

В. В. ЮДИН

АНАЛИТИЧЕСКИЙ РАСЧЕТ ПРОБЕГОВ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ АППРОКСИМИРОВАННОЙ ЭНЕРГЕТИЧЕСКОЙ ЗАВИСИМОСТИ ЯДЕРНОГО ТОРМОЖЕНИЯ

(Представлено академиком Л. А. Арцимовичем 21 III 1972)

Существуют два подхода к расчету пробегов ионов с начальными скоростями $v < v_1 = Z_1^{1/2} e^2 / \hbar$ в аморфных веществах: аналитический ⁽¹⁻³⁾ и машинный ^(4, 5). Недостаток первого — конечные интегро-дифференциальные уравнения не имеют общего решения, недостаток обоих подходов — необходимость трудоемких расчетов на ЭВМ каждого частного случая.

Математические трудности аналитического подхода в значительной степени обусловлены отсутствием простой формы энергетической зависимости удельных потерь энергии на ядерное торможение для потенциала междуатомного взаимодействия Томаса — Ферми. Такую форму, однако, можно найти:

$$\left(\frac{d\varepsilon}{d\rho} \right)_n = \frac{a\varepsilon^{1/2}}{b + \varepsilon}, \quad (1)$$

где ε и ρ — безразмерные величины энергии и пробега,

$$\varepsilon = E \frac{a_{TF}^{1/2}}{Z_1 Z_2 e^2 (1 + \mu)}, \quad \rho = RN \frac{4\pi a_{TF}^2 \mu}{(1 + \mu)^2},$$

E , R — энергия (эВ) и пробег (см), N — собственная концентрация атомов вещества мишени, $\mu = M_2 / M_1$, Z_1 , Z_2 и M_1 , M_2 — атомные номера и атомные массы иона и атома мишени соответственно.

Для коэффициентов $a = 0,45$ и $b = 0,3$ расхождение аппроксимации (1) и кривой $(d\varepsilon/d\rho)_n = f(\varepsilon^{1/2})$, рассчитанной на ЭВМ ⁽⁶⁾, лежит в пределах 0,5—5% в наиболее практически важном энергетическом диапазоне $0,1 \leq \varepsilon \leq 9$ (рис. 1). Для энергий $0,01 \leq \varepsilon \leq 0,1$ та же точность обеспечивается коэффициентами $a = 0,23$ и $b = 0,1$. В диапазоне $9 \leq \varepsilon \leq 40$ $a = 0,31$, а $b = -2,45$. Для больших энергий справедлива аппроксимация, предложенная в работе ⁽⁶⁾: $\left(\frac{d\varepsilon}{d\rho} \right)_n = \frac{\lg 1,294\varepsilon}{2\varepsilon}$. При энергиях $\varepsilon < 0,01$ потенциал Томаса — Ферми становится достаточно грубым приближением и говорить о точности аппроксимации при этих энергиях едва ли корректно.

Для расчета среднего полного пробега воспользуемся дифференциальным выражением, описывающим элементарный пробег в предположении о взаимной независимости удельных потерь энергии на ядерное и электронное торможение:

$$d\rho = d\varepsilon \left/ \left[\left(\frac{d\varepsilon}{d\rho} \right)_n + \left(\frac{d\varepsilon}{d\rho} \right)_e \right] \right. . \quad (2)$$

На основании модели Линдхарда — Шарффа ⁽⁷⁾ удельные потери энергии на электронное торможение можно представить как

$$(d\varepsilon / d\rho)_e = k\varepsilon^{1/2}, \quad (3)$$

где

$$k = \frac{0,0793 Z_1^{2/3} Z_2^{1/2} (1 + \mu)^{3/2}}{(Z_1^{2/3} + Z_2^{2/3})^{3/4} M_2^{1/2}}.$$

На рис. 1 приведены зависимости величины $(d\varepsilon/d\rho)_e$ от энергии для различных значений параметра k .

Интегрируя (2) с учетом (1) и (3), получим выражение для среднего полного пробега:

$$\rho = \frac{2}{k} \varepsilon^{1/2} - \frac{2a}{k^3 \sqrt{a/k + b}} \operatorname{arctg} \frac{\varepsilon^{1/2}}{\sqrt{a/k + b}}. \quad (4)$$

Первый член правой части этого выражения описывает пробег в том случае, когда торможение является чисто электронным; второй — учиты-

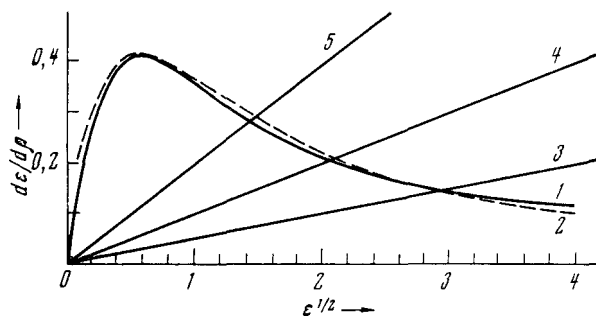


Рис. 1. Удельные потери энергии на ядерное (1, 2) и электронное (3–5) торможение: 1 — расчет (1), 2 — аппроксимация по выражению (1), 3 — $k = 0,05$, 4 — $k = 0,1$, 5 — $k = 0,2$

вает влияние ядерного торможения. Если потерями энергии на электронное торможение можно пренебречь, то интегрирование (2) приводит к выражению

$$\rho = \frac{2}{a} \varepsilon^{1/2} \left(b + \frac{1}{3} \varepsilon \right). \quad (5)$$

Сравнение результатов, полученных с помощью формул (4) и (5) с данными (1) показывает, что различие значений пробегов лежит в пределах практической точности использования графиков (1) и не превышает 5–6% во всем диапазоне $0,01 \leq \varepsilon \leq 1000$ для произвольных k . Хорошее совпадение пробегов для $\varepsilon > 9$ обусловлено тем, что даже при малых значениях $k = 0,05$ в области высоких энергий преобладают потери энергии на электронное торможение (см. рис. 1) и расхождение кривых $(d\varepsilon/d\rho)_e = f(\varepsilon^{1/2})$ существенно не сказывается на результатах.

Полученное выражение (4) применимо также для оценки с точностью до 10% средних нормальных пробегов (проекций пробегов) — ρ_p в случае, если $\mu \leq 1$, когда $\rho \simeq \rho_p$.

Таким образом, введение аппроксимации (1) позволило получить простые, но достаточно корректные выражения для расчета пробегов ускоренных ионов в аморфных мишенях и может быть полезным при рассмотрении других проблем атомных столкновений.

Поступило
19 III 1972

ЦИТИРОВАННАЯ ЛИТЕРАТУРА

- ¹ J. Lindhard, M. Scharff, H. Schiott, Kgl. Danske Videnskab. Selskab. Mat.-Fys. Medd., 33, 1 (1963). ² H. Schiott, ibid., 35, 9, 1 (1966). ³ H. Schiott, Canad. J. Phys., 46, 6, 449 (1968). ⁴ М. М. Бредов, М. Г. Ланг, Н. М. Окунева. ЖТФ, 28, 252 (1958). ⁵ И. В. Павлов, Е. И. Зорин и др., ФТТ, 8, 2679 (1966). ⁶ J. Lindhard, V. Nielsen, M. Scharff, Kgl. Danske Videnskab. Selskab. Mat.-Fys. Medd., 36, 1 (1968). ⁷ J. Lindhard, M. Scharff, Phys. Rev., 124, 128 (1961).