

## Краткие сообщения

02

### К теории ионизационного торможения быстрых заряженных частиц

© Д.Н. Макаров

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

(Поступило в Редакцию 20 ноября 2015 г.)

Рассмотрены моменты в теории торможения быстрых заряженных частиц при столкновениях с осциллятором в дипольном приближении. В этом приближении задача решается точно и находятся моменты осциллятора из начального состояния  $|m\rangle = |0\rangle$  в виде суммы одномерных интегралов. Рассмотренный метод позволяет рассчитывать моменты при скоростях иона, близких к атомным  $v \sim v_a$ .

#### Введение

В теории ионизационного торможения при прохождении через вещество быстрых заряженных частиц обычно исследуют теоретически и экспериментально потери энергии иона и флуктуации потерь энергии [1]. Но когда размеры мишени таковы, что ее уже нельзя считать толстым поглотителем, необходимы расчеты так называемых моментов, которые задают не гауссовое распределение по энергиям, вышедших из поглотителя частиц. Согласно [2,3], при

$$2\pi \left(\frac{Z}{v}\right)^2 Nn\Delta x \ll 2v^2, \quad (1)$$

поглотитель можно назвать толстым. В выражении (1)  $Z, v$  — соответственно заряд налетающей частицы и ее скорость,  $N$  — число электронов в атоме,  $n$  — концентрация атомов,  $x$  — толщина поглотителя (здесь и везде далее используются атомные единицы). Моментом называют величину, которая рассчитывается в виде [4,5]

$$M^{\nu} = \sum_{All} (\varepsilon_n - \varepsilon_0)^{\nu} \sigma_{n,0}, \quad (2)$$

где при  $\nu = 1$  — потери энергии,  $\nu = 2$  — флуктуации энергетических потерь, а при  $\nu = 3, 4, 5, \dots$  обычно используют термин момент 3, 4, 5, ... соответственно. Суммирование в (2) ведется по всем возможным состояниям атома мишени, а  $\sigma_{n,0}$  — сечение перехода атома из основного состояния в произвольное  $|n\rangle$ .

Недавно в работах [6,7] был развит подход по расчету потерь энергии [6] и флуктуации потерь энергии [7], где атом был представлен в виде квантового осциллятора, а при взаимодействии заряженной частицы с атомом использовался дипольный подход. В таком подходе задача по расчету потерь энергии и флуктуации потерь энергии решалась точно, без использования каких-либо приближений. Также в работах [6,7] было показано, что развитая теория переходит при  $v \gg v_a$  в теорию Бете-Блоха для потерь энергии и в теорию Титейка для флуктуаций. Преимущество развитой теории по сравнению

с теориями Бете-Блоха и Титейка в том, что возможен расчет при скоростях заряженной частицы, близкой к атомным, чего не было сделано ранее. Поэтому развитие теории, представленной в [6,7] на случай расчета любых моментов, является актуальным.

#### Метод решения. Расчет моментов

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

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

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

$$i \frac{\partial \Psi}{\partial t} = \left( -\frac{\Delta}{2} + \frac{\omega^2 r^2}{2} - \frac{Z\mathbf{R}\mathbf{r}}{R^3} \right) \Psi. \quad (4)$$

Следует сказать, что мы пренебрегли оператором  $-\frac{\Delta(R)}{2}$ , 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 (4) решено [7] и амплитуда перехода осциллятора из состояния

$|m\rangle = |m_x + m_y + m_z\rangle$  в  $|n\rangle = |n_x + n_y + n_z\rangle$  будет

$$|a_{n,m}|^2 = \frac{m_z!m_x!m_y!}{n_z!n_x!n_y!} \left(\frac{|Q_z|^2}{2\omega}\right)^{n_z-m_z} \left(\frac{Q_x^2}{2\omega}\right)^{n_x-m_x} \times \left(\frac{Q_y^2}{2\omega}\right)^{n_y-m_y} \left(L_{m_z}^{n_z-m_z}\left(\frac{|Q_z|^2}{2\omega}\right)\right)^2 \left(L_{m_x}^{n_x-m_x}\left(\frac{Q_x^2}{2\omega}\right)\right)^2 \times \left(L_{m_y}^{n_y-m_y}\left(\frac{Q_y^2}{2\omega}\right)\right)^2 \exp\left(-\frac{QQ^*}{2\omega}\right), \quad (5)$$

где  $\mathbf{Q} = \frac{2Z\omega}{v^2}(K_1(\frac{\omega}{n}\mathbf{b})\mathbf{b}/b + iK_0(\frac{\omega}{v}n)\mathbf{k})$ ,  $\mathbf{k}$  — единичная орта,  $K_0$  и  $K_1$  — функции Макдональда, \* — комплексное сопряжение,  $|x|^2 = xx^*$ ,  $L_b^a$  — полином Лагерра. Далее рассчитаем моменты, согласно (2), представив сечение в виде

$$\sigma_{b,0} = \int_{b_{\min} \leq b \leq b_{\max}} d^2b |a_{n,0}|^2. \quad (6)$$

Поскольку для осциллятора при переходах с одного состояния 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 в (2) ведется до некоторого  $n^{\max}$ , связанным с минимальной переданной энергией электрону, которое найдено в [7]. Известно, что энергия трехмерного квантового осциллятора  $\epsilon_n = \omega(n + 3/2)$ , тогда  $M^v = \omega^v \sum_{All} n^v \sigma_{n,0}$ , где

$$|a_{n,0}|^2 = \exp\left(-\frac{1}{2\omega} QQ^*\right) \frac{1}{n_z!n_x!n_y!} \times \left(\frac{|Q_z|^2}{2\omega}\right)^{n_z} \left(\frac{Q_x^2}{2\omega}\right)^{n_x} \left(\frac{Q_y^2}{2\omega}\right)^{n_y}. \quad (7)$$

Просуммировать выражение (6) напрямую нельзя, так как  $b_{\max}$  — зависит от  $n$ , но его можно упростить аналогично тому, как это было сделано в [7], в результате получим

$$M^v = \omega^v \sum_{n=0}^{n_{\max}} \frac{nb^v}{n!} \times \int_{b_{\min} \leq b \leq b_{\max}} \exp\left(-\frac{1}{2\omega} QQ^*\right) \left(\frac{1}{2\omega} QQ^*\right)^n d^2b, \quad (8)$$

$\frac{QQ^*}{2}$  — является классической энергией, переданной электрону при столкновении [8,9]. Для дальнейших расчетов удобно интегрировать не по  $b$ , а сделать замену переменных  $x = K_1^2(y) + K_0^2(y)$ , где  $y = \frac{\omega}{v}b$ , в итоге получим

$$M^v = \pi\omega^{v-1} \frac{a}{b} \sum_{n=0}^{[a]} \frac{n^v}{n!} \int_{n^2/a}^a \exp(-x)x^n F(x/b)dx, \quad (9)$$

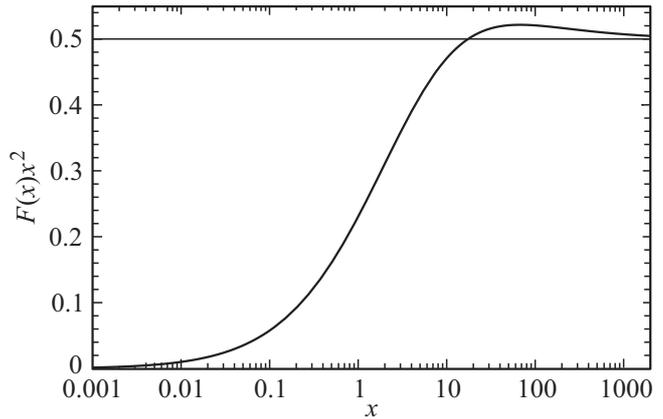


Рис. 1. Представлена зависимость величины  $F(x)x^2$  в выражении (10), получаемая при численном решении.

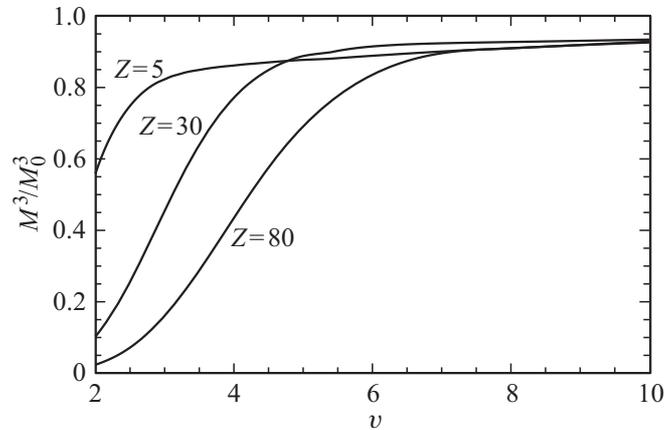


Рис. 2. Результаты расчета отношения  $\frac{M^v}{M_0^v}$  при  $\nu = 3$ .

где  $b = \frac{Z}{\omega v^3} \frac{Z}{v}$ ,  $a = \frac{2v^2}{\omega} \rightarrow \infty$ ,  $[a]$  в сумме (9) означает, что суммирование идет до наименьшего целого значения  $a$

$$F(x) = \frac{y(x)}{K_1(y(x))(3K_0(y(x)) + K_2(y(x)))}, \quad (10)$$

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 (9) является окончательным при расчетах моментов с  $m = 0$  состояния.

В качестве примера рассмотрим случай перехода рассмотренного подхода в классический предел, т.е.  $\hbar \rightarrow 0$ . Для потерь и флуктуаций энергии это было сделано в [6,7], где результат совпал с ранее известными формулами классической физики, поэтому нас будут интересовать  $\nu = 3, 4, 5, \dots$ . Было показано в [6,7], что при  $\hbar \rightarrow 0$  параметр  $a = 2v^2/\omega \rightarrow \infty$ , после чего нетрудно получить классический предел

$$M_0^v = \frac{2^v \pi Z^2 v^{2\nu-4}}{\nu - 1} \quad (11)$$

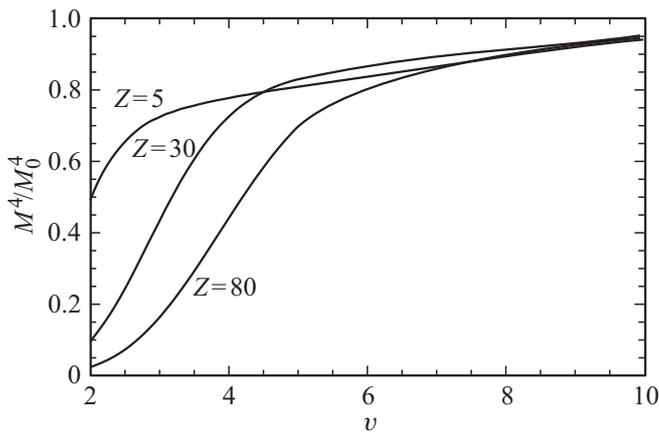


Рис. 3. Результаты расчета отношения  $\frac{M^v}{M_0^v}$  при  $v = 4$ .

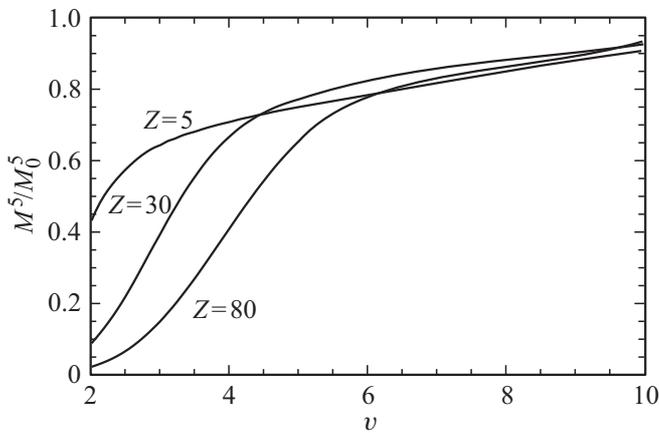


Рис. 4. Результаты расчета отношения  $\frac{M^v}{M_0^v}$  при  $v = 5$ .

Результат (11) совпал с формулами для моментов в классической физике [4,5]. Несмотря на то что в решении используются точные амплитуды, из (9) видно, что максимально возможный переданный импульс больше минимально переданного, когда выполняется условие  $a > n^2/a$ , а суммирование в (9) 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  $\frac{2v^2}{\omega} > 1$ .

Сравним наш подход с наиболее часто используемыми формулами для моментов, которые получены в классическом случае и имеют вид (11). Результаты расчетов представлены отношением  $\frac{M^v}{M_0^v}$  на рис. 2–4, при скоростях иона от  $v = 2$  до  $v = 10$  (скорость в атомных единицах), при  $\omega = 1/2$  (такой частоте соответствует потенциал ионизации атома водорода), заряды иона  $Z = 5, 30, 80$ .

### Заключение

Таким образом, развита теория по расчету моментов 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. Показано, что рассмотренные моменты сильно отличаются от ранее известных (часто используемых, формула (11)) при скоростях иона, близких к атомным. Очевидно, что рассмотренный подход точнее (11), поскольку выражение (11) является предельным случаем выражения (9). Кроме того, как показано в [6,7], что рассмотренный метод переходит в ранее известные теории при определенных пренебрежениях, а значит, этот подход более общий. Полученные результаты легко обобщить на случай многоэлектронного атома, для этого надо выражение (9) умножить на число электронов в атоме  $N_a$  и заменить  $\omega = I$  [8].

Работа выполнена в рамках КГЗ Министерства образования и науки РФ (№ 3.1726.2014/К) и стипендии Президента РФ (СП-1800.2015.1). Автор выражает благодарность В.И. Матвееву за ценные советы и обсуждение работы.

### Список литературы

- [1] Ziegler J.F. // J. Appl. Phys. 1999. Vol. 85. P. 1249.
- [2] Вавилов П.В. // ЖЭТФ. 1957. Т. 32. С. 920.
- [3] Landau L. // J. Physics (USSR). 1944. Vol. 8. P. 201.
- [4] Mikkelsen H.H., Meibom A., Sigmund P. // Phys. Rev. A. 1992. Vol. 46. P. 7012.
- [5] Sigmund P., Johannessen K. // NIMB. 1985. Vol. 6. P. 486.
- [6] Макаров Д.Н. // ЖТФ. 2015. Т. 85. С. 12.
- [7] Макаров Д.Н. // ЖЭТФ. 2014. Т. 146. С. 711.
- [8] Sigmund P., Haagerup U. // Phys. Rev. A. 1986. Vol. 34. P. 892.
- [9] Бор Н. // Избранные труды. Т. 1. М.: Наука, 1970. 584 с.