Флуктуации потерь энергии быстрыми заряженными частицами

Д. Н. Макаров, В. И. Матвеев[1)]

Северный (Арктический) федеральный университет им. М.В. Ломоносова, 163002 Архангельск, Россия

Поступила в редакцию 22 ноября 2011 г.

Флуктуации потерь энергии быстрыми заряженными частицами при столкновениях с атомами рассмотрен на основе приближения эйконала. Результат представлен в виде формулы Фано с непертурбативной поправкой. При этом известная непертурбативная формула Титейка (переходящая в формулу Фано при применимости теории возмущений) получается лишь в результате определенных пренебрежений в эйкональных расчетах. Показано, что учет непертурбативных эффектов при больших зарядах снаряда может приводить к значительным (до десяти раз) изменениям флуктуаций по сравнению с результатами Титейка, Фано и Бора. В качестве примера рассчитаны флуктуации потерь энергии быстрыми высокозарядными ионами на атомах водорода и меди. В последнем случае проведено сравнение с экспериментальными данными.

1. Введение Экспериментальные и теоретические исследования потерь энергии и флуктуаций потерь энергии при взаимодействии потоков быстрых заряженных частиц с различного рода материалами проводятся во многих научных центрах. При этом, если в случае изучения процессов потерь энергии применяемые в настоящее время теории развиваются вполне "синхронно" с экспериментальными исследованиями, то теоретические исследования флуктуаций потерь энергии быстрыми тяжелыми ионами на связанных атомных электронах в значительной степени отстают от экспериментальных потребностей [1], особенно для быстрых многозарядных ионов. До сих пор были сделаны лишь немногие попытки улучшить результат Бора [2, 3] для средне-квадратичных флуктуаций (далее флуктуаций) энергетических потерь:

$$\Omega_{\mathrm{B}}^2 = 4\pi Z^2 N, \tag{1}$$

где Z – заряд налетающей частицы, N – число электронов в атоме (здесь и ниже используются атомные единицы). Формула Бора основана на классической картине рассеяния электронов кулоновским потенциалом иона. Первым квантовомеханическим обобщением формулы Бора является формула Левингстона и Бете [4], основанная на теории возмущений. Ее более распространенную модификацию предложил Фано [5]:

$$\Omega_{\mathrm{F}}^2 = 4\pi Z^2 N \left(1 + \frac{4}{3}\frac{K}{v^2}\ln\frac{2v^2}{I_F}\right), \tag{2}$$

где v – скорость налетающей частицы, K – средняя кинетическая энергия электрона в атоме, I_{F} – средний ионизационный потенциал Фано. Однако сильные поля высокозарядных ионов не позволяют использовать теорию возмущений. Выход за рамки теории возмущений на основе подхода Блоха и формулы Бете–Блоха [6] позволил Титейка [7] получить следующую формулу:

$$\Omega_{\mathrm{T}}^2 = 4\pi Z^2 N \left[1 + \frac{4}{3}\frac{K}{v^2}\left(L^{\mathrm{Bethe}} + \Delta L^{\mathrm{Bloch}}\right)\right], \tag{3}$$

где величина $L^{\mathrm{Bethe}} = \ln(2v^2/I)$ рассчитана Бете [8] в низшем порядке теории возмущений, I – средний потенциал ионизации мишени, $\Delta L^{\mathrm{Bloch}} = -\mathrm{Re}\psi(1 + i\eta) + \psi(1)$ – поправка Блоха [6], имеющая непертурбативный характер, $\psi(x)$ – логарифмическая производная Г-функции, $\eta = Z/v$ – кулоновский параметр. Скорость снаряда всегда должна быть много больше характерных скоростей электронов мишени. Поскольку средний ионизационный потенциал I и средний ионизационный потенциал Фано I_{F} численно близки друг к другу, формулу Титейка часто записывают в виде

$$\Omega_{\mathrm{T}}^2 = 4\pi Z^2 N \left[1 + \frac{4}{3}\frac{K}{v^2}\left(\ln\frac{2v^2}{I_{\mathrm{F}}} + \Delta L^{\mathrm{Bloch}}\right)\right]. \tag{4}$$

Может сложиться впечатление, что именно эта формула, основанная на подходе Блоха и переходящая при малых Z/v в формулу Фано (2), является строгим непертурбативным результатом. Однако, как будет показано ниже, при ее выводе приходится делать ряд приближений, приводящих к некорректности формулы (4) в области больших Z/v и к значительным численным ошибкам. По причине сложности непертурбативного рассмотрения Фано в своем широко используемом обзоре [5] приводит лишь полученную по теории возмущений формулу для среднеквадра-

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

тичных флуктуаций потерь энергии. Именно формулу Фано считают строгим и общепринятым в рамках теории возмущений результатом. К строгим и общепринятым результатам следует отнести и релятивистское квантовомеханическое обобщение формулы Бора, полученное в работе [9] на основе точного решения уравнения Дирака для рассеяния свободных электронов в кулоновском поле тяжелого иона. Для флуктуаций же потерь энергии тяжелыми высокозарядными ионами на связанных атомных электронах до настоящего времени [1] нет как точных, так и приближенных общепринятых непертурбативных подходов. Здесь находят применение разнообразные полуколичественные формулы с подгоночными параметрами, определяемыми экспериментально.

Общей основой для непертурбативного рассмотрения флуктуаций энергетических потерь в области применимости подхода Блоха может служить приближение эйконала, включающее в себя оба предельных случая: борновское и квазиклассическое приближения. Ранее в работах [10–12] потери энергии быстрыми заряженными частицами при столкновениях с атомами были рассмотрены на основе приближения эйконала, позволяющего, в отличие от подхода Блоха, непертурбативно учесть вклад от области промежуточных (сравнимых с характерным размером атома) параметров удара. Такой учет непертурбативных эффектов может приводить к значительным (до 50%) поправкам к формуле Бете–Блоха.

В настоящей работе флуктуации потерь энергии быстрыми заряженными частицами при столкновениях с атомами рассмотрен на основе приближения эйконала. При проведении расчетов мы находились в области применимости нерелятивистского приближения эйконала: $v \gg v_a$, где $v_a \sim 1$ – характерная скорость электронов мишени, а значения параметра η могут быть любыми. В рамках границ применимости такие расчеты можно назвать точными (точнее, вносящими стандартную [13] и пренебрежимо малую погрешность). Вместе с тем технически эйкональные расчеты представляются довольно сложными. Эта же область обычно считается [6, 14] совпадающей с областью применимости подхода Блоха и тем самым с областью применимости формулы Титейка. Нами показано, что формула Титейка получается лишь в результате определенных пренебрежений в эйкональных расчетах. Ранее погрешности этих пренебрежений не оценивались. Введена непертурбативная поправка к формуле Титейка и предложена формула для ее оценок. Показано, что учет непертурбативных эффектов при больших значениях кулоновского параметра $\eta = Z/v$ приводит к значительным (до десяти раз) изменениям флуктуаций по сравнению с формулой Титейка. Именно это обстоятельство и является причиной "непопулярности" формулы Титейка, в отличии от полученной на основе подхода Блоха формулы Бете–Блоха для потерь энергии, относительная поправка к которой хотя и заметна ($\lesssim 50\%$), но намного меньше относительной поправки к формуле Титейка. В качестве примеров нами рассчитаны потери энергии быстрых высокозарядных ионов на атомах меди. Проведено сравнение с экспериментальными данными. Показано, что учет непертурбативных поправок приводит к заметному улучшению согласия с экспериментом по сравнению с расчетами по формулам Бора и Титейка. Это, несомненно, способствует уменьшению числа подгоночных параметров в различных модификациях данных формул, обычно определяемых полуэмпирическим путем.

2. Общая часть. Известно, что флуктуации потерь энергии при столкновениях быстрых заряженных частиц с атомами определяется как [5]

$$\Omega^2 = \sum_n \epsilon_{n,0}^2 \sigma_{n,0}, \tag{5}$$

где $\sigma_{n,0}$ – сечение перехода атома из состояния $|0\rangle$ с энергией ϵ_0 в состояние $|n\rangle$ с энергией ϵ_n, $\epsilon_{n,0} = \epsilon_n - \epsilon_0$, $\sum_n$ – суммирование по полному набору атомных состояний.

Рассмотрим сначала столкновение с атомом водорода. В приближении эйконала амплитуда неупругого столкновения движущегося с нерелятивистской скоростью иона с переходом атома из состояния $\mid 0\rangle$ в состояние $\mid n\rangle$ имеет вид

$$f_{n0} = \langle n \mid f \mid 0\rangle. \tag{6}$$

Здесь

$$f = \frac{ik_0}{2\pi} \int e^{-i\mathbf{qb}} \left(1 - \frac{|\mathbf{b}-\mathbf{s}|^{i\cdot 2\eta}}{|\mathbf{b}|^{i\cdot 2\eta}}\right) d^2b, \tag{7}$$

где $\mathbf{r} = (x, \mathbf{s})$ – координаты атомного электрона, $\mathbf{b}$ – параметр удара, $\mathbf{s}$ – проекция $\mathbf{r}$ на плоскость параметра удара, изменение импульса иона $\mathbf{q} = \mathbf{k}_n - \mathbf{k}_0$, $\mathbf{k}_0$ и $\mathbf{k}_n$ – импульс иона до и после столкновения. Сечение неупругого столкновения можно получить с помощью известной формулы [13]:

$$\sigma_{n,0} = \int \frac{k_n}{k_0} \mid f_{n0} \mid^2 d\omega = \frac{1}{v^2} \int\limits_{q_{\min} \le |\mathbf{q}| \le q_1} \mid f_{n0} \mid^2 d^2q, \tag{8}$$

где $d\omega$ – телесный угол рассеяния иона, область интегрирования по d^2q такая, что $q_{\min} \le |\mathbf{q}| \le q_1$, $q_{\min} = (\varepsilon_n - \varepsilon_0)/v$, $q_1 = 2v$. Кроме того, здесь учтено, что для малых углов рассеяния и $k_0 \approx k_n \approx k$ имеем $d\omega = d^2q/v^2$. Страгглинг

$$\Omega^2 = \frac{1}{v^2}\sum_n \epsilon_{n,0}^2 \int\limits_{q_{\min}\le|\mathbf{q}|\le q_1} d^2q \mid f_{n0} \mid^2 . \qquad (9)$$

Как и при рассмотрении потерь энергии в приближении эйконала[10], следуя [13], 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 Ω^2 в виде

$$\Omega^2 = \Omega_1^2 + \Omega_2^2. \qquad (10)$$

Область малых переданных импульсов ($q_{\min} \le q \le$ $\le q_0$) вносит вклад Ω_1^2, рассчитанный Фано [5] по теории возмущений:

$$\Omega_1^2 = \frac{1}{v^2}\sum_n \epsilon_{n,0}^2 \int\limits_{q_{\min}\le|\mathbf{q}|\le q_0} d^2q \mid f_{n0} \mid^2 = 8\pi\frac{Z^2}{v^2}\frac{2}{3}K\ln\frac{q_0 v}{I_{\mathrm{F}}}, \qquad (11)$$

где $K = \langle 0|\hat{K}|0\rangle$ – средняя кинетическая энергия атомного электрона, $\hat{K} = -(1/2)\nabla^2$ – оператор кинетической энергии, $\nabla = \partial/\partial\mathbf{r}$. Область больших переданных импульсов ($q_0 \le q \le q_1$) вносит вклад

$$\Omega_2^2 = \int\limits_{q_0\le|\mathbf{q}|\le q_1} \frac{d^2q}{v^2}\sum_n \epsilon_{n,0}^2 \mid f_{n0} \mid^2 = -\int\limits_{q_0\le|\mathbf{q}|\le q_1} \frac{d^2q}{v^2}\langle 0|[\hat{H}, f^*][\hat{H}, f]|0\rangle, \qquad (12)$$

где $\hat{H}$ – гамильтониан атомного электрона. Используя значения коммутатора

$$[\hat{H}, f] = -\frac{1}{2}\big((\nabla^2 f) + 2(\nabla f)\cdot\nabla\big),$$

нетрудно, но несколько громоздко можно получить

$$\Omega_2^2 = \int\limits_{q_0\le|\mathbf{q}|\le q_1} \left[\langle 0|\frac{1}{4}(\nabla^2 f^*)(\nabla^2 f)|0\rangle - \langle 0|(\nabla f^*)\cdot(\nabla f)\frac{1}{3}\nabla^2|0\rangle\right]\frac{d^2q}{v^2}. \qquad (13)$$

Этот результат в принципе понятен, если учитывать, что векторы (∇f) и (∇f^*) одинаково направлены, а операторы $(\nabla f^*)\nabla$ и $(\nabla f)\nabla$ пропорциональны оператору скорости в выделенном направлении и средние от них по основному состоянию равны нулю.

В случае применимости теории возмущений, т.е. при малых Z/v, вклад от области больших q вычисляется следующим образом. Будем обозначать амплитуду (7), вычисленную в первом порядке теории возмущений по рассеивающему потенциалу U, как f_0:

$$f_0 = 2Ze^{-i\mathbf{qs}}\frac{1}{q^2}. \qquad (14)$$

Подставляя $f = f_0$ в формулу (13), получим

$$\Omega_2^2 = 2\pi\frac{Z^2}{v^2}\int\limits_{q_0}^{q_1}\langle 0|q^4 - 4(\mathbf{q}\nabla)^2|0\rangle\frac{dq}{q^3} = \pi\frac{Z^2}{v^2}(q_1^2 - q_0^2) + 8\pi\frac{Z^2}{v^2}\frac{2}{3}K\ln\frac{q_1}{q_0}. \qquad (15)$$

Складывая (11) и (15) при $q_0 \ll q_1 = 2v$, получим формулу Фано (2) при $N = 1$.

Вернемся к непертурбативному подходу. В соответствии с двумя слагаемыми в (13) представим вклад от области больших импульсов как

$$\Omega_2^2 = \Omega_{2,1}^2 + \Omega_{2,2}^2, \qquad (16)$$

где

$$\Omega_{2,1}^2 = \frac{1}{4}\int\limits_{q_0\le|\mathbf{q}|\le q_1}\langle 0|(\nabla^2 f^*)(\nabla^2 f)|0\rangle\frac{d^2q}{v^2}, \qquad (17)$$

$$\Omega_{2,2}^2 = \int\limits_{q_0\le|\mathbf{q}|\le q_1}\langle 0|(\nabla f^*)(\nabla f)\frac{2}{3}\hat{K}|0\rangle\frac{d^2q}{v^2}. \qquad (18)$$

Рассмотрим $\Omega_{2,1}^2$, представленное формулой (17). Используя явное выражение (7) для амплитуды, можно получить

$$\Omega_{2,1}^2 = 4\pi Z^2\left(1 + I_1 + I_1^* + I_2\right), \qquad (19)$$

где

$$I_1 = \frac{2^{1+2i\eta}}{8\pi^2 Z^2}\eta^2\int\limits_{q_0\le|\mathbf{q}|\le q_1}\frac{d^2q}{q^{i\cdot 2\eta}} < 0|\frac{\Gamma(1+i\eta)}{\Gamma(-i\eta)}e^{i\mathbf{qs}} \times s^{-i\cdot 2\eta}\int d^2b e^{-i\mathbf{qb}}(b^{i\cdot 2\eta} - s^{i\cdot 2\eta})\frac{|\mathbf{b}-\mathbf{s}|^{-2i\eta}}{|\mathbf{b}-\mathbf{s}|^2}|0\rangle, \qquad (20)$$

$$I_2 = \frac{1}{\pi Z^2}\frac{1}{(2\pi)^2}\eta^4\int\limits_{q_0\le|\mathbf{q}|\le q_1} d^2q \times \left|\langle 0|\int d^2b e^{i\mathbf{qb}}(b^{-i\cdot 2\eta} - s^{-i\cdot 2\eta})\frac{|\mathbf{b}-\mathbf{s}|^{2i\eta}}{|\mathbf{b}-\mathbf{s}|^2}|0\rangle\right|^2. \qquad (21)$$

Рассмотрим теперь $\Omega^2_{2,2}$. Для этого перепишем (18) как

$$\Omega^2_{2,2} = \int\limits_{q_0 \le |\mathbf{q}| \le q_1} \Big\{ \langle 0 | [(\nabla f^*)(\nabla f) - (\nabla f_0^*)(\nabla f_0)] \frac{2}{3} \hat{K} | 0 \rangle \Big\} \frac{d^2 q}{v^2} + \int\limits_{q_0 \le |\mathbf{q}| \le q_1} \langle 0 | (\nabla f_0^*)(\nabla f_0) \frac{2}{3} \hat{K} | 0 \rangle \frac{d^2 q}{v^2}. \tag{22}$$

Последний интеграл в этой формуле с учетом явного вида (14) амплитуды f_0 легко вычисляется. Он равен

$$4\pi \frac{Z^2}{v^2} \frac{4}{3} K \ln \frac{q_1}{q_0}. \tag{23}$$

В результате имеем

$$\Omega^2_{2,2} = 4\pi Z^2 \left(\frac{1}{v^2} \frac{4}{3} K \ln \frac{q_1}{q_0} + I_0 \right), \tag{24}$$

где

$$I_0 = \frac{1}{4\pi Z^2} \int\limits_{q_0 \le |\mathbf{q}| \le q_1} \Big\{ \langle 0 | [\nabla f^*)(\nabla f) - (\nabla f_0^*)(\nabla f_0)] \frac{2}{3} \hat{K} | 0 \rangle \Big\} \frac{d^2 q}{v^2}. \tag{25}$$

Преобразуем этот интеграл, используя для амплитуды f явный вид (7) и формулу (14):

$$I_0 = \frac{1}{v^2} \frac{4}{3} K L, \tag{26}$$

где

$$L = \frac{1}{\langle 0 | \hat{K} | 0 \rangle} \int\limits_{q_0 \le q \le q_1} d^2 q \int d^2 b \int d^2 b' \times \frac{\exp(-i\mathbf{qb})\exp(i\mathbf{qb}')}{(2\pi)^3} \frac{\mathbf{bb}'}{b^2 b'^2} \times \langle 0 | \left[\left(\frac{|\mathbf{b} + \mathbf{s}|}{b} \right)^{-2i\eta} \left(\frac{|\mathbf{b}' + \mathbf{s}|}{b'} \right)^{2i\eta} - 1 \right] \hat{K} | 0 \rangle. \tag{27}$$

Суммируя (11), (19) и (24) (согласно (10) и (16)), получим непертурбативную формулу для флуктуаций:

$$\Omega^2 = 4\pi Z^2 \left(1 + \frac{1}{v^2} \frac{4}{3} K \ln \frac{2v^2}{I_{\mathrm{F}}} + \Delta_{\mathrm{F}} \right), \tag{28}$$

где

$$\Delta_{\mathrm{F}} = I_0 + I_1 + I_1^* + I_2. \tag{29}$$

Очевидно, что $4\pi Z^2 \Delta_{\mathrm{F}}$ представляет собой квантовомеханическую непертурбативную поправку к формуле Фано (2).

3. Расчеты и оценки для простейшей мишени. Входящие в (29) интегралы могут быть точно рассчитаны лишь численно. Однако для них можно приложить простые приближенные выражения. Возможность получения таких выражений связана с тем, что Δ_{F} представляет непертурбативный вклад, т.е. заметно отличается от нуля лишь при $Z/v \ge 1$. Рассмотрим сначала оценку интеграла I_0, который согласно (26) и (27) выражается через интеграл L. Этот интеграл относится к типу интегралов, которые мы ранее оценивали в статье [11]. Действительно, в (27) действие оператора кинетической энергии на волновую функцию основного состояния сводится к ее умножению на функцию $\epsilon_0 + 1/r$. Таким образом, интеграл (27) отличается от рассмотренного в [11] интеграла (формула (60) статьи [11]) лишь переопределением волновой функции основного состояния. Действуя так же, как в [11], получим

$$L = \Delta L^{\mathrm{Bloch}} + \Delta L. \tag{30}$$

Здесь

$$\Delta L = \gamma + K_0(2x) + \ln(x), \tag{31}$$

где $\gamma = 0.5772$ – постоянная Эйлера, $K_0(2x)$ – функция Макдональда, $x = (2\beta^{\mathrm{F}})^{1/2}\eta/v$, $\beta^{\mathrm{F}} = 1.85$. Другими словами, функциональная зависимость ΔL остается такой же, как и в работе [11] (формула (63)). Однако значения параметра обрезания, обозначенного в [11] через β, стали другими. Поэтому здесь введено обозначение β^{F}. Строго говоря, формула (31) получена для больших $\eta \gg 1$ (ср. с [11]). Однако вклад, вносимый в Ω^2 поправкой ΔL при $\eta \le 1$, пренебрежимо мал. Поэтому формулу (31) можно использовать для произвольных η. Таким образом, с относительной погрешностью не более 3% (как и в [11]) интеграл (26) представляется как

$$I_0 = \frac{1}{v^2} \frac{4}{3} K \left[\Delta L^{\mathrm{Bloch}} + \gamma + K_0(2x) + \ln x \right]. \tag{32}$$

Следует отметить, что в статье [11] функциональная зависимость типа (31) получена путем рассмотрения асимптотических по $\eta \gg 1$ выражений. Для входящих в (29) интегралов I_1 и I_2 провести подобные выкладки не удается из-за их крайней сложности. Для того чтобы получить аналитическую аппроксимацию для суммы $I_1 + I_1^* + I_2$, мы рассчитали ее численно, изменяя относительную скорость столкновения и заряд налетающего иона в широких пределах: $3 \le v \le 100$

и $1 \le Z \le 100$. Представив графически полученные численные результаты, мы обнаружили, что с относительной ошибкой не более 5% справедлива следующая аппроксимация:

$$I_1 + I_1^* + I_2 = (1.57\eta/v)^3 \,/\, \left[1 + (1.57\eta/v)^2\right]. \quad (33)$$

Таким образом, с учетом (32) и (33) формула (29) для непертурбативной поправки к формуле Фано (2) примет вид

$$\Delta_{\rm F} = \frac{1}{v^2}\frac{4}{3}K\Delta L^{\rm Bloch} + \Delta, \quad (34)$$

где

$$\Delta = \frac{1}{v^2}\frac{4}{3}K\left[\gamma + K_0(2x) + \ln x\right] + \\ + (1.57\eta/v)^3 \,/\, \left[1 + (1.57\eta/v)^2\right]. \quad (35)$$

Поэтому формулу (28) для непертурбативных флуктуаций с учетом (34) и (35) удобно записать как

$$\Omega^2 = 4\pi Z^2\left[1 + \frac{1}{v^2}\frac{4}{3}K\left(\ln\frac{2v^2}{I_F} + \Delta L^{\rm Bloch}\right) + \Delta\right]. \quad (36)$$

Рисунки 1–3 позволяют сравнить рассчитанное по формуле (36) Ω^2 с $\Omega^2_{\rm T}$ и $\Omega^2_{\rm F}$ при различных значениях

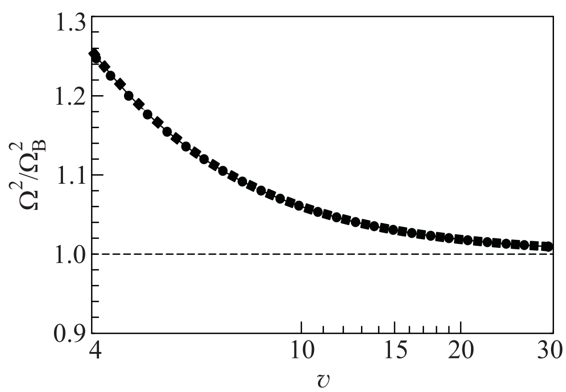

Рис. 1. Зависимость энергетических флуктуаций от относительной скорости столкновения v для заряда снаряда $Z = 1$: сплошная линия – $\Omega^2/\Omega^2_{\rm B}$; квадраты – $\Omega^2_{\rm F}/\Omega^2_{\rm B}$; кружки – $\Omega^2_{\rm T}/\Omega^2_{\rm B}$. Все величины флуктуаций отнесены к боровским флуктуациям, поэтому $\Omega^2_{\rm B}$ соответствует горизонтальная штриховая линия, проходящая через единицу

скорости и заряда снаряда: $4 \le v \le 30$ и $Z = 10$, 20 и 92. Поскольку эти рисунки носят иллюстративный характер, на них приведены значения Ω^2_F во всем диапазоне скоростей и зарядов снаряда, хотя формула Фано применима лишь при $Z/v \ll 1$.

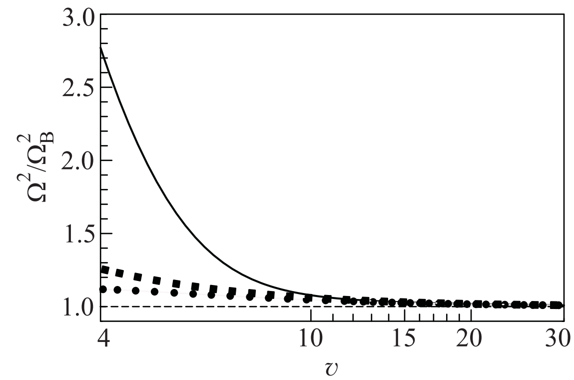

Рис. 2. То же, что на рис. 1, при $Z = 20$

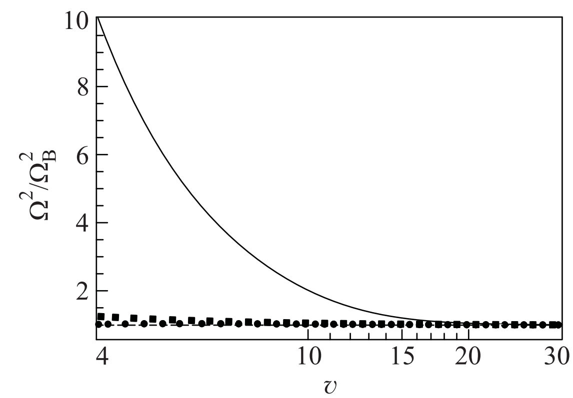

Рис. 3. То же, что на рис. 1, при $Z = 92$

Сравнивая (36) с (4), получаем, что Δ описывает непертурбативную поправку к формуле Титейка. В (35) $x = (2\beta^{\rm F})^{1/2}\eta/v = 1.93\eta/v$. Поэтому при $\eta/v \ll 1$ поправка Δ обращается в нуль с точностью до величин, меньших или порядка $(\eta/v)^2$. Таким образом, формула Титейка (4) применима при $\eta/v \ll 1$ (или при $Z \ll v^2$), а при $\eta \ll 1$ она совпадает с формулой Фано. При этом, всегда $v \gg 1$, постольку наибольшие неточности при применении формулы Титейка возникают при больших $\eta \gg 1$. Поведение $\Omega^2/\Omega^2_{\rm T}$ в зависимости от скорости снаряда, меняющейся в пределах $4 \le v \le 30$, для значений заряда снаряда $Z = 10$, 20 и 92 проиллюстрировано на рис. 4.

4. Формула для расчета энергетических флуктуация на сложных атомах. Для обобщения наших результатов на сложные атомы мы будем действовать так же, как в [12]. Сначала по формуле (27) проведем численные расчеты L для атома водорода, находящегося до столкновения в произвольном состоянии $|nlm\rangle$ (где n – главное квантовое число, l – орбитальный момент, m – его проекция). Найденные таким образом значения L мы будем обозначать L_{nlm}. Далее найдем соответствующую непертурбативную

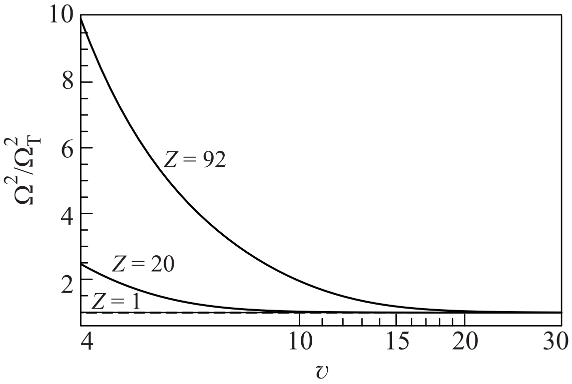

Рис. 4. Зависимость $\Omega^2/\Omega_\mathrm{T}^2$ от относительной скорости столкновения v для значений заряда снаряда $Z = 1$, 20 и 92 при столкновении с атомом водорода

оболочечную поправку $\Delta L_{nlm} = L_{nlm} - \Delta L^{\mathrm{Bloh}}$. Затем получим среднее по орбитальному моменту и его проекции:

$$\Delta L_n = \frac{1}{n^2}\sum_{l=0}^{n-1}\sum_{m=-l}^{m=l}\Delta L_{nlm}. \qquad (37)$$

Приравнивая вычисленные значения ΔL_n выражению (31), мы провели численные расчеты значений параметра β^{F} для атомов водорода, находящихся до столкновения в состояниях с различными значениями главного квантового числа n. Ниже мы будем обозначать эти значения как β^{F}_n. Другими словами, β^{F}_n – это значение параметра β^{F}, при котором формула (31) воспроизводит значения ΔL_n (ср. [12]). При выполнении расчетов мы изменяли относительную скорость столкновения и заряд налетающего иона в широких пределах: $4 \le v \le 100$ и $1 \le Z \le 100$. В итоге мы получили следующие значения β^{F}_n, которые будут использоваться для дальнейших расчетов:

$$\begin{aligned}\beta^{\mathrm{F}}_{n=1} &= 1.85;\\ \beta^{\mathrm{F}}_{n=2} &= 0.0502;\\ \beta^{\mathrm{F}}_{n=3} &= 0.00541;\\ \beta^{\mathrm{F}}_{n=4} &= 0.00310.\end{aligned} \qquad (38)$$

Рассмотрим теперь сумму $I_2 + I_2^* + I_3$ для атома водорода, находящегося до столкновения в произвольном состоянии $|nlm\rangle$. Соответствующие значения суммы мы будем обозначать как $(I_2+I_2^*+I_3)_{nlm}$. Введем среднее по орбитальному моменту и его проекции:

$$(I_2 + I_2^* + I_3)_n = \frac{1}{n^2}\sum_{l=0}^{n-1}\sum_{m=-l}^{m=l}(I_2 + I_2^* + I_3)_{nlm}. \qquad (39)$$

Проведя численные расчеты, как и при $n = 1$, получим, что (39) можно аппроксимировать с той же точностью, что и (33), функцией

$$(I_2 + I_2^* + I_3)_n = \left(\frac{1.57\eta}{n^2 v}\right)^3 \Bigg/ \left[1 + \left(\frac{1.57\eta}{n^2 v}\right)^2\right]. \qquad (40)$$

Для водородоподобного атома с эффективным зарядом ядра Z_a, как и в работе [12], следует заменить v на v/Z_a. Соответственно в формуле (31) аргумент x заменяется на $(2\beta_n)^{1/2} Z_a\eta/v$, а в формуле (40) выражение $1.57\eta/(n^2 v)$ – на $1.57 Z_a\eta/(n^2 v)$.

Воспользуемся результатами, полученными для водородоподобного атома, для того чтобы найти непертурбативную поправку Δ для сложного многоэлектронного атома. Для проведения оценок сделаем (как в работе [12]) следующие упрощающие предположения для описания многоэлектронного атома. Будем считать электроны различимыми, а их состояния будем описывать одноэлектронными волновыми функциями в среднем поле. Ниже при описании состояний многоэлектронного атома мы будем использовать водородоподобные функции $|nlm>$ с эффективными зарядами $Z_a^{(n,l)}$, определяемыми согласно правилам (аналогичным известным правилам Слейтера [15]), предложенным в статье [16]. Заменяя среднюю энергию возбуждения атома при столкновении с ионом (формула (7) статьи [12]) на средний квадрат энергии возбуждения атома:

$$\overline{\epsilon^2} = \sum_n (\epsilon_n - \epsilon_0)^2 W_n\ ,$$

и следуя рассуждениям от формулы (7) статьи [12] до формулы (13) той же статьи, получаем обобщение формулы (36) для флуктуаций на сложных атомах:

$$\Omega^2 = 4\pi Z^2 N\left[1 + \frac{4}{3v^2}K\left(\ln\frac{2v^2}{I_{\mathrm{F}}} + \Delta L^{\mathrm{Bloch}}\right) + \Delta\right]. \qquad (41)$$

Здесь N – число атомных электронов, $K = \frac{1}{2N}\langle 0|\sum_{i=1}^N \hat{\mathbf{p}}_i^2|0\rangle$ – средняя кинетическая энергия электрона в атоме, I_F – ионизационный потенциал Фано [5] для сложного атома, Δ – непертурбативная поправка к формуле Титейка для сложного атома, имеющая вид

$$\Delta = \frac{1}{N}\sum_{n,l} N_{n,l}\Delta_{n,l}, \qquad (42)$$

где $N_{n,l}$ – число атомных электронов в состояниях с квантовыми числами n, l, суммирование производится только по заполненным состояниям и общему числу $\sum_{n,l} N_{n,l} = N$ электронов в данном атоме (напомним, что речь идет о числах заполнения $N_{n,l}$ для атома, находящегося до столкновения в основном состоянии) и в соответствии с (35)

$$\Delta_{n,l} = \frac{4K}{3v^2}\left\{\gamma + K_0\left[2\frac{(2\beta_n^{\mathrm{F}})^{1/2} Z Z_a^{(n,l)}}{v^2}\right] + \right.$$
$$\left. + \ln\left[\frac{(2\beta_n^F)^{1/2} Z Z_a^{(n,l)}}{v^2}\right]\right\} +$$
$$+ \left(\frac{1.57 Z Z_a^{(n,l)}}{n^2 v^2}\right)^3 \left[1 + \left(\frac{1.57 Z Z_a^{(n,l)}}{n^2 v^2}\right)^2\right]^{-1}. \quad (43)$$

На рис. 5 приведены экспериментальные данные [17] (лежащие вне области применимости теории воз-

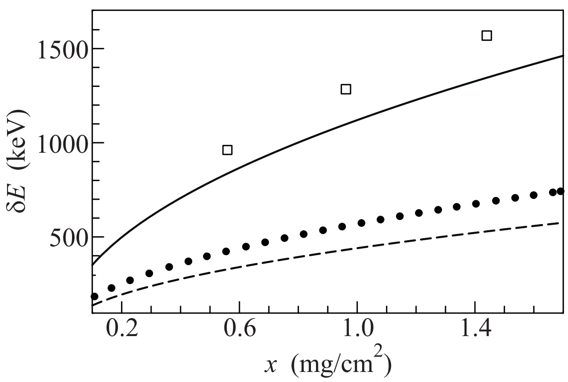

Рис. 5. Зависимость δE от толщины мишени x для ионов йода (с энергией 1.467 мэВ/нуклон), сталкивающихся с медной мишенью: квадраты – экспериментальные данные [17]; сплошная линия – результаты наших расчетов величины δE с Ω^2, вычисленной в приближении эйконала; кружки – результаты расчетов δE с использованием для флуктуаций формулы Титейка (4); штриховая линия – результаты расчетов δE с использованием для флуктуаций формулы Бора (1)

мущений и формулы Фано) и результаты наших расчетов ширины энергетических флуктуаций δE, связанные с флуктуациями Ω^2 соотношением [17]:

$$\delta E = 2(2\ln 2)^{1/2}\sqrt{\Omega^2 x}, \quad (44)$$

где x – толщина поглотителя (пленки). При расчетах с целью исключения подгоночных параметров мы, как и в [12], использовали эффективный заряд тормозящегося иона Z в виде [14, 18, 19], согласующиеся с оценками Бора [20, 21]:

$$Z = Z_0\left[1 - \exp\left(-v/Z_0^{2/3}\right)\right],$$

где Z_0 – заряд голого иона (для ионов йода $Z_0 = 53$).

Несмотря на отсутствие в наших расчетах подгоночных параметров, при учете непертурбативной поправки Δ к формуле Титейка наблюдается заметное улучшение согласия с экспериментальными данными.

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта Президента РФ # МК-3592.2011.2.

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. N. Bohr, Mat.-Fys. Meddr. Dansk. K. Vidensk Selsk. **18** (1948).
3. Н. Бор, *Избранные труды*, М.: Наука, 1970, т. 1.
4. M. S. Livingston and H. Bethe, Rev. Mod. Phys. **9**, 245 (1937).
5. U. Fano, Ann. Rev. Nucl. Sci. **13**, 1 (1963).
6. F. Bloch, Ann. der Phys. **16**, 285 (1933).
7. S. Titeica, Bul. Soc. Romanaie Phys. **38**, 81 (1939).
8. H. A. Bethe, Ann. Phys., Lpz. **5**, 324 (1930).
9. J. Lindhard and A. Sorensen, Phys. Rev. A **53**, 2443 (1996).
10. В. И. Матвеев, Д. Н. Макаров, Е. С. Гусаревич, Письма в ЖЭТФ **92**, 317 (2010).
11. В. И. Матвеев, Д. Н. Макаров, Е. С. Гусаревич, ЖЭТФ **139**, 868 (2011).
12. В. И. Матвеев, Д. Н. Макаров, Письма в ЖЭТФ **94**, 3 (2011).
13. Л. Д. Ландау, Е. М. Лифщиц, *Квантовая механика*, М.: Наука, 1989, 768 с.
14. J. F. Ziegler, Appl. Phys. A: Mater. Sci. Process. **85**, 1249 (1999).
15. J.C. Slater, Phys. Rev. **36**, 57 (1930).
16. G. Burns, J. Chem. Phys. **41**, 1521 (1964).
17. S. Ouichaoui, E. Hourani, L. Rosier et al., Nucl. Instr. and Meth. B **164-165**, 259 (2000).
18. L. C. Northcliffe, Phys. Rev. **120**, 1744 (1960).
19. N. J. Carron, *An Introduction to the Passage of Energetic Particles through Matter*, CRC Press, Taylor and Francis Group, N.Y.–London, 2007.
20. N. Bohr, Phys. Rev. **58**, 654 (1940).
21. N. Bohr, Phys. Rev. **59**, 279 (1941).