространстве волн показано, что при расчете поправки Блоха возможен корректный предельный переход к рассеянию неограниченных волн, оценены погрешности такого перехода и области изменения переданных импульсов и углов рассеяния, вносящих основной вклад в поправку Блоха. При этом не возникает необходимости в модификации „стартовой“ формулы для расчета потерь энергии. Везде ниже будем использовать атомные единицы и считать, что $v \gg v_a \sim 1$.

Согласно [4], потери энергии быстрой заряженной частицы (снаряда) могут быть рассчитаны непосредственно по определению (1):

$$\kappa = \int \frac{1}{2}\, q^2 \sigma(\mathbf{q})\, \frac{d^2\mathbf{q}}{k^2} = \int \frac{1}{2}\, q^2 |f(\mathbf{q})|^2\, \frac{d^2\mathbf{q}}{k^2}, \qquad (5)$$

где $\mathbf{q} = \mathbf{k}' - \mathbf{k}$ — изменение импульса снаряда, $\mathbf{k}$ и $\mathbf{k}'$ — значения имульса снаряда до и после рассеяния, $|\mathbf{k}'| = |\mathbf{k}| = k$, так что $q = 2k\sin(\theta/2)$, $\sigma(\mathbf{q})$ — сечение рассеяния, $f(\mathbf{q})$ — амплитуда упругого рассеяния, которую, как в [4], в приближении эйконала запишем в виде

$$f(\mathbf{q}) = \frac{ik}{2\pi} \int e^{-i\mathbf{qb}}(1 - e^{-i\chi(b)})e^{-\beta b^2} d^2\mathbf{b}, \qquad (6)$$

где $(x, \mathbf{b})$ — координаты снаряда, $\mathbf{b}$ обычно интерпретируется как вектор параметра удара, а параметр обрезания β будем считать равным $\beta = 1/(2b_0)^2$, где b_0 — поперечный размер рассеиваемой волны, $\chi(b) = 2\eta \ln b$ — эйкональная фаза в кулоновском поле, $\eta = Z/v$ — кулоновский параметр, Z — заряд налетающей частицы. Эффектвное торможение (5), следуя выкладкам [4], мы запишем в виде

$$\kappa = 4\pi\eta^2 L_\eta(q_0, q_1), \qquad (7)$$

$$L_\eta(q_0, q_1) = \left|\Gamma(1 + i\eta)\right|^2 \times \int_{q_0}^{q_1} q^2 b_0^4 \left|F(1 + i\eta, 2, -q^2 b_0^2)\right|^2 q dq, \qquad (8)$$

где $\Gamma(x)$ — гамма-функция, $F(a, b, z)$ — вырожденная гипергеометрическая функция, импульс q меняется от минимального значения q_0 до максимального значения q_1, причем q_0 будем считать произвольной положительной или равной нулю величиной (в отличие от $q_0 = 0$ в [4]). Эффективное торможение (2) равно

$$\kappa_0 = 4\pi\eta^2 L_0(q_0, q_1), \qquad (9)$$

где $L_0(q_0, q_1)$ — значения $L_\eta(q_0, q_1)$ при $\eta = 0$. Тогда разность (4) равна

$$\Delta\kappa = 4\pi\eta^2 \Delta L,$$

$$\Delta L = \int_{q_0}^{q_1} q^2 b_0^4 \left\{ \left|\Gamma(1 + i\eta) F(1 + i\eta, 2, -q^2 b_0^2)\right|^2 - \left|F(1, 2, -q^2 b_0^2)\right|^2 \right\} q dq. \qquad (10)$$

Согласно формуле (17) из статьи [4], подынтегральное выражение в пределе $b_0 \to \infty$ (т.е. в (5) $\beta = 1/(2b_0)^2 \to 0$) равно

$$2(\mathrm{Re}\,\psi(1 + i\eta) - \psi(1))\delta'(q)q = -2\Delta L^{\mathrm{Bloch}}\delta'(q)q, \qquad (11)$$

где $\delta'(q)$ — производная δ-функции, а $q \geq 0$, так что $\int_0^{+\infty} \delta'(q) q dq = -1/2$. Таким образом, для неограниченных волн $\Delta L = 0$ для любых q_0 и q_1, положительных и неравных нулю. Таким образом, $\Delta L \neq 0$ лишь при $q_0 = 0$, причем при q_1 положительных, $\Delta L = \Delta L^{\mathrm{Bloch}}$ и не зависит от q_1. С точки зрения физики процесса эти выводы представляются неправильными, поскольку при столкновении с атомным электроном всегда $q_0 \neq 0$ и $q_0 \sim I/v$, где [5] I — средний потенциал атома, а $q_1 \sim 2v$. Почему же тогда в работах [2,3] предлагается получать формулу Бете–Блоха путем прибавления к формуле Бете поправки Блоха $\Delta L^{\mathrm{Bloch}}$, вычисленной на неограниченных в пространстве волнах в предположении $q_0 = 0$, когда наверняка $q_0 \neq 0$? Для прояснения ситуации рассмотрим амплитуду рассеяния ограниченной в пространстве волны, которая описывается формулой (6) с $\beta = 1/(2b_0)^2$, где b_0 — характерный атомный размер. Такое обрезание приводит к разнице между сечениями $\sigma(\theta)$ и $\sigma_0(\theta)$ и соответствует физической постановке задачи — столкновения атомных электронов среды с быстрым ионом могут рассматриваться как столкновения свободных электронов только при малых параметрах удара, тогда как формула Резерфорда при квантовом режиме столкновений описывает рассеяние неограниченной в пространстве плоской волны. Для иллюстрации вышесказанного обозначим подынтегральное выражение в (10), деленное на $-2\Delta L^{\mathrm{Bloch}} q$, через $D(q, b_0)$, причем, согласно (11), $D(q, b_0) \to \delta'(q)$ при $b_0 \to \infty$. На рис. 1 изображено поведение $D(q, b_0)$ в зависимости от переданного импульса q для нескольких значений b_0. Как следует из рис. 1, с ростом поперечного размера рассеиваемых волн уменьшаются характерные импульсы q, вносящие основной вклад в поправку Блоха.

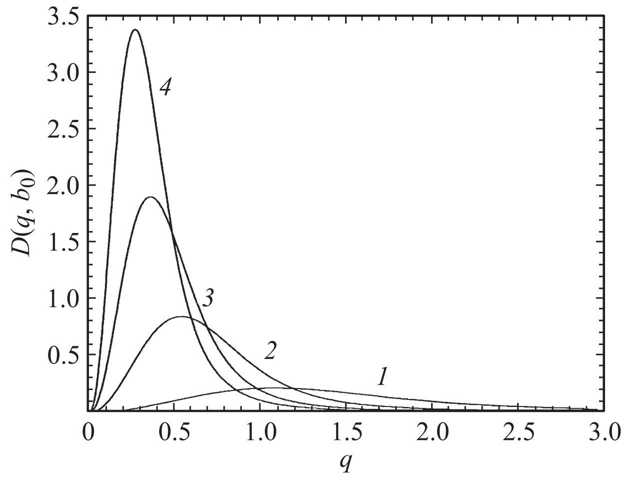

Рис. 1. Функция $D(q, b_0)$ в зависимости от переданного импульса q для четырех значений b_0. Кривая *1* соответствует $b_0 = 1$, *2* — $b_0 = 2$, *3* — $b_0 = 3$, *4* — $b_0 = 4$. Значения q и b_0 приведены в атомных единицах, функция $D(q, b_0)$ безразмерна.

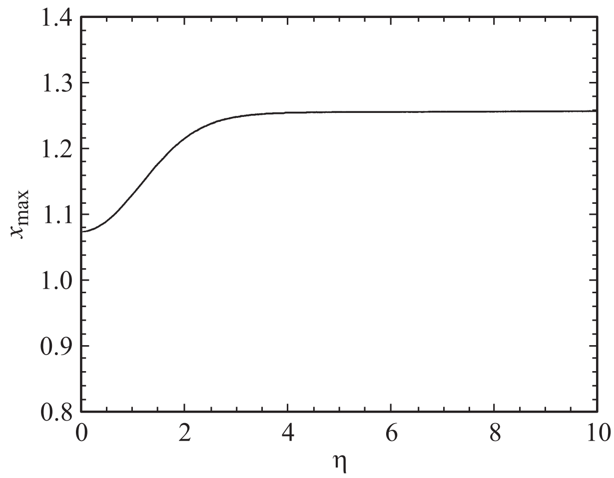

Рис. 2. Поведение x_{max} — точки максимума подынтегрального выражения в (12) — в зависимости от η. Кулоновский параметр η и x_{max} безразмерены.

Для выяснения вопроса — почему и с какой погрешностью поправку Блоха можно вычислять на неограниченных волнах — представим ΔL так:

$$\Delta L = \int_{x_0}^{x_1} \frac{1}{2}\left\{\left|\Gamma(1+i\eta)\right|^2\left|F(1+i\eta, 2, -x)\right|^2 - \left|F(1, 2, -x)\right|^2\right\} x\,dx, \tag{12}$$

где $x = q^2 b_0^2$ и пределы интегрирования $x_0 = q_0^2 b_0^2$ и $x_1 = q_1^2 b_0^2$. Откуда следует, что при вычислении ΔL сами по себе величины q_0, q_1 и b_0 не могут рассматриваться как малые или большие параметры, такую роль выполняют их произведения x_0 и x_1. В нашем случае $v \gg 1$, $q_0 \sim I/v \sim 1/v \ll 1$, $q_1 \sim 2v \gg 1$, ф $b_0 \sim 1$ и поэтому $x_0 \ll 1$ и $x_1 \gg 1$. Легко убедиться, при малых x_0 интеграл (12) зависит как x_0^2 от нижнего предела, который, таким образом, можно положить равным нулю, при больших $x_1 \gg 1$ интеграл зависит как x_1^{-1} от верхнего предела, который можно положить равным бесконечности. Таким образом, интеграл (12) с точностью до малых величин x_0^2 и x_1^{-1} не зависит от b_0 и совпадает с этой точностью с поправкой Блоха, вычисленной на неограниченных волнах:

$$\Delta L = \Delta L\big|_{b_0=\infty} + \mathrm{O}(x_0^2) + \mathrm{O}(1/x_1) = \Delta L^{\mathrm{Bloch}} + \mathrm{O}(x_0^2) + \mathrm{O}(1/x_1). \tag{13}$$

Для оценки характерных значений q, вносящих основной вклад в поправку Блоха, найдем значения x, при которых подынтегральное выражение в (12) максимально, для этого необходимо приравнять его производную нулю, найденное таким образом уравнение, имеющее один положительный корень в точке $x = x_{max}$, решалось численно. На рис. 2 представлена иллюстрация поведения x_{max} в зависимости от η. Как видно из рисунка, при η, близких к нулю, $x_{max} \approx 1.08$ и с ростом η значения x_{max} возрастают до „насыщения“ $x_{max} \approx 1.26$ для $\eta \approx 4$, так что далее с ростом η значения x_{max} не меняются. Таким образом, для оценок можно считать $x_{max} \approx 1$ и $q_{max} b_0 = \sqrt{x_{max}} \approx 1$. Значения переданного импульса q, вносящие наибольший вклад в поправку Блоха, расположены в некотором интервале Δq вокруг $q = q_{max} \approx 1/b_0$. Для оценки Δq поступим так: согласно (13), интеграл (12) равен $\Delta L^{\mathrm{Bloch}}$, введем Δx такой, что $\underline{x_{max}\Delta x} = \Delta L^{\mathrm{Bloch}}$, где $x_{max} \sim 1$, тогда $\Delta q = \sqrt{\Delta x}/b_0 \sim \sqrt{\Delta L^{\mathrm{Bloch}}}/b_0$. Причем $q_{max} \to 0$ и $\Delta q \to 0$ при $b_0 \to \infty$, т. е. при переходе к неограниченным волнам. Исходя из связи переданного импульса с углом рассеяния $q = 2v\sin(\theta/2) \sim v\theta$, находим $\theta_{max} \sim q_{max}/v \sim 1/(vb_0)$ и $\Delta\theta = \Delta q/v \sim \sqrt{\Delta L^{\mathrm{Bolch}}}/(vb_0)$.

Таким образом, метод получения поправки Блоха в приближении эйконала позволяет оценить погрешности, вносимые предельным переходом к случаю расчетов с использованием описания состояний рассеяния в виде неограниченных кулоновских волн.

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта президента РФ (шифр гранта МК-3592.2011.2).

Список литературы

[1] *Bloch F.* // Ann. der Phys. 1933. Vol. 16. P. 285.
[2] *Lindhard J., Sorensen A.* // Phys. Rev. 1996. Vol. 53. P. 2443.
[3] *Khodyrev V.* // J. Phys. B. 2000. Vol. 33. P. 5045.
[4] *Матвеев В.И., Гусаревич Е.С., Макаров Д.Н.* // Письма в ЖЭТФ. 2010. Т. 92. С. 317.
[5] *Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М.* Квантовая механика. М.: Наука, 1989. 768 с.