

ПРИБЛИЖЕНИЕ ЭЙКОНАЛА В ТЕОРИИ ПОТЕРЬ ЭНЕРГИИ БЫСТРЫМИ ЗАРЯЖЕННЫМИ ЧАСТИЦАМИ

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

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

Поступила в редакцию 31 мая 2010 г.

Потери энергии быстрых заряженных частиц 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 по сравнению с рассчитываемыми по теории возмущений оболочечными поправками к формуле Бете–Блоха. Найдено, при каких упрощающих предположениях формула Бете–Блоха может быть получена в приближении эйконала. Показано, что учет непертурбативных эффектов может приводить к значительным (до 50 %) поправкам к формуле Бете–Блоха. Проведен анализ области применимости формулы Бете–Блоха. Делается вывод о том, что расчеты потерь энергии в приближении эйконала (в области параметров столкновения, при которых обычно используют формулу Бете–Блоха) существенно предпочтительнее рассмотрения на основе формулы Бете–Блоха и ее модификаций, поскольку не только учитывают поправку Блоха, но и непертурбативно учитывают область промежуточных параметров удара, а также допускают непосредственное обобщение на случаи столкновений сложных снарядов и мишеней.

1. ВВЕДЕНИЕ

Известно, что трудно переоценить роль формулы Бете–Блоха для потерь энергии при столкновениях быстрых заряженных частиц с атомами. Параметры, входящие в эту формулу, могут быть либо рассчитаны, либо получены из эксперимента. Именно последнее, совместно с простотой записи и интерпретации, обеспечивает исключительно широкую область ее применимости. 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. Во многих случаях приходится учитывать потери энергии на возбуждение и ионизацию одновременно снаряда и мишени (см., например, работы [2, 3]). Так, в случае выбора частично «ободранных» структурных ионов в качестве снарядов и сложных многоатомных мишеней удается проделать подобный учет

за счет модельных предположений и провести значительную часть выкладок аналитически с использованием формул типа Бете–Блоха [4]. При выборе сложных мишеней, например молекул или наночастиц, 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 последовательно рассматривать столкновения сложных снарядов и мишеней. В работе [5], в рамках модифицированного полуклассического эйконального приближения [6, 7], рассчитаны потери энергии полностью ободранными ионами при столкновениях с атомами водорода, свободным электронным газом и гармоническими осцилляторами при

*E-mail: matveev.victor@pomorsu.ru

промежуточных и высоких энергиях ионов. Такой диапазон мишеней был выбран для того, чтобы численно продемонстрировать возможность учета в рамках единой схемы расчета поправок Блоха [8] и Баркаса [9]. Для полной определенности необходимо проведение общего рассмотрения возможностей эйконального приближения в теории потерь энергии быстрыми заряженными частицами и сравнение с теорией Бете–Блоха. Именно из-за отсутствия такого анализа в работе [5] не была обнаружена основная причина отклонений проведенных в ней расчетов от результатов теории Бете–Блоха.

Широко используемая в теории торможения быстрых заряженных частиц формула Бете–Блоха имеет вид [8] (используются атомные единицы и рассматриваются нерелятивистские столкновения)

$$\kappa = 4\pi\eta^2 N_a L, \quad (1)$$

где $\eta = Z/v$, Z и v — заряд и скорость снаряда, N_a — число электронов в мишени, мишень неподвижна,

$$L = L^{Bethe} + \Delta L^{Bloch}, \quad (2)$$

величина $L^{Bethe} = \ln(2v^2/I)$ рассчитана Бете [10] в низшем порядке теории возмущений, I — «средний» потенциал ионизации мишени, $\Delta L^{Bloch} = -\operatorname{Re}\psi(1+i\eta) + \psi(1)$ — поправка Блоха [8], имеющая непertурбативный характер, $\psi(x)$ — логарифмическая производная Γ -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. Так, при $\eta \ll 1$ формула Бете–Блоха переходит в результат теории возмущений — формулу Бете, а при $\eta \gg 1$ — в результат классической механики — формулу Бора. Вывод формулы Бете–Блоха, по сути, основан [8, 11, 12] на разбиении всей области 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. Логарифмическая зависимость от вводимых таким образом параметров обрезания позволяет сшить результаты вкладов от двух областей в эффективное торможение так, что зависимость от параметров обрезания исчезает. 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 электро-

нов мишени максимально и, вообще говоря, необходим непertурбативный учет. Поэтому в общепринятой области применимости формулы Бете–Блоха ($v \gg v_a$, где v_a — характерная скорость электронов мишени, а значения параметра η могут быть любыми), будем использовать непertурбативный подход, основанный на приближении эйконала, включающего в себя, как известно [13], в задачах потенциального рассеяния оба предельных случая (борновское и квазиклассическое приближения). В кулоновском поле переход амплитуды в квазиклассический вид подробно рассмотрен в [14, задача 13.54].

В настоящей работе показано, что приближение эйконала является наиболее естественно оперирующим терминами переданного импульса путем получения поправки Блоха в теории торможения быстрых заряженных частиц на свободных электронах. Потери энергии быстрыми заряженными частицами при столкновениях с атомами рассмотрены на основе приближения эйконала, позволяющего последовательно в рамках единого непertурбативного подхода рассчитать эффективное торможение во всей области параметров удара. При этом не требуется выделения областей интегрирования по параметру удара для учета поправки Блоха и проведения различного рода сшивок. Показано, что непertурбативный 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. Предложена формула для оценок непertурбативного вклада от области промежуточных параметров удара. Продемонстрировано, при каких упрощающих предположениях формула Бете–Блоха может быть получена в приближении эйконала. Показано, что учет непertурбативных эффектов при больших значениях кулоновского параметра $\eta = Z/v$ приводит к значительным (до 50%) поправкам к формуле Бете–Блоха. Проведен анализ области применимости формулы Бете–Блоха при изменении параметров столкновения (заряда снаряда, относительной скорости столкновения). Делается вывод о том, что расчеты потерь энергии в приближении эйконала (в области параметров столкновения, при которых обычно используют формулу Бете–Блоха) существенно предпочтительнее оценок на основе формулы Бете–Блоха и ее модификаций, поскольку не только учитывают поправку Блоха, но и непertурбативно учитывают область промежуточных параметров удара, а также

допускают непосредственное обобщение на случаи столкновений сложных снарядов и мишеней.

Ранее авторами данной статьи опубликовано [15] краткое изложение части содержания разд. 1–5 настоящей статьи. Необходимость введения части материала из [15] в текст настоящей статьи обусловлена стремлением к полноте и замкнутости изложения. Кроме того, формат краткого сообщения не позволил привести ряд нетривиальных подробностей, методов расчетов и вычислений, без изложения которых использование и воспроизведение наших результатов другими исследователями становится крайне затруднительным при расчетах потерь энергии в столкновениях с атомами. В работе [15] отсутствует формула (и ее вывод) для оценок непертурбативного вклада от области промежуточных параметров удара, нет обобщения на случай сложных атомов и отсутствует анализ погрешностей при применении формулы Бете–Блоха в области параметров столкновения, при которых обычно ее используют.

2. ПОПРАВКА БЛОХА

Поправка Блоха находится [8, 11, 12] путем расчета потерь энергии быстрой заряженной частицы на свободных электронах. Эффективное торможение на свободных электронах равно

$$\kappa = \int \varepsilon(\theta) \sigma(\theta) d\Omega, \quad (3)$$

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 (3), 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.

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. Требуемое при этом обрезание (формирующее

волновой пакет) и вносит разницу между перечисленными выше тремя случаями и приводит к появлению поправки Блоха. Вывод поправки Блоха, приведенный в его оригинальной статье [8], громоздок, поэтому были предложены более простые и современные подходы [11, 12]. В обоих подходах рассматривались потери энергии на свободных электронах с описанием их рассеяния на тормозящейся частице в виде или кулоновских сферических волн [11], или кулоновской рассеянной волны [12] ($\psi_{\mathbf{k}}^{(+)}$ в обозначениях [16, формула (136.8)]). В работе [11] потери энергии рассчитывались через транспортное сечение, а в [12] 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 обоснован лишь тем, что именно так получается поправка Блоха.

При корректном учете особенностей кулоновского рассеяния потери энергии могут быть рассчитаны в рамках единого подхода в интуитивно понятных терминах переданного импульса непосредственно по определению (3):

$$\kappa = \int \frac{1}{2} q^2 \sigma(\mathbf{q}) \frac{d^2 q}{k^2} = \int \frac{1}{2} q^2 |f(\mathbf{q})|^2 \frac{d^2 q}{k^2}, \quad (4)$$

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 величина $q = 2k \sin(\theta/2)$ меняется от нуля до максимального значения q_1 , $f(\mathbf{q})$ — амплитуда упругого рассеяния, имеющая в приближении эйконала вид [16]

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

где \mathbf{b} обычно интерпретируется как вектор параметра удара. Эйкональная фаза в кулоновском поле равна [14; 17, стр. 477]

$$\chi(b) = \frac{1}{v} \int_{-\infty}^{\infty} U(x, \mathbf{b}) dx = 2\eta \ln b, \quad (6)$$

где (x, \mathbf{b}) — координаты электрона.

Мы должны рассматривать рассеяние ограниченной в пространстве волны, поэтому запишем $f(\mathbf{q})$, вводя обрезание по параметрам удара:

$$f(\mathbf{q}) = \frac{ik}{2\pi} \int e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{b}} (1 - e^{-i\chi(b)}) e^{-\beta b^2} d^2 b, \quad (7)$$

где параметр обрезания β будем считать малым и в конце следующих ниже выкладок будем переходить

дуть к пределу $\beta \rightarrow 0$. Такое обрезание соответствует физической постановке задачи и позволяет выполнять выкладки не заботясь о выборе стартовой формулы для расчета потерь энергии и о сходимости необходимых интегралов. 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 результаты одинаковы, но соответствующие выкладки значительно усложняются по сравнению с гауссовым обрезанием. Очевидно, что при малых, но не равных нулю значениях β можно записать

$$\begin{aligned} i\mathbf{qf}(\mathbf{q}) &= -\frac{ik}{2\pi} \int e^{-\beta b^2} (1 - e^{-i\chi(b)}) (\nabla_b e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{b}}) d^2b = \\ &= \frac{ik}{2\pi} \int e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{b}} \{\nabla_b [(1 - e^{-i\chi(b)}) e^{-\beta b^2}]\} d^2b = \\ &= \frac{ik}{2\pi} \int e^{-\beta b^2} e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{b}} (\nabla_b (1 - e^{-i\chi(b)})) d^2b, \end{aligned} \quad (8)$$

где $\nabla_b = \partial/\partial\mathbf{b}$. Подставляя в (8) явный вид фазы $\chi(b)$ из (6), выполняя дифференцирование и подставляя полученное выражение для $\mathbf{qf}(\mathbf{q})$ в (4), получаем эффективное торможение в виде

$$\kappa = 4\pi\eta^2 L_\eta, \quad (9)$$

где

$$L_\eta = \int_0^{q_1} I_\eta I_\eta^* q dq, \quad (10)$$

а интеграл I_η равен

$$I_\eta = \int_0^\infty J_1(qb) b^{-2i\eta} e^{-\beta b^2} db \quad (11)$$

и вычисляется далее по формуле (2.12.9.3) из справочника [18, стр. 186]:

$$I_\eta = \frac{1}{4} q \beta^{-1+i\eta} \Gamma(1-i\eta) F\left(1-i\eta, 2, -\frac{q^2}{4\beta}\right), \quad (12)$$

где $J_1(x)$ — функция Бесселя, $\Gamma(x)$ — гамма-функция, $F(a, b, z)$ — вырожденная гипергеометрическая функция. Поэтому

$$\begin{aligned} L_\eta &= \int_0^{q_1} I_\eta I_\eta^* q dq = \frac{1}{2} |\Gamma(1+i\eta)|^2 \times \\ &\times \int_0^{q_1^2/4\beta} |F(1+i\eta, 2, -x)|^2 x dx. \end{aligned} \quad (13)$$

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

$$L_\eta = \frac{1}{2} |\Gamma(1+i\eta)|^2 \int_0^\infty |F(1+i\eta, 2, -x)|^2 e^{-\lambda x} x dx, \quad (14)$$

где безразмерная величина $\lambda = 4\beta/q_1^2$. Входящий в формулу (14) интеграл легко вычисляется по формуле (f,10) из [16] и равен

$$\begin{aligned} L_\eta &= \frac{1}{2} |\Gamma(1+i\eta)|^2 \frac{1}{(1+\lambda)^2} \times \\ &\times F\left(1+i\eta, 1-i\eta, 2, \frac{1}{(1+\lambda)^2}\right), \end{aligned} \quad (15)$$

где $F(a, b, c, z)$ — гипергеометрическая функция. Используя предельное выражение для гипергеометрической функции $F(1+i\eta, 1-i\eta, 2, z)$ при $z \rightarrow 1$ [17, формула (95,19)], получим

$$L_\eta = \frac{1}{2} \left[-\ln\left(1 - \frac{1}{(1+\lambda)^2}\right) - 2f(\eta) \right], \quad (16)$$

где

$$f(\eta) = \frac{1}{2} [\psi(1+i\eta) + \psi(1-i\eta) - 2\psi(1)]. \quad (17)$$

В результате имеем

$$\begin{aligned} \Delta L &= L_\eta - L_0 = \\ &= -\operatorname{Re} \psi(1+i\eta) + \psi(1) = \Delta L^{Bloch}, \end{aligned} \quad (18)$$

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

Таким образом, обрезание соответствует физической постановке задачи и позволяет выполнять выкладки, не заботясь о выборе стартовой формулы для расчета потерь энергии, о сходимости необходимых интегралов и о порядке интегрирования. Следует отметить, что такое обрезание специфично именно при расчетах потерь на свободных электронах, тогда как при аналогичных расчетах на связанных электронах необходимости в введении параметра обрезания не возникает (см. ниже формулу (28)).

3. ПОТЕРИ ЭНЕРГИИ ПРИ СТОЛКНОВЕНИЯХ С АТОМАМИ В ПРИБЛИЖЕНИИ ЭЙКОНАЛА

Эйкональное приближение для нерелятивистского потенциального рассеяния может быть обобщено [16] на случай столкновения высокоэнергетической

частицы с системой частиц при условии, что скорость падающей частицы много больше характерных скоростей атомной системы, $v \gg v_a$. В приближении эйконала амплитуда неупругого столкновения движущегося с нерелятивистской скоростью иона с нерелятивистским атомом, с переходом атома из состояния $|0\rangle$ с энергией ϵ_0 в $|n\rangle$ с энергией ϵ_n , имеет вид

$$f_{n0}(\mathbf{q}) = \langle n|f(\mathbf{q})|0\rangle, \quad (19)$$

где

$$f(\mathbf{q}) = \frac{ik_0}{2\pi} \int \exp(-i\mathbf{q} \cdot \mathbf{b}) \times \left[1 - \exp\left(-\frac{i}{v} \int U dX\right) \right] d^2b. \quad (20)$$

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 $\{\mathbf{r}_a\}$, т. е. $U = U(X, \mathbf{b}; \{\mathbf{r}_a\})$, изменение импульса иона $\mathbf{q} = \mathbf{k}_n - \mathbf{k}_0$, а \mathbf{k}_0 и \mathbf{k}_n — импульсы иона до и после столкновения.

Сечение неупругого столкновения можно получить с помощью известной формулы [16]

$$\sigma_n = \int \frac{k_n}{k_0} |f_{n0}|^2 d\Omega = \frac{1}{k^2} \int_{q_{min} \leq q \leq q_1} |f_{n0}|^2 d^2q, \quad (21)$$

где $d\Omega$ — телесный угол рассеяния иона, область интегрирования по d^2q такая, что $q_{min} \leq |\mathbf{q}| \leq q_1$, 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 $d\Omega = d^2q/k_0k_n = d^2q/k^2$. Эффективное торможение [16] равно

$$\begin{aligned} \kappa &= \sum_n (\epsilon_n - \epsilon_0) \sigma_n = \\ &= \frac{1}{k^2} \sum_n (\epsilon_n - \epsilon_0) \int_{q_{min} \leq q \leq q_1} d^2q |f_{n0}|^2. \end{aligned} \quad (22)$$

Следуя [16], разобьем область интегрирования ($q_{min} \leq q \leq q_1$) на две части: $q_{min} \leq q \leq q_0$ и $q_0 \leq q \leq q_1$ (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

$$\kappa = \kappa_1 + \kappa_2. \quad (23)$$

Область малых переданных импульсов вносит [16] вклад κ_1 , рассчитываемый по теории возмущений:

$$\begin{aligned} \kappa_1 &= \frac{1}{k^2} \sum_n (\epsilon_n - \epsilon_0) \int_{q_{min} \leq q \leq q_0} d^2q |f_{n0}|^2 = \\ &= 4\pi\eta^2 N_a \ln \frac{q_0 v}{I}, \end{aligned} \quad (24)$$

где I — средний потенциал ионизации [16]. Область больших переданных импульсов вносит вклад κ_2 , равный

$$\kappa_2 = \frac{1}{k^2} \sum_n (\epsilon_n - \epsilon_0) \int_{q_0 \leq q \leq q_1} d^2q |f_{n0}|^2. \quad (25)$$

В этой области теория возмущений неприменима, и для амплитуды f_{n0} будем использовать эйкональное приближение (19), (20). Следуя [16], легко получить

$$\kappa_2 = \frac{1}{2k^2} \int_{q_0 \leq q \leq q_1} d^2q \langle 0 | \sum_{a=1}^{N_a} (\nabla_a f \cdot \nabla_a f^*) | 0 \rangle, \quad (26)$$

где $f \equiv f(\mathbf{q})$ из формулы (20), $\nabla_a = \partial/\partial \mathbf{r}_a$ — 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 с атомом водорода. В этом случае взаимодействие движущегося со скоростью v точечного иона заряда Z с покоившимся в начале системы координат атомом водорода описывается формулой

$$U(X, \mathbf{b}; \mathbf{r}) = \frac{Z}{\sqrt{X^2 + b^2}} - \frac{Z}{\sqrt{(X-x)^2 + (\mathbf{b}-\mathbf{s})^2}},$$

где X, \mathbf{b} — координаты иона, $\mathbf{r} = (x, \mathbf{s})$ — координаты атомного электрона, \mathbf{s} — проекция \mathbf{r} на плоскость параметра удара \mathbf{b} . Эйкональная фаза равна

$$\chi = \frac{1}{v} \int_{-\infty}^{\infty} U(X, \mathbf{b}; \mathbf{r}) dX = -2\eta \ln \frac{|\mathbf{b}-\mathbf{s}|}{|\mathbf{b}|}. \quad (27)$$

В результате, эйкональная амплитуда (20) принимает вид

$$\begin{aligned} f(\mathbf{q}) &= \frac{ik}{2\pi} \int \exp(-i\mathbf{q} \cdot \mathbf{b}) \times \\ &\times \left[1 - \exp\left(-2i\eta \ln \frac{|\mathbf{b}-\mathbf{s}|}{|\mathbf{b}|}\right) \right] d^2b. \end{aligned} \quad (28)$$

Для атома водорода $s \sim 1$, поэтому подынтегральное выражение стремится к нулю при $b \rightarrow \infty$. Таким образом, в отличие от потерь энергии на свободных электронах (когда эйкональная фаза (6) равна

$2\eta \ln b$ и в выражение (7) для эйкональной амплитуды было введено обрезание по параметрам удара), в случае потерь энергии на связанных электронах эйкональная фаза (27) эффективно обрезает при $b > s$ в (28) область интегрирования по параметру удара b и необходимость в введении параметра обрезания отпадает.

Дифференцируя (28) по \mathbf{s} и заменяя переменную интегрирования \mathbf{b} на $\mathbf{b} + \mathbf{s}$, получим

$$\nabla f(\mathbf{q}) = \frac{k}{\pi} \eta \int \exp[-i\mathbf{q} \cdot (\mathbf{b} + \mathbf{s})] \times \\ \times |\mathbf{b} + \mathbf{s}|^{-2i\eta} |\mathbf{b}|^{2i\eta} \frac{\mathbf{b}}{|\mathbf{b}|^2} d^2b. \quad (29)$$

В результате формула (26) принимает вид

$$\kappa_2 = \frac{\eta^2}{2\pi^2} \int_{q_0 \leq q \leq q_1} \langle 0 | \mathbf{I}(\mathbf{q}) \cdot \mathbf{I}^*(\mathbf{q}) | 0 \rangle d^2q, \quad (30)$$

где

$$\mathbf{I}(\mathbf{q}) = \int e^{-i\mathbf{q} \cdot \mathbf{b}} |\mathbf{b} + \mathbf{s}|^{-2i\eta} |\mathbf{b}|^{2i\eta} \frac{\mathbf{b}}{|\mathbf{b}|^2} d^2b. \quad (31)$$

К теории возмущений первого порядка возвращаемся, полагая в (31) $\eta = 0$; тогда

$$\mathbf{I}(\mathbf{q}) = \int e^{-i\mathbf{q} \cdot \mathbf{b}} \frac{\mathbf{b}}{|\mathbf{b}|^2} d^2b = \\ = -2\pi i \frac{\mathbf{q}}{|\mathbf{q}|} \int_0^\infty J_1(qb) db = -2\pi i \frac{\mathbf{q}}{\mathbf{q}^2}. \quad (32)$$

Подставляя это значение $\mathbf{I}(\mathbf{q})$ в (30), получаем $\kappa_2 = \kappa_2^{Pert}$, где величина

$$\kappa_2^{Pert} = 4\pi\eta^2 \ln \frac{q_1}{q_0} \quad (33)$$

в точности совпадает с результатом теории возмущений [16, формула (149,9)]. Этот результат позволяет записать эффективное торможение в приближении эйконала в виде

$$\kappa = \kappa_1 + \kappa_2 = 4\pi\eta^2 L^{Eik}, \quad (34)$$

где

$$L^{Eik} = L^{Beth e} + \\ + \int_{q_0 \leq q \leq q_1} \langle 0 | \mathbf{I}(\mathbf{q}) \cdot \mathbf{I}^*(\mathbf{q}) - (2\pi)^2 q^{-2} | 0 \rangle \frac{d^2q}{(2\pi)^3}. \quad (35)$$

Формула (34) является окончательной для расчетов эффективного торможения в приближении эйконала.

4. ФОРМУЛА БЕТЕ – БЛОХА

Общий анализ формулы (35) затруднен, поэтому рассмотрим ее поведение качественно. Кроме того, такой анализ позволит нам отметить, какие именно пренебрежения необходимо сделать для получения формулы Бете–Блоха в приближении эйконала (34).

При произвольных η интеграл (31) оцениваем следующим образом. Рассмотрим в (31) область интегрирования по d^2b 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

$$\mathbf{I}_1(\mathbf{q}) = \int_{|\mathbf{b}| \leq b_0} e^{-i\mathbf{q} \cdot \mathbf{b}} |\mathbf{b} + \mathbf{s}|^{-2i\eta} |\mathbf{b}|^{2i\eta} \frac{\mathbf{b}}{|\mathbf{b}|^2} d^2b = \\ = \int_{|\mathbf{b}| \leq b_0} e^{-i\mathbf{q} \cdot \mathbf{b}} |\mathbf{s}|^{-2i\eta} |\mathbf{b}|^{2i\eta} \frac{\mathbf{b}}{|\mathbf{b}|^2} d^2b = \\ = -2\pi i |\mathbf{s}|^{-2i\eta} \frac{\mathbf{q}}{|\mathbf{q}|} \int_0^{b_0} J_1(qb) |\mathbf{b}|^{2i\eta} db. \quad (36)$$

Интеграл от функции Бесселя — табличный [18, стр. 37, формула (1.8.1.1)]. В результате получаем

$$\mathbf{I}_1(\mathbf{q}) = -2\pi i |\mathbf{s}|^{-2i\eta} \frac{\mathbf{q}}{|\mathbf{q}|} b_0^{1+2i\eta} P_\eta(b_0q), \quad (37)$$

где

$$P_\eta(b_0q) = \frac{b_0q {}_1F_2(1 + i\eta; 2, 2 + i\eta; -(b_0q/2)^2)}{4(1 + i\eta)}, \quad (38)$$

${}_1F_2(a; b_1, b_2; x)$ — обобщенная гипергеометрическая функция.

Рассмотрим теперь область интегрирования в (31) по d^2b такую, что $|\mathbf{b}| \geq b_1 \gg |\mathbf{s}|$. Результат интегрирования по этой области больших параметров удара b будем обозначать $\mathbf{I}_2(\mathbf{q})$:

$$\mathbf{I}_2(\mathbf{q}) = \int_{|\mathbf{b}| \geq b_1} e^{-i\mathbf{q} \cdot \mathbf{b}} |\mathbf{b} + \mathbf{s}|^{-2i\eta} |\mathbf{b}|^{2i\eta} \frac{\mathbf{b}}{|\mathbf{b}|^2} d^2b = \\ = \int_{|\mathbf{b}| \geq b_1} e^{-i\mathbf{q} \cdot \mathbf{b}} \frac{\mathbf{b}}{|\mathbf{b}|^2} d^2b = \\ = -2\pi i \frac{\mathbf{q}}{|\mathbf{q}|} \int_{b_1}^\infty J_1(qb) db = -2\pi i J_0(qb_1) \frac{\mathbf{q}}{\mathbf{q}^2}. \quad (39)$$

Нетрудно заметить, что вычисления $\mathbf{I}_2(\mathbf{q})$ формально совпадают с выкладками в первом порядке теории возмущений, когда следует считать в формуле (39) $\eta = 0$. Таким образом, учет вклада от области $b \sim s$ в первом порядке теории возмущений

соответствует формальному продлению области интегрирования в (39) до нижнего предела, равного b_0 .

Итак, будем считать, что $b_1 = b_0 \sim 1$ и оценим $\mathbf{I}(\mathbf{q})$ в формуле (31):

$$\mathbf{I}(\mathbf{q}) = \mathbf{I}_1(\mathbf{q}) + \mathbf{I}_2(\mathbf{q}) = -2\pi i |\mathbf{s}|^{-2i\eta} \times \\ \times \frac{\mathbf{q}}{|\mathbf{q}|} b_0^{1+2i\eta} P_\eta(b_0 q) - 2\pi i J_0(q b_0) \frac{\mathbf{q}}{\mathbf{q}^2}. \quad (40)$$

При этом точное значение параметра сшивки b_0 для нас несущественно, поскольку (см. ниже) зависимость от b_0 слагаемых в выражении для κ_2 оказывается логарифмической и исчезает при суммировании. Подставим выражение (40) в (30):

$$\kappa_2 = \frac{Z^2}{2v^2\pi^2} (J_1 + J_2 + J_3 + J_3^*), \quad (41)$$

где

$$J_1 = \int_{q_0}^{q_1} \mathbf{I}_1 \cdot \mathbf{I}_1^* d^2 q = (2\pi)^3 \int_{b_0 q_0}^{b_0 q_1} P_\eta(x) P_\eta^*(x) x dx, \quad (42)$$

$$J_2 = \int_{q_0}^{q_1} \mathbf{I}_2 \cdot \mathbf{I}_2^* d^2 q = (2\pi)^3 \int_{b_0 q_0}^{b_0 q_1} \frac{J_0^2(x)}{x} dx, \quad (43)$$

$$J_3 + J_3^* = \int_{q_0}^{q_1} \mathbf{I}_1 \cdot \mathbf{I}_2^* d^2 \mathbf{q} + \int_{q_0}^{q_1} \mathbf{I}_1^* \cdot \mathbf{I}_2 d^2 q = \\ = \langle 0 | s^{-2i\eta} | 0 \rangle b_0^{2i\eta} (2\pi)^3 \int_{b_0 q_0}^{b_0 q_1} P_\eta(x) J_0(x) dx + \\ + \langle 0 | s^{2i\eta} | 0 \rangle b_0^{-2i\eta} (2\pi)^3 \int_{b_0 q_0}^{b_0 q_1} P_\eta^*(x) J_0(x) dx. \quad (44)$$

Подробности вычислений интегралов представлены в Приложении А, здесь же мы сразу приведем их значения при $b_0 q_0 \ll 1$ и $b_0 q_1 \gg 1$:

$$J_1 = (2\pi)^3 [-\operatorname{Re} \psi(1 + i\eta) + \psi(1)] + \\ + (2\pi)^3 \ln(b_0 q_1 \mu / 2), \quad (45)$$

где $\mu = e^{-\psi(1)}$,

$$J_2 = -(2\pi)^3 \ln(b_0 q_0 \mu / 2), \quad (46)$$

$$J_3 + J_3^* = 0. \quad (47)$$

Подставляя значения интегралов (45), (46) и (47) в формулу (41), получаем

$$\kappa_2 = 4\pi\eta^2 \left(\ln \frac{q_1}{q_0} - \operatorname{Re} \psi(1 + i\eta) + \psi(1) \right). \quad (48)$$

Полное эффективное торможение, согласно выражениям (23), (24) и (48), равно

$$\kappa = 4\pi\eta^2 \left(\ln \frac{2v^2}{I} - \operatorname{Re} \psi(1 + i\eta) + \psi(1) \right). \quad (49)$$

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, а область параметров удара ($b \sim s$), сравнимых с характерными размерами электронных оболочек мишени, мы, следуя Блоху [8], 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 (31) по степеням η будут вносить в правую часть выражения (48) 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 Z_a ядра атома. Кроме того, из физических соображений ясно, что именно в области параметров удара $b \sim s$ взаимодействие снаряда и электронов мишени максимально.

5. РЕЗУЛЬТАТЫ РАСЧЕТОВ, ОБОБЩЕНИЕ НА СЛОЖНЫЕ АТОМЫ

Таким образом, могут быть сделаны следующие качественные выводы. Расчеты по формулам (34) и (35) передают характерные особенности поведения формулы Бете–Блоха. 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 (34) и (35), одновременно зависит от параметра $\eta = Z/v$ и от вида функции ϕ_0 , описывающей состояние $|0\rangle$ атома до рассеяния. В формуле Бете–Блоха зависимость эффективного торможения от ϕ_0 учитывается лишь в дипольном приближении для области малых

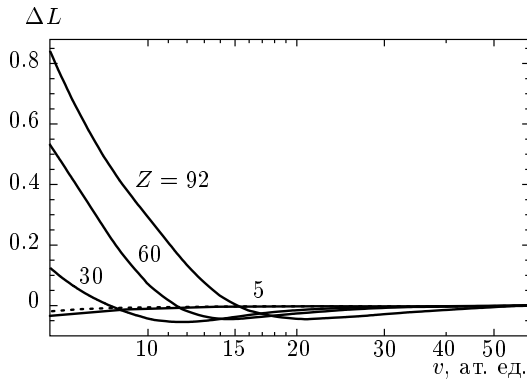


Рис. 1. Зависимости ΔL (сплошные линии) от относительной скорости столкновения v для четырех значений заряда Z снаряда при столкновении с атомом водорода, а также оболочечная поправка ΔL^{shell} из обзора [19] (штриховая линия)

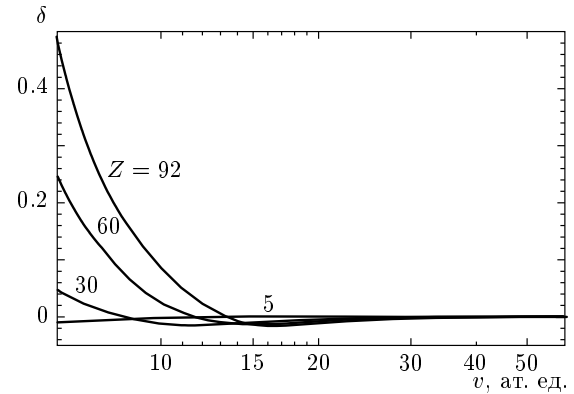


Рис. 2. Зависимости относительной непертурбативной поправки δ от относительной скорости столкновения v для четырех значений заряда Z снаряда при столкновении с атомом водорода

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 [19] введением в формулу Бете–Блоха так называемой оболочечной поправки (shell correction) ΔL^{shell} , которая, по своему смыслу, должна быть добавлена к величине κ_1 , описываемой формулой (24). Ниже показано, что вклад от ΔL^{shell} значительно меньше вклада от непертурбативного учета области $b \sim s$.

Для иллюстрации указанного выше поведения эффективного торможения в приближении эйконала мы провели расчеты по формулам (34) и (35) потерь энергии движущейся со скоростью v точечной частицы заряда Z при столкновении с атомом водорода (находящимся до столкновения в основном состоянии) при таких энергиях столкновения, при которых обычно считается применимой формула Бете–Блоха. Результаты расчетов удобно представлять в сравнении с формулой Бете–Блоха, поэтому для иллюстрации отклонений от формулы Бете–Блоха введем поправку

$$\Delta L = L^{Eik} - (L^{Bethe} + \Delta L^{Bloch}), \quad (50)$$

которая, согласно (35), равна

$$\Delta L = \frac{1}{(2\pi)^3} \int_{q_0 \leq q \leq q_1} \langle 0 | \mathbf{I}(\mathbf{q}) \cdot \mathbf{I}^*(\mathbf{q}) - (2\pi)^2 q^{-2} | 0 \rangle \times d^2 q - \Delta L^{Bloch}. \quad (51)$$

Поправку ΔL , характеризующую непертурбативный вклад от области параметров удара $b \sim$

$\sim s$, естественно называть непертурбативной оболочечной поправкой. На рис. 1 приведены значения ΔL в зависимости от скорости снаряда. Энергия налетающей частицы менялась в пределах от 1 до 100 МэВ/нуклон, что соответствует диапазону изменения скорости $6.35 < v < 58.86$ в атомных единицах. На рис. 2 приведены значения относительной непертурбативной поправки $\delta = \Delta L / (L^{Bethe} + \Delta L^{Bloch})$ в зависимости от скорости столкновения. 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 может достигать порядка 50%. Чтобы не загромождать остальные рисунки, мы приводим значения оболочечной поправки ΔL^{shell} (малой по сравнению с ΔL) лишь на рис. 1 (штриховая линия).

Введенная согласно формуле (50) непертурбативная оболочечная поправка ΔL , вычисляемая по формуле (51), позволяет переписать выражение для эффективного торможения в приближении эйконала в стандартном виде:

$$\begin{aligned} \kappa &= 4\pi\eta^2 L^{Eik} = \\ &= 4\pi\eta^2 \left(\ln \frac{2v^2}{I} + \Delta L^{Bloch} + \Delta L \right). \quad (52) \end{aligned}$$

Расчеты непертурбативной оболочечной поправки ΔL по формуле (51) возможны, в основном, лишь в численном виде, однако такие расчеты (при выполнении условий применимости приближения эйконала) непосредственно обобщаются на случаи столкновений сложных снарядов и мишеней, не требуют выделения областей интегрирования для учета по-

правок Блоха и проведения различного рода сшивок вкладов от различных областей параметров удара.

Рассмотрим подробнее, как проводится такое обобщение. Возьмем в качестве мишени многоэлектронный атом с числом электронов N_a . В этом случае энергия взаимодействия движущегося со скоростью v точечного иона заряда Z с покоившимся в начале системы координат многоэлектронным атомом с зарядом ядра Z_a (для нейтрального атома $Z_a = N_a$) имеет вид

$$U(X, \mathbf{b}; \{\mathbf{r}_a\}) = \frac{ZZ_a}{\sqrt{X^2 + b^2}} - \sum_{j=1}^{N_a} \frac{Z}{\sqrt{(X - x_j)^2 + (\mathbf{b} - \mathbf{s}_j)^2}},$$

где X, \mathbf{b} — координаты иона, $\{\mathbf{r}_a\} \equiv \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_j, \dots$ — совокупность координат атомных электронов ($j = 1, 2, \dots, N_a$), $\mathbf{r}_j = (x_j, \mathbf{s}_j)$ — координаты j -го атомного электрона, \mathbf{s}_j — проекция \mathbf{r}_j на плоскость параметра удара \mathbf{b} . В этом случае эйкональная фаза запишется в виде

$$\chi = \frac{1}{v} \int_{-\infty}^{\infty} U(X, \mathbf{b}; \{\mathbf{r}_a\}) dX = 2\eta \sum_{j=1}^{N_a} \ln \frac{|\mathbf{b} - \mathbf{s}_j|}{b}. \quad (53)$$

Тогда эйкональная амплитуда, соответствующая переходу атома из состояния $|0\rangle$ в $|n\rangle$, примет вид (19) с

$$f(\mathbf{q}) = \frac{ik}{2\pi} \int \exp(-i\mathbf{q} \cdot \mathbf{b}) \times \left[1 - \exp\left(-2i\eta \sum_{j=1}^{N_a} \ln \frac{|\mathbf{b} - \mathbf{s}_j|}{b}\right) \right] d^2b. \quad (54)$$

Для расчета эффективного торможения в этом случае воспользуемся формулой (23), в которой слагаемые κ_1 и κ_2 рассчитываются соответственно по формулам (24) и (26). Тогда, учитывая явный вид амплитуды (54), получим

$$\kappa_1 = 4\pi\eta^2 N_a \ln \frac{q_0 v}{I}, \quad (55)$$

где I — средний потенциал ионизации сложного атома, а

$$\kappa_2 = \frac{\eta^2}{2\pi^2} N_a \int_{q_0 \leq q \leq q_1} \langle 0 | \mathbf{I}_a(\mathbf{q}) \cdot \mathbf{I}_a^*(\mathbf{q}) | 0 \rangle d^2q = 4\pi\eta^2 N_a \left(\ln \frac{q_1}{q_0} + \Delta L^{Bloch} + \Delta L \right), \quad (56)$$

где

$$\Delta L = \frac{1}{(2\pi)^3} \int_{q_0 \leq q \leq q_1} \langle 0 | \mathbf{I}_a(\mathbf{q}) \cdot \mathbf{I}_a^*(\mathbf{q}) - \frac{(2\pi)^2}{q^2} | 0 \rangle d^2q - \Delta L^{Bloch}, \quad (57)$$

$$\mathbf{I}_a(\mathbf{q}) = \int \exp(-i\mathbf{q} \cdot \mathbf{b}) \times \exp\left(-2i\eta \sum_{j=1}^{N_a} \ln \frac{|\mathbf{b} + \mathbf{s}_a - \mathbf{s}_j|}{|\mathbf{b} + \mathbf{s}_a|}\right) \frac{\mathbf{b}}{b^2} d^2b, \quad (58)$$

\mathbf{s}_a — проекция радиус-вектора какого-либо атомного электрона с номером a на плоскость параметра удара \mathbf{b} . В принципе, выбор номера a произволен, поскольку в формуле (57) проводится усреднение по волновой функции состояния $|0\rangle$, после чего зависимость от номера a , очевидно, исчезает. В результате выражение для эффективного торможения иона на многоэлектронном атоме примет вид

$$\kappa = \kappa_1 + \kappa_2 = 4\pi\eta^2 N_a L^{Eik} = 4\pi\eta^2 N_a \left(\ln \frac{2v^2}{I} + \Delta L^{Bloch} + \Delta L \right), \quad (59)$$

где ΔL выражается формулой (57) и имеет смысл непертурбативной оболочечной поправки для сложного атома. Формулы (59), (57) и (58) являются обобщением на многоэлектронный случай соответствующих формул (52), (51) и (31), полученных ранее для атома водорода.

Отметим, что поправка Блоха заметно отличается от нуля лишь при нерелятивистских скоростях. Поэтому нерелятивистскую поправку Блоха обычно вводят (см. обзоры [20, 21]) в релятивистскую формулу Бете–Блоха, справедливую как для нерелятивистских скоростей, так и для релятивистских. Точно таким же образом в релятивистской формуле Бете–Блоха можно учитывать и непертурбативную оболочечную поправку ΔL , отличающуюся от нуля (см. рис. 1, 2 и оценки в разд. 6) лишь при низких (нерелятивистских) скоростях.

6. ОЦЕНКИ И ВЫВОДЫ

При проведении в разд. 5 численных расчетов эффективного торможения 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. Эта же область обычно считается [8, 19] совпадающей с областью применимости формулы Бете–Блоха, хотя, как показано в разд. 4, последняя получается лишь в результате определенных пренебрежений в эйкональных расчетах. Ранее погрешности этих пренебрежений не оценивались, что и требует более аккуратного рассмотрения границ применимости формулы Бете–Блоха. Эйкональные расчеты проводились строго в рамках границ применимости, и именно по этой причине такие расчеты можно назвать точными (точнее, вносящими стандартную [16] и пренебрежимо малую, в границах области применимости, погрешность), хотя технически эйкональные расчеты представляются довольно сложными. Обнаруженная (и не только нами, см., например, работу [5]) довольно значительная разница между эйкональными расчетами и результатами использования теории Бете–Блоха нуждается в дополнительных комментариях. Для иллюстрации поведения ΔL представим (используя (31)) выражение (51) в виде

$$\begin{aligned} \Delta L = & \int_{q_0 \leq q \leq q_1} d^2q \int d^2b \int d^2b' \times \\ & \times \frac{\exp(-i\mathbf{q} \cdot \mathbf{b}) \exp(i\mathbf{q} \cdot \mathbf{b}')}{(2\pi)^3} \times \\ & \times \left(\langle 0 | \left(\frac{|\mathbf{b} + \mathbf{s}|}{b} \right)^{-2i\eta} \left(\frac{|\mathbf{b}' + \mathbf{s}|}{b'} \right)^{2i\eta} | 0 \rangle - 1 \right) \times \\ & \times \frac{\mathbf{b} \cdot \mathbf{b}'}{b^2 b'^2} - \Delta L^{Bloch}. \end{aligned} \quad (60)$$

Очевидно, что к теории возмущений мы переходим при $\eta \rightarrow 0$. Анализ поведения ΔL в виде (60) возможен лишь численно. Поэтому воспользуемся следующим. Как уже указывалось в обсуждении после формулы (28) эйкональная фаза (27) эффективно обрезает при $b > s$ в (28) область интегрирования по параметру удара b . Поэтому для проведения оценок представим ΔL в следующем виде:

$$\begin{aligned} \Delta L = & \int_{q_0 \leq q \leq q_1} d^2q \int d^2b \int d^2b' \times \\ & \times \frac{\exp(-i\mathbf{q} \cdot \mathbf{b}) \exp(i\mathbf{q} \cdot \mathbf{b}')}{(2\pi)^3} \times \\ & \times (b^{2i\eta} b'^{-2i\eta} - 1) \exp(-\beta b^2) \exp(-\beta b'^2) \times \\ & \times \frac{\mathbf{b} \cdot \mathbf{b}'}{b^2 b'^2} - \Delta L^{Bloch}, \end{aligned} \quad (61)$$

где значения параметра β известны лишь по порядку величины: $\beta \sim 1/b_0^2$, $b_0 \geq s$, а $s \sim 1$ — эффектив-

ный размер атома. Интегралы, входящие в (61), легко вычислить аналитически, воспользовавшись формулами (11)–(15); при этом необходимо учитывать, что при расчетах потерь на свободном электроне интегрирование по переданному импульсу q проводилось в пределах $0 \leq q \leq q_1$ (см. формулу (13)), тогда как в (61) переданный импульс меняется в пределах $q_0 \leq q \leq q_1$. При выполнении условий $b_0 q_0 \ll 1$ и $b_0 q_1 \gg 1$ можно изменить пределы интегрирования в (61) на $0 \leq q \leq q_1$, поскольку при этом значение интеграла изменится на малую величину порядка $q_0^4 b_0^4 \ll 1$. Таким образом, в формуле (61) интегрирование можно проводить в пределах $0 \leq q \leq q_1$ и все выкладки становятся полностью аналогичными приведенным в разд. 2. В итоге выпишем полученный результат:

$$\begin{aligned} \Delta L = & \frac{1}{2} |\Gamma(1 + i\eta)|^2 \frac{1}{(1 + \lambda)^2} \times \\ & \times F \left(1 + i\eta, 1 - i\eta, 2, \frac{1}{(1 + \lambda)^2} \right) - \\ & - \frac{1}{2} \frac{1}{(1 + \lambda)^2} F \left(1, 1, 2, \frac{1}{(1 + \lambda)^2} \right) - \Delta L^{Bloch}, \end{aligned} \quad (62)$$

где, как и в формуле (14) из разд. 2, величина $\lambda = \beta/v^2$ безразмерна, причем из общих соображений можно указать лишь порядок величины β . Однако точное значение β может быть получено из сравнения с численными расчетами по формуле (51), в результате $\beta = 0.141$, что соответствует значениям $b_0 = 1/\sqrt{\beta} = 2.66$ и $\lambda = 0,141/v^2 \ll 1$. В этом случае формула (62) представляет результаты точных численных расчетов по формуле (51) с относительной погрешностью не более 3%. Результаты данного раздела носят иллюстративный и оценочный характер, поэтому при выполнении указанных выше сравнений мы (формально) изменяли относительную скорость столкновения и заряд налетающего иона в широких пределах: $3 \leq v \leq 100$ и $1 \leq Z \leq 100$. В этих же пределах формула (62) с относительной точностью менее 0.5% допускает простую аппроксимацию (см., Приложение В)

$$\Delta L = \gamma + K_0(2x) + \ln x, \quad (63)$$

где $\gamma = 0.5772$ — постоянная Эйлера, $x = \sqrt{2\eta^2 \lambda} = \sqrt{2\beta} \eta / v$, $\beta = 0.141$, так что $x = 0.531 \eta / v$.

Формула (63) позволяет легко оценить значения $L^{Eik} = \Delta L + L^{Bethe} + \Delta L^{Bloch}$ и относительную погрешность применения формулы Бете–Блоха, $\delta = \Delta L / (L^{Bethe} + \Delta L^{Bloch})$. Таким образом, можно сделать следующие выводы. Область параметров Z и v , при которых применима формула Бете–Блоха,

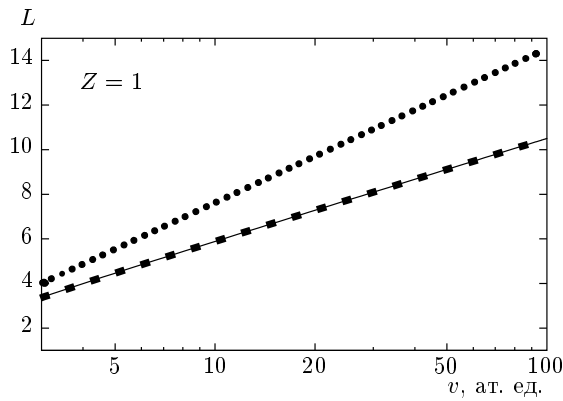


Рис. 3. Зависимости L^{Eik} (сплошная линия), $L^{Bethe-Bloch}$ (квадраты) и L^{Bohr} (кружки) от относительной скорости столкновения v при значениях заряда снаряда $Z = 1$. В данном случае кулоновский параметр $\eta \ll 1$ и поэтому формула Бора не применима, но выполнено условие $x \sim \sqrt{\beta}/v^2 \ll 1$, поэтому формула Бете-Блоха применима и $L^{Bethe-Bloch}$ совпадает с L^{Eik}

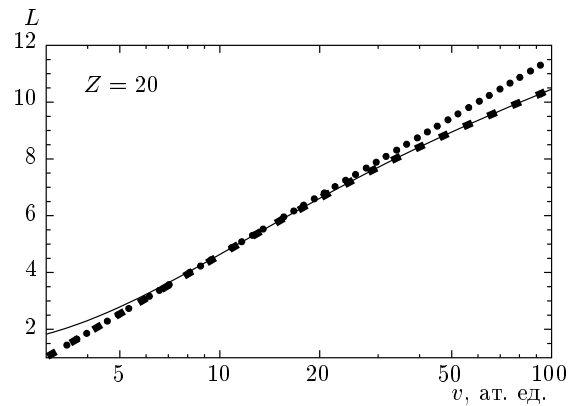


Рис. 4. То же, что на рис. 3, при $Z = 20$. В области $v \leq 20$ кулоновский параметр $\eta \geq 1$, поэтому L^{Bohr} и $L^{Bethe-Bloch}$ близки друг к другу, но при малых $v \leq 6$ заметно отклоняются от L^{Eik} , поскольку нарушается условие $x = 0.531Z/v^2 \ll 1$. При $v \geq 20$ параметр $\eta \leq 1$ и не применима формула Бора, но применима формула Бете-Блоха и $L^{Bethe-Bloch}$ совпадает с L^{Eik}

определяется неравенством $\Delta L \ll L^{Eik}$; это неравенство будет выполнено при $x \ll 1$, поскольку в этом случае функция Бесселя равна $K_0(2x) = -[\gamma + \ln(x)]$ с точностью до величин, меньших или порядка $x^2/4$. Тогда, согласно формуле (63), с той же точностью ΔL обращается в нуль. Вспоминая, что $x = 0.531\eta/v$, получаем, что формула Бете-Блоха применима при выполнении условия $\eta/2v \ll 1$. Поскольку всегда $v \gg 1$, наибольшие неточности при применении формулы Бете-Блоха возникают при больших $\eta \gg 1$. В частности, при $v \leq 3.5$ и $Z = 92$ величина $L^{Bethe-Bloch} = L^{Bethe} + \Delta L^{Bloch}$ становится отрицательной (см. рис. 5). Необходимо отметить, что для применимости формулы Бора должны быть одновременно выполнены два условия: $\eta \gg 1$ и $\eta/2v \ll 1$.

Иллюстрацией приведенных выше выводов служат рис. 3–5, на которых величина L^{Eik} представлена совместно с $L^{Bethe-Bloch}$ и $L^{Bohr} = \ln(2v^3/ZI\mu)$, где $\mu = e^\gamma = 1.781$. Зависимости на рис. 3–5 построены в широких пределах $3 \leq v \leq 100$ и $Z = 3, 20$ и 92 и позволяют наглядно оценить отклонения $L^{Bethe-Bloch}$ и L^{Bohr} от L^{Eik} при различных Z и v . Поскольку на каждом из рисунков есть области, в пределах которых какие-либо из величин L^{Eik} , $L^{Bethe-Bloch}$ и L^{Bohr} совпадают и становятся трудно различимыми, значения $L^{Bethe-Bloch}$ и L^{Bohr} представлены легко различающимися символами, а значения L^{Eik} — сплошной линией.

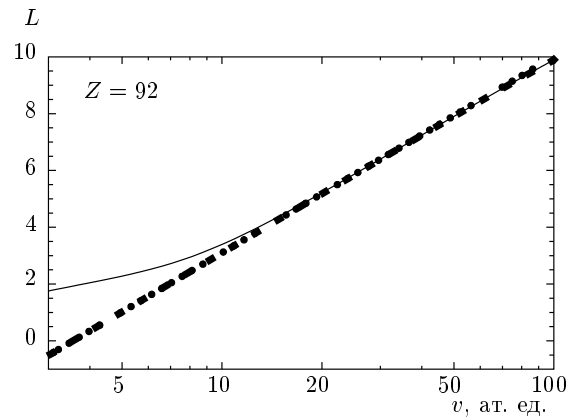


Рис. 5. То же, что на рис. 3, при $Z = 92$. В данном случае $\eta \geq 1$ для всех значений v , поэтому $L^{Bethe-Bloch}$ и L^{Bohr} близки друг к другу и при $v \geq 10$ близки к L^{Eik} . При $v \leq 10$ нарушаются условия применимости формулы Бете-Блоха и видны заметные отклонения от L^{Eik}

ПРИЛОЖЕНИЕ А

Детали вычислений интегралов (42)–(44)

Во всех приведенных в Приложении А случаях мы считали выполненными условия $b_0q_0 \ll 1$, $b_0q_1 \gg 1$ и пренебрегали величинами, меньшими или порядка $(b_0q_0)^2$ и $1/b_0q_1$; везде при таком пренебрежении будем писать: «с приведенной выше точностью».

1. Рассмотрим интеграл

$$J_1 = (2\pi)^3 \int_{q_0 b_0}^{q_1 b_0} P_\eta(x) P_\eta^*(x) x dx.$$

Данное выражение при $b_0 q_1 \gg 1$ логарифмически зависит от верхнего предела, а на нижнем пределе при $b_0 q_0 \ll 1$ ведет себя как $(b_0 q_0)^4$. Другими словами, интеграл J_1 мало меняется, и его изменения не зависят от η при изменениях нижнего предела вблизи нуля, поэтому его удобно представить в виде

$$J_1 = (2\pi)^3 \left[\int_{q_0 b_0}^{q_1 b_0} (P_\eta(x) P_\eta^*(x) - P_0(x) P_0^*(x)) x dx + \int_{q_0 b_0}^{q_1 b_0} P_0(x) P_0^*(x) x dx \right] = J_{1,1} + J_{1,2}, \quad (A.1)$$

где $P_0(x)$ — значения $P_\eta(x)$ при $\eta = 0$. Далее, с приведенной выше точностью, входящие в (A.1) интегралы равны

$$J_{1,1} = (2\pi)^3 \times \int_0^\infty [P_\eta(x) P_\eta^*(x) - P_0(x) P_0^*(x)] x dx, \quad (A.2)$$

$$J_{1,2} = (2\pi)^3 \int_0^{q_1 b_0} P_0(x) P_0^*(x) x dx. \quad (A.3)$$

Рассмотрим интеграл $J_{1,1}$. Это интеграл от разности двух функций. Если интегрировать каждый член разности отдельно в пределах от нуля до бесконечности, то соответствующие интегралы будут расходиться, тогда как $J_{1,1}$ — интеграл от разности — сходится. Тем не менее для аналитического расчета интеграл $J_{1,1}$ можно представить в виде разности интегралов, если выделить расходящуюся часть каждого. Для этого запишем первый интеграл следующим образом:

$$\int_0^\infty |P_\eta(x)|^2 x dx = \frac{1}{2} \frac{1}{1 + (Z/v)^2} \lim_{n \rightarrow 1^-} \int_0^\infty y^n \times \left| {}_1F_2 \left(1 + \frac{iZ}{v}; 2, 2 + \frac{iZ}{v}, -y \right) \right|^2 dy. \quad (A.4)$$

Данная запись означает, что теперь этот интеграл при $n < 1$ сходится. Общий интеграл такого типа можно найти в справочнике [22, стр. 281, формула 1]. Применительно к нашему интегралу получим

$$\int_0^\infty y^n \left| {}_1F_2 \left(1 + \frac{iZ}{v}; 2, 2 + \frac{iZ}{v}, -y \right) \right|^2 dy = \left[1 + \left(\frac{Z}{v} \right)^2 \right] G_{4,4}^{2,2} (1 | \Delta), \quad (A.5)$$

где $G_{q,n}^{p,m}(\Delta)$ — G -функция Мейера,

$$\Delta = \left| \begin{matrix} -n, iZ/v, 1-n, 1-n+iZ/v \\ 0, -n-iZ/v, -1, -1+iZ/v \end{matrix} \right|. \quad (A.6)$$

Далее, чтобы выделить расходящуюся часть, нужно выразить G -функцию Мейера через гипергеометрические функции [23, стр. 327, формулы 8.4.(1) или 8.4.(2)], используя предельный переход

$$G_{4,4}^{2,2} (1 | \Delta) = \lim_{z \rightarrow 1} G_{4,4}^{2,2} (z | \Delta).$$

В итоге, после выделения расходящей части выражения (A.4), получим

$$\int_0^\infty |P_\eta(x)|^2 x dx = \lim_{n \rightarrow 1^-} \left\{ \frac{1}{2(1-n)} - \text{Re} \left[\psi \left(1 + \frac{iZ}{v} \right) \right] \right\}. \quad (A.7)$$

Соответственно

$$\int_0^\infty |P_0(x)|^2 x dx = \lim_{n \rightarrow 1^-} \left\{ \frac{1}{2(1-n)} - \text{Re}[\psi(1)] \right\}. \quad (A.8)$$

Вычитая (A.8) из (A.7) (согласно (A.2)), находим

$$J_{1,1} = (2\pi^3) \{ \psi(1) - \text{Re}[\psi(1 + iZ/v)] \}. \quad (A.9)$$

Рассмотрим $J_{1,2}$ из (A.3). Подставляя в явном виде значения $P_0(x)$, перепишем его следующим образом:

$$J_{1,2} = (2\pi)^3 \int_0^{b_0 q_1} \left(\frac{J_0(x) - 1}{x} \right)^2 x dx = (2\pi)^3 \times \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \left\{ \int_\epsilon^{b_0 q_1} \left[\frac{1}{x} - \frac{2J_0(x)}{x} + \frac{J_0^2(x)}{x} \right] dx \right\}. \quad (A.10)$$

Нам нужно рассчитать этот интеграл при $b_0q_1 \gg 1$. Это можно сделать, увидев, что интеграл (A.10) можно, с приведенной выше точностью, записать в виде

$$J_{1,2} = (2\pi)^3 \times \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \left\{ \ln \left(\frac{b_0q_1}{\epsilon} \right) + \int_{\epsilon}^{\infty} \left(-\frac{2J_0(x)}{x} + \frac{J_0^2(x)}{x} \right) dx \right\} = (2\pi)^3 \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \left\{ \ln \left(\frac{b_0q_1}{\epsilon} \right) + N_1 + N_2 \right\}, \quad (A.11)$$

где

$$N_1 = \int_{\epsilon}^{\infty} -\frac{2J_0(x)}{x} dx,$$

$$N_2 = \int_{\epsilon}^{\infty} \frac{J_0^2(x)}{x} dx.$$

Оба последних интеграла являются табличными [18] и при малых $\epsilon > 0$ равны

$$N_1 = -2 \left\{ \ln \left(\frac{2}{\epsilon} \right) + \psi(1) + \frac{\epsilon^2}{8} \times {}_2F_3 \left(1, 1; 2, 2, 2; -\frac{\epsilon^2}{4} \right) \right\} = -2 \left[\ln \left(\frac{2}{\epsilon} \right) + \psi(1) \right], \quad (A.12)$$

$$N_2 = \ln \left(\frac{2}{\epsilon} \right) + \psi(1) + \frac{\epsilon^2}{4} \times {}_3F_4(1, 1, 3/2; 2, 2, 2, 2; -\epsilon^2) = \ln \left(\frac{2}{\epsilon} \right) + \psi(1). \quad (A.14)$$

Сложив все члены выражения (A.10), получим

$$J_{1,2} = (2\pi)^3 [\ln(b_0q_1/2) - \psi(1)].$$

В результате

$$J_1 = J_{1,1} + J_{1,2} = (2\pi)^3 [-\operatorname{Re} \psi(1 + i\eta) + \psi(1)] + (2\pi)^3 \ln(b_0q_1\mu/2).$$

2. Расчеты интеграла J_2 при $b_0q_1 \gg 1$ совпадают с расчетами интеграла N_2 (при $\epsilon = b_0q_0 \ll 1$). В результате имеем

$$J_2 = (2\pi)^3 \int_{b_0q_0}^{b_0q_1} \frac{J_0^2(x)}{x} dx = (2\pi)^3 \left[-\ln \left(\frac{b_0q_0}{2} \right) + \psi(1) \right]. \quad (A.15)$$

3. Далее рассмотрим $J_3 + J_3^*$. С приведенной выше точностью при $b_0q_0 \ll 1$ и $b_0q_1 \gg 1$ получаем

$$J_3 + J_3^* = \langle 0|s^{-2i\eta}|0\rangle b_0^{2i\eta} (2\pi)^3 \int_0^{\infty} P_{\eta}(x) J_0(x) dx + \langle 0|s^{2i\eta}|0\rangle b_0^{-2i\eta} (2\pi)^3 \int_0^{\infty} P_{\eta}^*(x) J_0(x) dx. \quad (A.16)$$

Покажем, что интеграл

$$N_3 = \int_0^{\infty} P_{\eta}(x) J_0(x) dx = 0. \quad (A.17)$$

Для этого приведем его к табличному виду, подставляя в явном виде

$$P_{\eta}(x) = \frac{x_1 F_2(1 + i\eta; 2, 2 + i\eta; -(x/2)^2)}{4(1 + i\eta)},$$

сделаем замену переменной $y = x^2/4$, а также представим

$$J_0(2y^{1/2}) = {}_1F_2(1; 1, 1; -y).$$

Тогда

$$N_3 = \frac{1}{2(1 + i\eta)} \int_0^{\infty} {}_1F_2(1 + i\eta; 2, 2 + i\eta; -y) \times {}_1F_2(1; 1, 1; -y) dy. \quad (A.18)$$

Этот интеграл можно взять из справочника [22, стр. 281, формула 1] при $\alpha = 1, m = 1, n = 2, \sigma = 1, p = 1, q = 2, \omega = 1, l = 1, k = 1, c_m = 1 + i\eta, d_n = (2, 2 + i\eta), a_p = 1, b_q = (1, 1)$. При подстановке всех коэффициентов в формулу из справочника выражение сильно упрощается. В итоге $N_3 = 0$.

ПРИЛОЖЕНИЕ В

Подробности оценок ΔL по формуле (62)

Обозначим первое слагаемое в (62) через L_{η} и представим его в виде [24, стр. 85, формула 2]

$$L_{\eta} = \frac{1}{2} \frac{1}{(1 + \lambda)^2} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(a)_n (b)_n}{(n!)^2} \times \left[k_n - \ln \left(1 - \frac{1}{(1 + \lambda)^2} \right) \right] \times \left(1 - \frac{1}{(1 + \lambda)^2} \right)^n, \quad (B.1)$$

где $(a)_n$ и $(b)_n$ — символы Похгаммера [25]:

$$(a)_n = \frac{\Gamma(a+n)}{\Gamma(a)}, \quad (b)_n = \frac{\Gamma(b+n)}{\Gamma(b)},$$

$$a = 1 + i\eta, \quad b = 1 - i\eta,$$

$$k_n = 2\psi(1+n) - \psi(a+n) - \psi(b+n),$$

$\psi(x)$ — логарифмическая производная Γ -функции.

Тогда

$$\Delta L = L_\eta - L_{\eta=0} - \Delta L^{Bloch}, \quad (B.2)$$

где (при $\lambda \ll 1$)

$$\Delta L = \frac{1}{2} \sum_{n=1}^{\infty} \left\{ \frac{(a)_n (b)_n}{(n!)^2} [k_n - \ln(2\lambda)] + \ln(2\lambda) \right\} \times (2\lambda)^n. \quad (B.3)$$

Легко убедиться, что все члены ряда (B.3) положительны, причем общий член этого ряда при $n \rightarrow \infty$ убывает не медленнее, чем член ряда $\sum_n (2\lambda)^n$; при $\lambda \ll 1$ ряд является быстросходящимся, причем основной вклад в его значение вносят слагаемые с малыми $n \leq n_0$, где n_0 порядка нескольких единиц. При $\eta \ll 1$ сумма ряда (B.3) ведет себя как $2\eta^2\lambda$ и, очевидно, величина ΔL мала по сравнению с $L^{Bethe} + \Delta L^{Bloch}$. Тот же вывод, очевидно, справедлив и для $\eta \sim 1$, поскольку и в этом случае $2\eta^2\lambda \ll 1$. Для оценки суммы ряда при $\eta \gg 1$ (точнее $\eta \gg n_0$) заменим $(a)_n = a^n$, $(b)_n = b^n$; тогда $(a)_n (b)_n = \eta^{2n}$. Используя формулы 6.3.6 и 6.3.19 из справочника [25, стр. 84, 85], k_n можно представить при $\eta \gg 1$ как

$$k_n = 2\psi(1+n) - 2 \ln \eta.$$

В итоге ΔL , с точностью до $2\lambda \ll 1$, можно представить в виде

$$\Delta L = \frac{1}{2} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{x^{2n}}{(n!)^2} [2\psi(1+n) - 2 \ln x], \quad (B.4)$$

где $x = \sqrt{2\eta^2\lambda} = \sqrt{2\beta}\eta/v$. Далее просуммируем (B.4). Можно заметить, что

$$\begin{aligned} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{x^{2n}}{(n!)^2} \psi(1+n) &= \\ &= - \left[\frac{d}{d\alpha} \left(\sum_{n=1}^{\infty} \frac{x^{2n}}{n! \Gamma(\alpha+n)} \right) \right]_{\alpha=1} = \\ &= - \left[\frac{d}{d\alpha} \left\{ \frac{1}{\Gamma(\alpha)} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{x^{2n}}{n! (\alpha)_n} \right\} \right]_{\alpha=1}, \quad (B.5) \end{aligned}$$

где $(\alpha)_n$ — символ Похгаммера. В итоге получается известная сумма для гипергеометрической функции ${}_0F_1(\alpha, x^2)$ [22, стр. 499, формула 7.13.1.1]. Поэтому имеем

$$\begin{aligned} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{x^{2n}}{(n!)^2} \psi(1+n) &= \\ &= - \left[\frac{d}{d\alpha} \left\{ \frac{1}{\Gamma(\alpha)} ({}_0F_1(\alpha, x^2) - 1) \right\} \right]_{\alpha=1} = \\ &= - \left[\frac{d}{d\alpha} \left\{ x^{1-\alpha} I_{\alpha-1}(2x) - \frac{1}{\Gamma(\alpha)} \right\} \right]_{\alpha=1} = \\ &= \gamma + K_0(2x) + I_0(2x) \ln x. \quad (B.6) \end{aligned}$$

Учитывая также значение суммы

$$\sum_{n=1}^{\infty} \frac{x^{2n}}{(n!)^2} = I_0(2x) - 1,$$

в результате получим

$$\Delta L = \gamma + K_0(2x) + \ln x. \quad (B.7)$$

Строго говоря, эта формула получена для больших $\eta \gg 1$, однако, как уже отмечалось, вклад, вносимый в L^{Eik} поправкой ΔL при $\eta \leq 1$, пренебрежимо мал, порядка $\eta^2 2\lambda$. Формально, величина такого же порядка получается при малых η и для ΔL по формуле (B.7), поэтому эту формулу можно использовать для произвольных η . Этот вывод мы проверили путем сравнения с прямыми численными расчетами по формуле (62), и во всех случаях вносимая погрешность не превышала 0.5 %.

ЛИТЕРАТУРА

1. P. K. Sigmund, Dan. Vidensk. Selsk. Mat. Fys. Medd. **52**, 557 (2006).
2. C. C. Montanari and J. E. Miraglia, Phys. Rev. A **73**, 024901 (2006).
3. В. И. Матвеев, Д. В. Сидоров, Письма в ЖЭТФ **84**, 299 (2006).
4. В. И. Матвеев, Е. С. Гусаревич, Д. Н. Макаров, ЖЭТФ **136**, 843 (2009).
5. J. E. Miraglia and M. S. Gravielle, Phys. Rev. A **72**, 042902 (2005).
6. D. S. F. Crothers and J. F. McCann, J. Phys. B **16**, 3229 (1983).

7. P. Fainstein, V. H. Ponce, and R. Rivarola, *J. Phys. B* **24**, 3091 (1991).
8. F. Bloch, *Ann. der Phys.* **16**, 285 (1933).
9. W. H. Barkas, W. Birnbaum, and F. M. Smith, *Phys. Rev.* **101**, 778 (1956).
10. H. A. Bethe, *Ann. der Phys.* **5**, 324 (1930).
11. J. Lindhard and A. Sorensen, *Phys. Rev. A* **53**, 2443 (1996).
12. V. Khodyrev, *J. Phys. B* **33**, 5045 (2000).
13. Р. Ньютон, *Теория рассеяния волн и частиц*, Мир, Москва (1969).
14. В. М. Галицкий, *Задачи по квантовой механике: Учебное пособие для вузов*, ч. 2, Едиториал УРСС, Москва (2001).
15. В. И. Матвеев, Д. Н. Макаров, Е. С. Гусаревич, *Письма в ЖЭТФ* **92**, 317 (2010).
16. Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц, *Квантовая механика*, Наука, Москва (1989).
17. В. Б. Берестецкий, Е. М. Лифшиц, Л. П. Питаевский, *Квантовая электродинамика*, Наука, Москва (1989).
18. А. П. Прудников, Ю. А. Брычков, О. И. Маричев, *Интегралы и ряды. Специальные функции*, Наука, Москва (1973).
19. J. F. Ziegler, *Appl. Phys. A* **85**, 1249 (1999).
20. B. A. Weaver and A. J. Westphal, *Nucl. Instr. Meth. Phys. Res. B* **187**, 285 (2002).
21. C. Scheidenberger and H. Geissel, *Nucl. Instr. Meth. Phys. Res. B* **135**, 25 (1998).
22. А. П. Прудников, Ю. А. Брычков, О. И. Маричев, *Интегралы и ряды*, т. 3. *Специальные функции. Дополнительные главы*, Физматлит, Москва (2003).
23. Ю. Люк, *Специальные математические функции и их аппроксимации*, Мир, Москва (1980).
24. Г. Бейтмен, А. Эрдейи, *Высшие трансцендентные функции*, т. 1, Наука, Москва (1973).
25. М. Абрамовиц, И. Стеган, *Справочник по специальным функциям*, Наука, Москва (1979).