Письма в ЖЭТФ, том 92, вып. 5, с. 317 – 323

К теории потерь энергии быстрыми заряженными частицами

В. И. Матвеев[1]*, Д. Н. Макаров, Е. С. Гусаревич*

Поморский государственный университет им. М.В. Ломоносова, 163002 Архангельск, Россия

Поступила в редакцию 3 июля 2010 г.

Потери энергии быстрыми заряженными частицами при столкновениях с атомами рассмотрены на основе приближения эйконала. Показано, что непертурбативный вклад в эффективное торможение от области промежуточных (сравнимых с характерными размерами электронных оболочек мишени) параметров удара может оказаться значительным не только по сравнению с оболочечными поправками к формуле Бете-Блоха (обычно рассчитываемыми в первом порядке теории возмущений), но и приводящим к значительным (до 50%) поправкам к формуле Бете- Блоха.

1. Введение. Современное развитие теории торможения быстрых заряженных частиц во многом направлено [1] на описание ситуаций, связанных с усложнением структуры как снарядов так и мишеней. Учет такого усложнения сталкивающихся систем приводит к громоздким аналитическим выкладкам и к возрастанию роли численных расчетов. Причем, во многих случаях приходится учитывать потери энергии на возбуждение и ионизацию одновременно снаряда и мишени (см., например, [2, 3]), приходится проводить значительное количество сшивок вкладов от различных областей параметров столкновения и учитывать значительное число поправок к формуле Бете-Блоха. Таким образом, представляется необходимым развивать расчетные методы, позволяющие учесть в рамках единой схемы как можно большее число физических механизмов, ответственных за потери энергии при столкновениях снарядов и мишеней, имеющих сложную структуру. Общей основой для развития таких методов расчета может служить приближение эйконала, имеющее общую с известной формулой Бете-Блоха область применимости, но позволяющее непертурбативно рассчитывать столкновения сложных снарядов и мишеней. Конечно же, для полной определенности, необходимо проведение общего рассмотрения возможностей эйконального приближения в теории потерь энергии быстрыми заряженными частицами. Именно из-за отсутствия такого анализа в численных расчетах в рамках модифицированного полуклассического эйконального приближения, проведенных в работе [4], не была обнаружена основная причина отклонений их расчетов от теории Бете-Блоха. Широко используемая в теории торможения быстрых заряженных частиц формула Бете- Блоха имеет вид [5] (здесь и везде ниже используется атомная система единиц и рассматриваются нерелятивистские столкновения)

$$\kappa = 4\pi\eta^2 N_a(L^{\mathrm{Bethe}} + \Delta L^{\mathrm{Bloch}}), \qquad (1)$$

где $\eta = Z/v$, Z и v – заряд и скорость снаряда, N_a – число электронов в мишени, мишень неподвижна, величина $L^{\mathrm{Bethe}} = \ln(2v^2/I)$ рассчитана Бете [6] в низшем порядке теории возмущений, I – средний потенциал ионизации мишени, $\Delta L^{\mathrm{Bloch}} = -\mathrm{Re}\,\psi(1+i\eta) + \psi(1)$ – поправка Блоха [5], имеющая непертурбативный характер, $\psi(x)$ – логарифмическая производная Г-функции. Скорость снаряда всегда должна быть много больше характерных скоростей электронов мишени. Формула Бете-Блоха справедлива как в квантовом режиме столкновений, так и в классическом. Вывод формулы Бете-Блоха, по сути, основан [5, 7] на разбиении всей плоскости параметров удара на две области – область больших параметров удара, в которой применима теория возмущений и область малых параметров удара, в которой электроны мишени рассматриваются как свободные. При такой сшивке вклад от области промежуточных (сравнимых с характерным размером атома) параметров удара учитывается лишь в первом порядке теории возмущений, несмотря на то, что именно в этой области параметров удара взаимодействие снаряда и электронов мишени максимально и, вообще говоря, необходим непертурбативный учет. Поэтому, в общепринятой области ($v \gg v_a$, где v_a – характерная скорость электронов мишени, а значения параметра η могут быть любыми) применимости формулы Бете-Блоха, мы будем использовать непертурбативный подход, основанный на приближении эйконала, включающего в себя, как известно [8], в задачах потенциального рассеяния оба предельных случая: борновское и квазиклассическое приближения, причем в кулоновском поле переход амплитуды в квазиклассический вид подробно рассмотрен в [9] (задача 13.54).

[1]e-mail: matveev.victor@pomorsu.ru

В настоящей работе показано, что поправка Блоха может быть получена в приближении эйконала для потерь энергии быстрыми заряженными частицами при столкновениях со свободными электронами. Потери энергии быстрыми заряженными частицами при столкновениях с атомами рассмотрены на основе приближения эйконала, позволяющего последовательно в рамках единого непертурбативного подхода рассчитать эффективное торможение во всей области параметров удара. При этом не требуется выделение областей интегрирования по параметру удара для учета поправки Блоха и проведения различного рода сшивок. Показано, что непертурбативный вклад в эффективное торможение от области промежуточных (сравнимых с характерными размерами электронных оболочек мишени) параметров удара может оказаться значительным по сравнению с оболочечными поправками к формуле Бете-Блоха, рассчитываемыми в первом порядке теории возмущений. Продемонстрировано, при каких упрощающих предположениях формула Бете-Блоха может быть получена в приближении эйконала. Показано, что учет непертурбативных эффектов при больших значениях кулоновского параметра $\eta = Z/v$ приводит к значительным (до 50%) поправкам к формуле Бете-Блоха. Таким образом, расчеты в приближении эйконала потерь энергии высокозаряженными снарядами (в области параметров столкновения, при которых обычно используют формулу Бете-Блоха) существенно предпочтительнее оценок на основе формулы Бете-Блоха и ее модификаций, поскольку учитывают не только поправку Блоха, но и непертурбативно область промежуточных параметров удара.

2. Потери энергии на свободном электроне, поправка Блоха. Поправка Блоха находится [5, 7, 10] путем расчета потерь энергии быстрой заряженной частицы на свободных электронах. Эффективное торможение на свободных электронах равно

$$\kappa = \int \varepsilon(\theta)\sigma(\theta)d\Omega, \qquad (2)$$

где $\sigma(\theta)d\Omega$ – сечение рассеяния в телесный угол $d\Omega$, описанный вокруг угла рассеяния θ, $\varepsilon(\theta)$ – соответствующее изменение энергии. На первый взгляд, эффективное торможение, определяемое по формуле (2), приведет к одинаковым средним потерям энергии при реализации как классического режима столкновений между заряженными частицами, так и квантового, причем в последнем случае кулоновский потенциал можно учитывать либо по теории возмущений, либо точно, поскольку во всех трех случаях сечение $\sigma(\theta)$ описывается одной и той же формулой Резерфорда. Однако физически понятная постановка задачи состоит в следующем: столкновения атомных электронов среды с быстрым ионом могут рассматриваться как столкновения свободных электронов только при больших переданных импульсах или при малых параметрах удара, тогда как формула Резерфорда при квантовом режиме столкновений описывает рассеяние неограниченной в пространстве плоской волны. Требующееся при этом ограничение размера волны и вносит разницу между вышеперечисленными тремя случаями и приводит к появлению поправки Блоха. Вывод поправки Блоха, приведенный в его оригинальной статье [5], громоздок, поэтому были предложены более простые и современные подходы [7, 10]. В обоих подходах рассматривались потери энергии на свободных электронах с описанием их рассеяния на тормозящейся частице [7] в виде кулоновских сферических волн, а в [10] – в виде кулоновской рассеянной волны ($\psi_{\mathbf{k}}^{(+)}$ в обозначениях [11], формула (136.6)). Соответственно, в [7] потери энергии рассчитывались через транспортное сечение, а в [10] 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, обоснован лишь тем, что именно так получается поправка Блоха. Тогда как при корректном учете особенностей кулоновского рассеяния потери энергии можно рассчитать, не заботясь о специфическом выборе "стартовой" формулы, в рамках единого подхода непосредственно по определению (2):

$$\kappa = \int \frac{1}{2}q^2\sigma(\mathbf{q})\frac{d^2\mathbf{q}}{k^2} = \int \frac{1}{2}q^2|f(\mathbf{q})|^2\frac{d^2\mathbf{q}}{k^2}\ , \qquad (3)$$

где $\mathbf{q} = \mathbf{k}' - \mathbf{k}$ – изменение импульса электрона, $\mathbf{k}$ и $\mathbf{k}'$ – значения импульса электрона до и после рассеяния, $|\mathbf{k}'| = |\mathbf{k}| = k$, так что $q = 2k\sin(\theta/2)$ меняется от нуля до максимального значения q_1, $f(\mathbf{q})$ – амплитуда упругого рассеяния, имеющая в приближении эйконала вид [11]

$$f(\mathbf{q}) = \frac{ik}{2\pi}\int e^{-i\,\mathbf{q}\mathbf{b}}(1 - e^{-i\chi(b)})d^2\mathbf{b}\ , \qquad (4)$$

где $(x, \mathbf{b})$ – координаты электрона, а $\mathbf{b}$ обычно интерпретируется как вектор параметра удара. Мы должны рассматривать рассеяние ограниченной в пространстве волны, поэтому запишем $f(\mathbf{q})$, вводя обрезание по параметрам удара:

$$f(\mathbf{q}) = \frac{ik}{2\pi}\int e^{-i\,\mathbf{q}\mathbf{b}}(1 - e^{-i\chi(b)})e^{-\beta b^2}d^2\mathbf{b}\ , \qquad (5)$$

где параметр обрезания β будем считать малым, и в конце нижеследующих выкладок будем переходить к пределу $\beta \to 0$. Такое обрезание соответствует физической постановке задачи и позволяет выполнять выкладки, не заботясь о выборе "стартовой" формулы для расчета потерь энергии. Отметим, что выбор гауссовой формы обрезания вызван лишь последующей простотой дальнейших выкладок. Мы проводили расчеты с экспоненциальным типом обрезания и с резким обрезанием области интегрирования по параметру удара. В обоих случаях нижеследующие результаты не изменятся, но соответствующие выкладки значительно усложняются по сравнению с гауссовым обрезанием. Очевидно, что при малых, но не равных нулю, β можно записать:

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

где $\nabla_b = \partial/\partial\mathbf{b}$. Подставляя в (6) явный вид $\chi(b) = 2\eta\ln b$ ([9], и [12], стр. 477)), выполняя дифференцирование и подставляя полученное выражение для $\mathbf{q}f(\mathbf{q})$ в (3), получаем эффективное торможение в виде

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

где

$$L_\eta = \int_0^{q_1} I_\eta I_\eta^* q dq\ , \qquad (8)$$

а интеграл I_η равен

$$I_\eta = \int_0^{+\infty} J_1(qb)b^{-2i\eta}e^{-\beta b^2}db \qquad (9)$$

и вычисляется далее по формуле (2.12.9.3) из справочника [13], стр.186:

$$I_\eta = \frac{1}{4}q\beta^{-1+i\eta}\Gamma\left(1-i\eta)F(1-i\eta,2,-\frac{q^2}{4\beta}\right), \qquad (10)$$

где $J_\nu(x)$ – функция Бесселя, $\Gamma(x)$ – гамма-функция, $F(a,b,z)$ – вырожденная гипергеометрическая функция. Поэтому

$$L_\eta = \frac{1}{2}|\Gamma(1+i\eta)|^2\int_0^{q_1^2/(4\beta)}|F(1+i\eta,2,-x)|^2 x dx. \qquad (11)$$

Асимптотику входящего сюда интеграла при $q_1^2/(4\beta) \gg 1$ вычисляем так:

$$L_\eta = \frac{1}{2}|\Gamma(1+i\eta)|^2\int_0^{\infty}|F(1+i\eta,2,-x)|^2 e^{-\lambda x}x dx, \qquad (12)$$

где $\lambda = 4\beta/q_1^2$. Входящий в формулу (12) интеграл легко вычисляется по формуле (f,10) из [11] и равен

$$L_\eta = \frac{1}{2}\frac{|\Gamma(1+i\eta)|^2}{(1+\lambda)^2}F(1+i\eta,1-i\eta,2,\frac{1}{(1+\lambda)^2}), \quad (13)$$

где $F(a,b,c,z)$ – гипергеометрическая функция. Используя предельное выражение для гипергеометрической функции $F(1+i\eta,1-i\eta,2,z)$ при $z\to 1$ (формула (95,19) из книги [12]), получим

$$\Delta L = L_\eta - L_0 = -\operatorname{Re}\psi(1+i\eta)+\psi(1) = \Delta L^{\text{Bloch}}, \quad (14)$$

где L_0 – значения L_η при $\eta = 0$.

Приведенный метод получения поправки Блоха нуждается в дополнительных комментариях. Интегралы типа (8) и (9), содержащие кулоновские эйкональные фазы, используются и в теории тормозного излучения и рождения пар релятивистскими и ультрарелятивистскими частицами (см., например, [12], глава 10, и [14], глава 4). При этом возникают общие с теорией торможения проблемы выбора "стартовых" формул и правила соблюдения определенного порядка интегрирования при вычислении кратных интегралов. Во многом это вызывает ряд неточностей в результатах расчетов. Так, например, в работе [15] указывается, что в ряде работ [16–19], посвященных рождениям пар при ультрарелятивистских столкновениях тяжелых ионов делается неверный вывод о том, что точные результаты для сечений совпадают с результатами, полученными в низшем порядке теории возмущений. Точно так же получается и для потерь энергии, если при вычислении L_η по формуле (8) сначала вычислить интеграл (9) при $\beta = 0$ и $q > 0$ [20]:

$$I_\eta = \int_0^{+\infty} J_1(qb)b^{-2i\eta}db = q^{-1+2i\eta}2^{-2i\eta}\frac{\Gamma(1-i\eta)}{\Gamma(1+i\eta)}. \qquad (15)$$

Тогда $|I_\eta|^2 = 1/q^2$, а $L_\eta = L_0$, в итоге $\Delta L = 0$. Другими словами, расчет в низшем порядке теории возмущений и непертурбативный расчет приводят к одному и тому же результату. Если же, следуя [15], сначала подставить в (8) $I_\eta = \int_0^{+\infty} J_1(qb)b^{-2i\eta}db$ и $I_\eta^* = \int_0^{+\infty} J_1(qb_1)b_1^{2i\eta}db_1$ и провести интегрирование по $d^2\mathbf{q}$, то

$$\Delta L = L_\eta - L_0 = \int_0^{+\infty}d\rho\int_0^{+\infty}d\rho_1\frac{1}{\rho^2-\rho_1^2}\times \\ \times\{\rho_1 J_0(\rho_1)J_1(\rho)-\rho J_0(\rho)J_1(\rho_1)\}\left(\frac{\rho_1^{2i\eta}}{\rho^{2i\eta}}-1\right). \qquad (16)$$

Эти интегралы после замены $\rho = re^{t/4}$ и $\rho_1 = re^{-t/4}$ и интегрирования по r приводятся [15] к виду

$$\Delta L = \int_0^{+\infty} dt \frac{\cos(\eta t) - 1}{e^t - 1} = -\mathrm{Re}\psi(1 + i\eta) + \psi(1).$$

Мы привели альтернативный вывод поправки Блоха, чтобы продемонстрировать необходимость следовать определенному порядку интегрирования и без введения обрезания получить ненулевой вклад непертурбативного подхода. Кроме того, из приведенного вывода (см. формулу (16)) следует, что значения ΔL не зависят от q_1. Причем, этот результат не зависит от метода вычисления (то есть даже если мы введем, как в (9), параметр обрезания β с устремлением его к нулю в итоговом вычислении ΔL, используя формулу (13)). Другими словами, справедливо представление

$$\Delta L^{\mathrm{Bloch}} = \lim_{\beta \to 0} \int_0^{q_1} q dq (I_\eta I_\eta^* - I_0 I_0^*) =$$
$$= 2(\mathrm{Re}\psi(1 + i\eta) - \psi(1)) \int_0^{q_1} \delta'(q) q dq, \qquad (17)$$

где I_η выражается формулой (9), $\delta'(q)$ – производная δ-функции. Отсюда следует, что если бы мы вычисляли L_η по формуле $L_\eta = \int_{q_0}^{q_1} I_\eta I_\eta^* q dq$, где q_0 – любое положительное не равное нулю число, то получили бы $\Delta L = 0$, независимо от того, соблюдаем ли мы определенную последовательность взятия интегралов или вводим параметр обрезания β.

В этом смысле становится интересным ответ на вопрос: каким же образом появляется поправка Блоха в формуле для потерь энергии при столкновениях с атомами, рассчитываемых как результат интегрирования по переданному импульсу в пределах от q_0 до q_1, где q_0 – минимальное значение переданного импульса, наверняка не равное нулю? Ответ заключается в следующем: в этом случае интеграл I_η всегда вычисляется с конечным верхним пределом b_0, меньшим размера оболочек атома: $I_\eta = \int_0^{b_0} J_1(qb) b^{-2i\eta} db$ (это соответствует тому, что в формуле (9) $\beta = 1/(b_0)^2$ принимает конечное положительное значение и не равно нулю всегда). В результате разность $\Delta L = L_\eta - L_0$ оказывается не равной нулю, несмотря на то, что $L_\eta = \int_{q_0}^{q_1} I_\eta I_\eta^* q dq$, где q_0 положительно и не равно нулю всегда. Таким образом, обрезание соответствует физической постановке задачи и позволяет выполнять выкладки, не заботясь о выборе "стартовой" формулы для расчета потерь энергии и порядке интегрирования.

3. Расчет потерь энергии при столкновениях с атомами. В приближении эйконала амплитуда неупругого столкновения движущегося с нерелятивистской скоростью иона с нерелятивистским атомом, с переходом атома из состояния $|0\rangle$ в $|n\rangle$, имеет вид [11]

$$f_{n0}(\mathbf{q}) = \langle n \mid f(\mathbf{q}) \mid 0 \rangle, \qquad (18)$$

где

$$f(\mathbf{q}) = \frac{ik_0}{2\pi} \int e^{-i\mathbf{qb}} \left[1 - \exp\{-\frac{i}{v} \int U dX\} \right] d^2\mathbf{b}; \qquad (19)$$

здесь рассеивающий потенциал U есть функция не только координат иона $\mathbf{R} = (X, \mathbf{b})$, но и мгновенных положений атомных электронов, совокупность координат которых обозначаем $\{\mathbf{r}_a\}$, то есть $U = U(X, \mathbf{b}; \{\mathbf{r}_a\})$, изменение импульса иона $\mathbf{q} = \mathbf{k}_n - \mathbf{k}_0$, где $\mathbf{k}_0$ и $\mathbf{k}_n$ – импульс иона до и после столкновения. Сечение неупругого столкновения можно получить с помощью известной формулы [11]

$$\sigma_n = \int \frac{k_n}{k_0} \mid f_{n0} \mid^2 d\Omega = \int\limits_{q_{\min} \le q \le q_1} \mid f_{n0} \mid^2 \frac{d^2\mathbf{q}}{k^2}, \qquad (20)$$

где $d\Omega$ – телесный угол рассеяния иона, область интегрирования по $d^2\mathbf{q}$ такая, что $q_{\min} \le |\mathbf{q}| \le q_1$, где $q_{\min} = (\epsilon_n - \epsilon_0)/v$, а $q_1 = 2v$; и учтено, что для малых углов рассеяния и $k_0 \approx k_n \approx k$, имеем $d\Omega = d^2\mathbf{q}/(k_0 k_n) = d^2\mathbf{q}/k^2$. Эффективное торможение [11]

$$\kappa = \sum_n \epsilon_{n0} \sigma_n = \sum_n \epsilon_{n0} \int\limits_{q_{\min} \le q \le q_1} \mid f_{n0} \mid^2 \frac{d^2\mathbf{q}}{k^2}, \qquad (21)$$

где $\epsilon_{n0} = \epsilon_n - \epsilon_0$ – разность энергий состояний $|n\rangle$ и $|0\rangle$. Следуя [11], разобьем область интегрирования ($q_{\min} \le q \le q_1$) на две части: $q_{\min} \le q \le q_0$ и $q_0 \le q \le q_1$ (где q_0 не зависит от n и $(v_a/v) \ll q_0 \ll 1$), соответствующие малым и большим переданным импульсам, и представим κ в виде

$$\kappa = \kappa_1 + \kappa_2 \ . \qquad (22)$$

Область малых переданных импульсов вносит [11] вклад κ_1, рассчитываемый по теории возмущений:

$$\kappa_1 = \sum_n \epsilon_{n0} \int\limits_{q_{\min} \le q \le q_0} \mid f_{n0} \mid^2 \frac{d^2\mathbf{q}}{k^2} = 4\pi\eta^2 \ln\left(\frac{q_0 v}{I}\right) , \qquad (23)$$

где I – средний потенциал ионизации [11]. Область больших переданных импульсов вносит вклад κ_2, равный

$$\kappa_2 = \frac{1}{k^2} \sum_n \epsilon_{n0} \int\limits_{q_0 \le q \le q_1} d^2\mathbf{q} \mid f_{n0} \mid^2 . \qquad (24)$$

В этой области теория возмущений неприменима, и для амплитуды f_{n0} мы будем использовать эйкональное приближение (18), (19). Следуя [11], легко получить, что

$$\kappa_2 = \frac{1}{2k^2} <0 \mid \sum_{a=1}^{a=N_a} (\nabla_a f \cdot \nabla_a f^*) \mid 0>, \qquad (25)$$

где $f \equiv f(\mathbf{q})$ из формулы (19), $\nabla_a = \partial/\partial \mathbf{r}_a$ – дифференцирование по координатам атомного электрона с номером a $(1 \leq a \leq N_a)$, N_a – общее число электронов в атоме-мишени.

Рассмотрим для определенности столкновение движущегося со скоростью v точечного иона заряда Z с покоившимся в начале системы координат атомом водорода, в этом случае эйкональная фаза равна

$$\chi = -2\eta \ln \frac{|\mathbf{b}-\mathbf{s}|}{|\mathbf{b}|}, \qquad (26)$$

где $\mathbf{s}$ – проекция координат атомного электрона на плоскость параметра удара $\mathbf{b}$. Подставляя (26) в амплитуду (19), дифференцируя по $\mathbf{s}$ и заменяя переменную интегрирования $\mathbf{b}$ на $\mathbf{b}+\mathbf{s}$, получим

$$\nabla f(\mathbf{q}) = \frac{k\eta}{\pi} \int e^{-i\mathbf{q}(\mathbf{b}+\mathbf{s})} \frac{|\mathbf{b}|^{i2\eta}}{|\mathbf{b}+\mathbf{s}|^{i2\eta}} \frac{\mathbf{b}}{|\mathbf{b}|^2} d^2\mathbf{b}.$$

В результате формула (25) примет вид

$$\kappa_2 = \frac{\eta^2}{2\pi^2} \int\limits_{q_0 \leq q \leq q_1} <0| \left(\mathbf{I}(\mathbf{q})\mathbf{I}^*(\mathbf{q})\right) |0> d^2\mathbf{q}, \qquad (27)$$

где

$$\mathbf{I}(\mathbf{q}) = \int \exp(-i\mathbf{q}\mathbf{b}) |\mathbf{b}+\mathbf{s}|^{-i2\eta} |\mathbf{b}|^{i2\eta} \frac{\mathbf{b}}{|\mathbf{b}|^2} d^2\mathbf{b}. \qquad (28)$$

Очевидно, к теории возмущений первого порядка возвращаемся, полагая в (28) $\eta = 0$, тогда

$$\mathbf{I}(\mathbf{q}) = \int \exp(-i\mathbf{q}\mathbf{b}) \frac{\mathbf{b}}{|\mathbf{b}|^2} d^2\mathbf{b} = -2\pi i \frac{\mathbf{q}}{\mathbf{q}^2}. \qquad (29)$$

Подставляя это значение $\mathbf{I}(\mathbf{q})$ в (27), получаем $\kappa_2 = \kappa_2^{\rm Pert}$, где

$$\kappa_2^{\rm Pert} = 4\pi\eta^2 \ln \frac{q_1}{q_0} \qquad (30)$$

в точности совпадает с результатом теории возмущений (см. [11], формула (149,9)). Этот результат позволяет записать эффективное торможение в приближении эйконала в виде

$$\kappa = \kappa_1 + \kappa_2 = 4\pi\eta^2 L^{\rm Eik}, \qquad (31)$$

где

$$L^{\rm Eik} = L^{\rm Bethe} + \int\limits_{q_0 \leq q \leq q_1} <0|\mathbf{I}(\mathbf{q})\mathbf{I}^*(\mathbf{q}) - (2\pi)^2 q^{-2}|0> \frac{d^2\mathbf{q}}{(2\pi)^3}. \qquad (32)$$

Формула (31) является окончательной для расчетов эффективного торможения в приближении эйконала. Общий анализ этой формулы затруднен, поэтому рассмотрим ее поведение качественно, тем более, что такой анализ позволит нам отметить, какие именно пренебрежения необходимо сделать для получения формулы Бете-Блоха из приближения эйконала (31).

При произвольных η интеграл (28) оцениваем следующим образом. Рассмотрим в (28) область интегрирования по $d^2\mathbf{b}$ такую, что $|\mathbf{b}| \leq b_0 \ll |\mathbf{s}|$, результат интегрирования по этой области малых параметров удара b будем обозначать $\mathbf{I}_1(\mathbf{q})$, тогда

$$\mathbf{I}_1(\mathbf{q}) = \int_{|\mathbf{b}| \leq b0} \exp(-i\mathbf{q}\mathbf{b}) |\mathbf{s}|^{-i2\eta} |\mathbf{b}|^{i2\eta} \frac{\mathbf{b}}{|\mathbf{b}|^2} d^2\mathbf{b} = -2\pi i |\mathbf{s}|^{-i2\eta} \frac{\mathbf{q}}{|\mathbf{q}|} \int_0^{b0} J_1(qb) |\mathbf{b}|^{i2\eta} db. \qquad (33)$$

Интеграл от функции Бесселя – табличный ([13], стр.37, формула 1.8.1.1.) в результате

$$\mathbf{I}_1(\mathbf{q}) = -2\pi i |\mathbf{s}|^{-i2\eta} \frac{\mathbf{q}}{|\mathbf{q}|} b_0^{1+2i\eta} P_\eta(b_0 q), \qquad (34)$$

где

$$P_\eta(b_0 q) = \frac{b_0 q_1 F_2(1+i\eta; 2, 2+i\eta; -(b_0 q/2)^2)}{4(1+i\eta)}. \qquad (35)$$

Здесь ${}_1F_2(a; b_1, b_2; x)$ – обобщенная гипергеометрическая функция. Рассмотрим теперь область интегрирования в (28) по $d^2\mathbf{b}$ такую, что $|\mathbf{b}| \geq b_1 \gg |\mathbf{s}|$, результат интегрирования по этой области больших параметров удара b будем обозначать $\mathbf{I}_2(\mathbf{q})$, тогда

$$\mathbf{I}_2(\mathbf{q}) = \int_{|\mathbf{b}| \geq b1} \exp(-i\mathbf{q}\mathbf{b}) \frac{|\mathbf{b}|^{i2\eta}}{|\mathbf{b}+\mathbf{s}|^{i2\eta}} \frac{\mathbf{b}}{|\mathbf{b}|^2} d^2\mathbf{b} = \int_{|\mathbf{b}| \geq b1} \exp(-i\mathbf{q}\mathbf{b}) \frac{\mathbf{b}}{|\mathbf{b}|^2} d^2\mathbf{b} = -2\pi i J_0(qb_1) \frac{\mathbf{q}}{\mathbf{q}^2}. \qquad (36)$$

Не трудно заметить, что вычисления $\mathbf{I}_2(\mathbf{q})$ формально совпадают с выкладками в первом порядке теории возмущений, когда следует считать в верхней строке формулы (36) $\eta = 0$. Таким образом, учет вклада от области $b \sim s$ в первом порядке теории возмущений соответствует формальному продлению области интегрирования в (36) до нижнего предела равного b_0. Итак, будем считать, что в (36) $b_1 = b_0 \sim 1$ и оценим $\mathbf{I}(\mathbf{q})$ в формуле (28) так:

$$\mathbf{I}(\mathbf{q}) = \mathbf{I}_1(\mathbf{q}) + \mathbf{I}_2(\mathbf{q}). \quad (37)$$

При этом точное значение параметра сшивки b_0 для нас несущественно, поскольку (см. ниже) зависимость слагаемых в κ_2 от b_0 оказывается логарифмической и исчезает при суммировании. Подставим выражение (37) в (27), в результате

$$\kappa_2 = \frac{Z^2}{2v^2\pi^2}(J_1 + J_2 + J_3 + J_3^*), \quad (38)$$

где

$$J_1 = \int_{q_0}^{q_1} \mathbf{I}_1(\mathbf{q})\mathbf{I}_1^*(\mathbf{q})d^2\mathbf{q} =$$
$$= (2\pi)^3[-\mathrm{Re}\psi(1+i\eta) + \psi(1) + \ln(b_0 q_1 \mu/2)], \quad (39)$$

$$J_2 = \int_{q_0}^{q_1} \mathbf{I}_2(\mathbf{q})\mathbf{I}_2^*(\mathbf{q})d^2\mathbf{q} = -(2\pi)^3 \ln(b_0 q_0 \mu/2), \quad (40)$$

где $\mu = e^{-\psi(1)}$,

$$J_3 + J_3^* = \int_{q_0}^{q_1} [\mathbf{I}_1(\mathbf{q})\mathbf{I}_2^*(\mathbf{q}) + \mathbf{I}_1^*(\mathbf{q})\mathbf{I}_2(\mathbf{q})]d^2\mathbf{q} = 0. \quad (41)$$

Мы привели интегралы и их значения, полученные при выполнении условий $b_0 q_0 \ll 1$ и $b_0 q_1 \gg 1$. Тогда, при пренебрежении величинами, меньшими или порядка $(b_0 q_0)^2$ и $1/b_0 q_1$, интегралы сводятся к табличным и их значения можно найти в справочниках [13, 21]. Подставляя эти значения интегралов в формулу (38) и используя (22) и (23), получим для полного эффективного торможения в точности формулу (1). Таким образом, нами получена формула Бете-Блоха при следующих предположениях: мы использовали приближение эйконала, справедливое, как и формула Бете-Блоха, при скоростях снаряда, много больших характерных скоростей электронов мишени, при этом значения кулоновского параметра $\eta = Z/v$ могут быть любыми, область параметров удара ($b \sim s$), сравнимых с характерными размерами электронных оболочек мишени, мы, следуя Блоху [5], учитывали по теории возмущений первого порядка. Следует отметить, что, строго говоря, именно последнее предположение может быть нарушено при $\eta = Z/v \geq 1$, поскольку, очевидно, последующие члены разложения функции $\exp(-2i\eta \ln(|\mathbf{b}+\mathbf{s}|/b)$ в интеграле (28) по степеням η будут вносить в правую часть (27) вклады вида $\eta^m f_m(Z_a)$, где $m \geq 4$, а функции $f_m(Z_a)$ зависят от вида волновой функции основного состояния атома и заряда ядра атома Z_a. Кроме того, из физических соображений ясно, что именно в области параметров удара $b \sim s$ взаимодействие снаряда и электронов мишени максимально.

4. Результаты и выводы. Таким образом, могут быть сделаны следующие качественные выводы. Расчеты по формулам (31) и (32) передают характерные особенности поведения формулы Бете-Блоха. Причем, в отличие от формулы Бете- Блоха, при расчетах в приближении эйконала непертурбативно учитывается область промежуточных значений параметров удара $b \sim s$, вносящая, как показано ниже, заметный вклад в эффективное торможение. Этот вклад, согласно формулам (31) и (32), одновременно зависит от параметра $\eta = Z/v$ и от вида функции ϕ_0, описывающей состояния атома до рассеяния. В формуле Бете-Блоха зависимость эффективного торможения от ϕ_0 учитывается лишь в дипольном приближении для области малых переданных импульсов путем введения среднего потенциала ионизации, зависящего только от характеристик мишени. Учет вида функции ϕ_0 в рамках первого порядка теории возмущений без использования дипольного приближения осуществляется (см., например, [22]) введением в формулу Бете-Блоха так называемой оболочечной поправки (shell correction) $\Delta L^{\mathrm{shell}}$, которая, по своему смыслу, должна быть добавлена к κ_1, описываемому формулой (23). Причем, как показано ниже, вклад от $\Delta L^{\mathrm{shell}}$ значительно меньше вклада от непертурбативного учета области $b \sim s$.

Для иллюстрации вышеуказанного поведения эффективного торможения в приближении эйконала мы провели расчеты по формулам (31) и (32) потерь энергии движущейся со скоростью v точечной частицы заряда Z при столкновении с атомом водорода (находящемся до столкновения в основном состоянии) при энергиях столкновения таких, при которых обычно считается применимой формула Бете-Блоха. Энергия налетающей частицы менялась в пределах от 1 до 100 МэВ/нуклон, что соответствует скорости $6.35 < v < 58.86$ атомных единиц. Результаты расчетов удобно представлять в сравнении с формулой Бете-Блоха, поэтому для иллюстрации отклонений от формулы Бете-Блоха мы приводим на рис.1 и 2 значения непертурбативной поправки $\Delta L = L^{\mathrm{Eik}} - (L^{\mathrm{Bethe}} + \Delta L^{\mathrm{Bloch}})$ в зависимости от энергии столкновения и относительной непертурбативной поправки $\delta = \Delta L/(L^{\mathrm{Bete}} + \Delta L^{\mathrm{Bloch}})$ в зависимости от кулоновского параметра $\eta = Z/v$. Как видно из рисунков, непертурбативный вклад от области параметров удара $b \sim s$ (по отношению к формуле Бете-Блоха) оказывается заметным и при больших Z/v может достигать порядка 50%. На рис.1 (пунктирная линия) мы приводим также значения оболочечной поправки $\Delta L^{\mathrm{shell}}$ (малой, как видно из рис.1, по сравнению с ΔL).

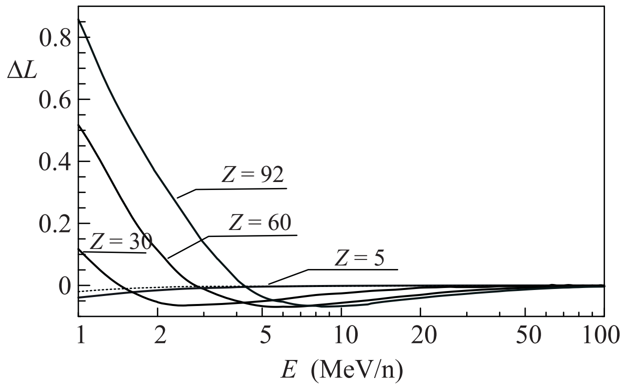

Рис.1. Зависимость ΔL (сплошные линии) от энергии (в МэВ/нуклон) для четырех значений заряда частицы Z при столкновении с атомом водорода, а также оболочечная поправка $\Delta L^{\mathrm{shell}}$ из обзора [22] (пунктирная линия). На горизонтальной оси использован логарифмический масштаб

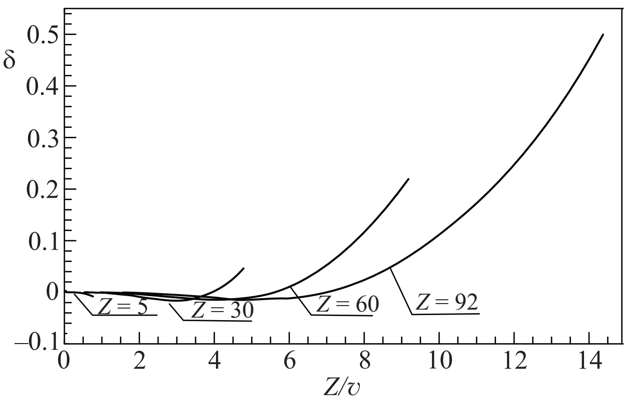

Рис.2. Зависимость относительной непертурбативной поправки δ как функции от кулоновского параметра Z/v для четырех значений заряда частицы Z при столкновении с атомом водорода

Конечно же, расчеты по формулам (31) и (32), в основном, возможны лишь в численном виде, однако эти формулы (при выполнении условий применимости приближения эйконала) легко обобщаются на случаи столкновений сложных снарядов и мишеней, не требуют выделения областей интегрирования для учета поправок Блоха и проведения различного рода сшивок вкладов от различных областей параметров удара.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (грант # 08-02-00711-а).

1. P. K. Sigmund, Dan. Vidensk. Selsk. Mat. Fys. Medd. **52**, 557 (2006); *Special issue on Ion Beam Science: Solved and Unsolved Problems*, Ed. by P. Sigmund.
2. C. C. Montanari and J. E. Miraglia, Phys. Rev. A **73**, 024901 (2006).
3. В. И. Матвеев, Е. С. Гусаревич, Д. Н. Макаров, ЖЭТФ **136**, 843 (2009).
4. J. E. Miraglia and M. S. Gravielle, Phys. Rev. A **72**, 042902 (2005).
5. F. Bloch, Ann. der Phys. **16**, 285 (1933).
6. H. A. Bethe, Ann. Phys., Lpz. **5**, 324 (1930).
7. J. Lindhard and A. Sorensen, Phys. Rev. A **53**, 2443 (1996).
8. Р. Ньютон, *Теория рассеяния волн и частиц*, М.: Мир, 1969.
9. В. М. Галицкий, *Задачи по квантовой механике: Учебное пособие для вузов*, часть 2, М.: Едиториал УРСС, 2001.
10. V. Khodyrev, J. Phys. B. **33**, 5045 (2000).
11. Л.Д. Ландау, Е.М. Лифщиц, *Квантовая механика*, М.: Наука, 1989.
12. В. Б. Берестецкий, Е. М. Лифшиц, Л. П. Питаевский, *Квантовая электродинамика*, М.: Наука, 1989.
13. А. П. Прудников, Ю. А. Брычков, О. И. Маричев, *Интегралы и ряды. Специальные функции*, М.: Наука, 1973.
14. В. Н. Байер, В. М. Катков, В. С. Фадин, *Излучение релятивистских электронов*, М.: Атомиздат, 1973.
15. R. N. Lee and A. I. Milstein, Phys. Rev. A **61**, 032103 (2000).
16. B. Segev and J. C. Wells, Phys. Rev. A **57**, 1849 (1998).
17. B. Segev and J. C. Wells, Phys. Rev. C **59**, 2753 (1999).
18. A. J. Baltz and L. McLerran, Phys. Rev. C **58**, 1679 (1998).
19. U. Eichmann, J. Reinhardt, S. Schramm, and W. Greiner, Phys. Rev. A **59**, 1223 (1999).
20. Г. Бейтмен, А. Эрдейи, *Таблицы интегральных преобразований*, том 1, М.: Наука, 1969.
21. А. П. Прудников, Ю. А. Брычков, О. И. Маричев, *Интегралы и ряды*, т.3. *Специальные функции. Дополнительные главы*, М.: Физматлит, 2003.
22. J. F. Ziegler, Appl. Phys. A: Mater. Sci. Process. **85**, 1249 (1999).