(γ — угол между $\varkappa$ и $\mathbf{q}$). Интегрирование по $d\varphi\, d\eta$ легко производится путем подстановки $\sqrt{\eta}\cos\varphi = u$, $\sqrt{\eta}\sin\varphi = v$, после чего получается

$$\frac{I}{2\pi} = \left\{\frac{\partial}{\partial\lambda}\int_0^\infty \exp\left\{\frac{-q^2\sin^2\gamma + \lambda^2 + (\varkappa + q\cos\gamma)^2}{2\,[i\,(\varkappa + q\cos\gamma) - \lambda]}\,\xi\right\}\frac{F\,(i/\varkappa,\ 1,\ i\varkappa\xi)\,d\xi}{[i\,(\varkappa + q\cos\gamma) - \lambda]}\right\}_{\lambda=1}.$$

Стоящий здесь интеграл берется по формуле (f,3) с $\gamma = 1$, $n = 0$.

Дальнейшие вычисления длинны, но элементарны и дают в результате следующее выражение для сечения:

$$d\sigma = \frac{2^8 k'\varkappa\,[q^2 + 2q\varkappa\cos\gamma + (\varkappa^2+1)\cos^2\gamma]}{\pi k q^2\,[q^2 + 2q\varkappa\cos\gamma + 1 + \varkappa^2]^4[(q+\varkappa)^2+1]\,[(q-\varkappa)^2+1]\left(1 - e^{-2\pi/\varkappa}\right)}\times$$
$$\times\exp\left(-\frac{2}{\varkappa}\operatorname{arctg}\frac{2\varkappa}{q^2-\varkappa^2+1}\right)do\,do_\varkappa\,d\varkappa.$$

Интегрирование по всем углам испускания вторичного электрона производится элементарно и дает распределение рассеяния по направлениям при данной энергии $\varkappa^2/2$ испущенного электрона

$$d\sigma = \frac{2^{10}k'\varkappa}{kq^2}\,\frac{\left[q^2 + \frac{1}{3}(1+\varkappa^2)\right]\exp\left(-\frac{2}{\varkappa}\operatorname{arctg}\frac{2\varkappa}{q^2-\varkappa^2+1}\right)}{[(q+\varkappa)^2+1]^3\,[(q-\varkappa)^2+1]^3\left(1 - e^{-2\pi/\varkappa}\right)}\,do\,d\varkappa.$$

При $q \gg 1$ это выражение имеет острый максимум при $\varkappa \approx q$; вблизи максимума

$$d\sigma = \frac{2^5}{3\pi\varkappa^4}\,\frac{d\varkappa\,do}{[1+(q-\varkappa)^2]^3}.$$

Интегрируя по $do = 2\pi q\,dq/k^2 \approx (2\pi\varkappa/k^2)\,d\,(q-\varkappa)$, получим выражение $8\pi\,d\varkappa/k^2\varkappa^3$, совпадающее, как и следовало, с первым членом по формуле (148,17).

§ 149. Эффективное торможение

В применениях теории столкновений большое значение имеет вычисление средней потери энергии сталкивающейся частицей. Эту потерю удобно характеризовать величиной

$$d\varkappa = \sum_n (E_n - E_0)\,d\sigma_n, \qquad (149{,}1)$$

которую мы будем называть *эффективным торможением* (дифференциальным); суммирование производится, разумеется, по состояниям как дискретного, так и непрерывного спектров, $d\varkappa$ отнесено к рассеянию в данный элемент телесного угла[1]).

Общая формула для эффективного торможения быстрых электронов имеет вид

$$d\varkappa = 8\pi\left(\frac{e^2}{\hbar v}\right)^2\sum_n (E_n - E_0)\left|\left\langle n\left|\sum_a e^{-i\mathbf{q}\mathbf{r}_a}\right|0\right\rangle\right|^2\frac{dq}{q^3} \qquad (149{,}2)$$

[1]) Если электрон проходит через газ, рассеяние на различных атомах происходит независимо и величина $N\,d\varkappa$ (N — число атомов в единице объема газа) есть энергия, теряемая электроном на единице его пути при столкновениях, отклоняющих его в данный элемент телесного угла.

($d\sigma_n$ из (148,9)). Исключим, как и при выводе (148,23), из рассмотрения область совсем малых углов и снова будем считать, что $1 \gg \vartheta \gg (v_0/v)^2$; тогда q не зависит от величины передаваемой энергии и сумма по n может быть вычислена в общем виде.

Сумма вычисляется с помощью *теоремы суммирования*, которая выводится следующим образом. Матричные элементы от некоторой величины f (функции координат) и ее производной по времени $\dot{f}$ связаны друг с другом формулой

$$(\dot{f})_{0n} = -\frac{i}{\hbar}(E_n - E_0) f_{0n}. \tag{149,3}$$

Поэтому имеем

$$\sum_n (E_n - E_0)|f_{0n}|^2 = \sum_n (E_n - E_0) f_{0n} (f_{0n})^* = \sum_n (E_n - E_0) f_{0n} (f^+)_{n0} =$$
$$= i\hbar \sum_n (\dot{f})_{0n} (f^+)_{n0} = i\hbar (\dot{f} f^+)_{00}.$$

Волновые функции стационарных состояний атома можно выбрать вещественными. Тогда матричные элементы функции координат f связаны соотношениями $f_{0n} = f_{n0}$, а для матричных элементов (149,3) имеем соответственно $(\dot{f})_{0n} = -(\dot{f})_{n0}$. Поэтому рассматриваемую сумму можно написать также и в виде

$$-i\hbar \sum_n (f^+)_{0n} (\dot{f})_{n0} = -i\hbar (f^+ \dot{f})_{00}.$$

Взяв полусумму обоих выражений, получим искомую теорему

$$\sum_n (E_n - E_0) |f_{0n}|^2 = \frac{i\hbar}{2} (\dot{f} f^+ - f^+ \dot{f})_{00}. \tag{149,4}$$

Применим ее к величине $f = \sum_a e^{-i\mathbf{q}\mathbf{r}_a}$. Согласно (19,2) ее производная по времени изобразится оператором

$$\hat{\dot{f}} = -\frac{\hbar}{2m} \sum_a \left[e^{-i\mathbf{q}\mathbf{r}_a} (\mathbf{q}\nabla_a) + (\mathbf{q}\nabla_a) e^{-i\mathbf{q}\mathbf{r}_a}\right].$$

Прямое вычисление дает

$$\hat{\dot{f}} f^+ - f^+ \hat{\dot{f}} = -\frac{i\hbar}{m} q^2 Z.$$

Подставив в (149,4), получим формулу

$$\sum_n \frac{2m}{\hbar^2 q^2} (E_n - E_0) \left| \left\langle n \left| \sum_a e^{-i\mathbf{q}\mathbf{r}_a} \right| 0 \right\rangle \right|^2 = Z, \tag{149,5}$$

которая и осуществляет нужное нам суммирование[1]).

[1]) При выводе этого соотношения мы нигде не использовали тот факт, что состояние, отсеченное индексом 0, есть нормальное состояние атома. Поэтому оно имеет место для любого начального состояния.

Таким образом, для дифференциального эффективного торможения находим формулу

$$d\varkappa = 4\pi \frac{Ze^4}{mv^2} \frac{dq}{q} = \frac{2Ze^4}{mv^2} \frac{do}{\vartheta^2}. \tag{149,6}$$

Область ее применимости дается неравенством $(v_0/v)^2 \ll \vartheta \ll 1$, т. е. $v_0/v \ll a_0 q \ll v/v_0$.

Далее, определим полное эффективное торможение $\varkappa(q_1)$ для всех столкновений, сопровождающихся передачей импульса, не превышающей некоторого значения q_1 такого, что $v_0/v \ll a_0 q_1 \ll$ $\ll v/v_0$:

$$\varkappa(q_1) = \sum_n \int_{q_{\min}}^{q_1} (E_n - E_0)\, d\sigma_n; \tag{149,7}$$

$q_{\min}$ дается формулой (148,11). Знак интеграла нельзя вынести из-под знака суммы, так как $q_{\min}$ зависит от n.

Разобьем область интегрирования на две части — от $q_{\min}$ до q_0 и от q_0 до q_1, где q_0 — такое значение q, что $v_0/v \ll q_0 a_0 \ll 1$. Тогда во всей области интегрирования от $q_{\min}$ до q_0 можно воспользоваться для $d\sigma_n$ выражением (148,14):

$$\varkappa(q_0) = 8\pi \left(\frac{e}{\hbar v}\right)^2 \sum_n |\langle n|d_x|0\rangle|^2 (E_n - E_0) \int_{q_{\min}}^{q_0} \frac{dq}{q},$$

откуда

$$\varkappa(q_0) = 8\pi \left(\frac{e}{\hbar v}\right)^2 \sum_n |\langle n|d_x|0\rangle|^2 (E_n - E_0) \ln \frac{q_0 \hbar v}{E_n - E_0}. \tag{149,8}$$

В области же от q_0 до q_1 можно произвести сначала суммирование по n, приводящее для $d\varkappa$ к выражению (149,6), которое при интегрировании по dq дает

$$\varkappa(q_1) - \varkappa(q_0) = 4\pi \frac{Ze^4}{mv^2} \ln \frac{q_1}{q_0}. \tag{149,9}$$

Для преобразования полученных выражений воспользуемся теоремой суммирования, получающейся из формулы (149,4), если положить в ней

$$\hat{l} = \frac{d_x}{e} = \sum_a x_a, \quad \hat{f} = \frac{1}{m} \sum_a \hat{p}_{xa}.$$

Коммутирование $\hat{f}^+$ с $\hat{f}$ дает ($\hat{f}^+$ в данном случае совпадает с $\hat{f}$) $\hat{f}\hat{f}^+ - \hat{f}^+\hat{f} = -\frac{i\hbar}{m}Z$, так что [1])

$$\sum_n N_{0n} \equiv \sum_n \frac{2m}{(e\hbar)^2}(E_n - E_0)\,|\langle n|d_x|0\rangle|^2 = Z. \qquad (149,10)$$

Величины N_{0n} называют *силами осцилляторов* соответствующих переходов.

Введем некоторую среднюю атомную энергию I согласно

$$\ln I = \frac{\sum\limits_n N_{0n}\ln(E_n - E_0)}{\sum\limits_n N_{0n}} = \frac{1}{Z}\sum_n N_{0n}\ln(E_n - E_0). \qquad (149,11)$$

Используя (149,10), формулу (149,8) можно переписать в виде $\varkappa(q_0) = \frac{4\pi Z e^4}{mv^2}\ln\frac{q_0\hbar v}{I}$. Складывая с (149,9), окончательно получаем

$$\varkappa(q_1) = \frac{4\pi Z e^4}{mv^2}\ln\frac{q_1\hbar v}{I}. \qquad (149,12)$$

В эту формулу входит всего одна характерная для данного атома постоянная [2]).

Выражая q_1 через угол рассеяния ϑ_1, согласно $q_1 = mv\vartheta_1/\hbar$ получим эффективное торможение при рассеянии на все углы $\vartheta \leqslant \vartheta_1$:

$$\varkappa(\vartheta_1) = 4\pi\frac{Ze^4}{mv^2}\ln\frac{mv^2\vartheta_1}{I}. \qquad (149,13)$$

Если $q_1 a_0 \gg 1$ (т. е. $\vartheta_1 \gg v_0/v$), то можно выразить $\varkappa$ в виде функции от наибольшей передаваемой падающим электроном атому энергии. В предыдущем параграфе было указано, что при $qa_0 \gg 1$ происходит ионизация атома, причем практически весь импульс $\hbar\mathbf{q}$ и энергия передаются одному атомному электрону.

---

[1]) К этому соотношению относится то же замечание, которое было сделано по поводу (149,5).

[2]) Для водорода $I = 0{,}55me^4/\hbar^2 = 14{,}9$ эВ. Для тяжелых атомов можно ожидать хорошей точности, если вычислить постоянную I с помощью метода Томаса—Ферми. Легко установить, как будут зависеть вычисленные таким образом значения I от Z. В квазиклассическом случае разностям уровней энергии соответствуют собственные частоты системы частиц. Средняя собственная частота атома порядка величины v_0/a_0; поэтому мы можем заключить, что $I \sim \hbar v_0/a_0$. Скорости атомных электронов в модели Томаса—Ферми зависят от Z, как $Z^{2/3}$, а размеры атома — как $Z^{-1/3}$. Таким образом, находим, что I должно быть пропорционально Z: $I = \mathrm{const}\cdot Z$. Из экспериментальных данных можно заключить, что const ~ 10 эВ.

Поэтому $\hbar \mathbf{q}$ и ε связаны друг с другом, как импульс и энергия электрона, т. е. $\varepsilon = \hbar^2 q^2/2m$. Подставляя в (149,12) $q_1^2 = 2m\varepsilon_1/\hbar^2$, получим эффективное торможение при столкновениях, сопровождающихся передачей энергии $\varepsilon \leqslant \varepsilon_1$:

$$\varkappa(\varepsilon_1) = \frac{2\pi Z e^4}{mv^2} \ln \frac{2m\varepsilon_1 v^2}{I^2}. \qquad (149,14)$$

В заключение сделаем следующее замечание. Уровни энергии дискретного спектра атома связаны в основном с возбуждениями одного (внешнего) электрона; уже возбуждение двух электронов связано обычно с энергией, достаточной для ионизации атома. Поэтому в сумме интенсивностей осцилляторов переходы в состояния дискретного спектра составляют лишь долю порядка единицы; переходы же с ионизацией — порядка Z. Отсюда следует, что основную роль в торможении (тяжелыми атомами) играют столкновения, сопровождающиеся ионизацией.

Задача

Определить полное эффективное торможение электрона атомом водорода ($I = 0{,}55$ ат. единицы); при больших передачах энергии более быстрый из обоих сталкивающихся электронов принимается за первичный.

Решение. Когда первичный и вторичный электроны приобретают после столкновения сравнимые энергии, надо учитывать обменный эффект. Поэтому для торможения с передачей энергии от некоторого значения ε_1 ($1 \ll \varepsilon_1 \ll v^2$) до наибольшего $\varepsilon_{\max} = E/2 = v^2/4$ (принятое нами определение первичного электрона!) надо пользоваться сечением (148,17):

$$\varkappa(\varepsilon_{\max}) - \varkappa(\varepsilon_1) = \frac{\pi}{E} \int_{\varepsilon_1}^{E/2} \varepsilon \left[\frac{1}{\varepsilon^2} + \frac{1}{(E-\varepsilon)^2} - \frac{1}{\varepsilon(E-\varepsilon)}\right] d\varepsilon = \frac{\pi}{E}\left(\ln \frac{E}{8\varepsilon_1} + 1\right).$$

Складывая со (149,14), получим[1])

$$\varkappa = \frac{4\pi}{v^2} \ln \left(\frac{v^2}{2I}\sqrt{\frac{e}{2}}\right) = \frac{4\pi}{v^2} \ln \frac{v^2}{0{,}94}$$

(в атомных единицах).

§ 150. Неупругие столкновения тяжелых частиц с атомами

Условие применимости борновского приближения к столкновениям тяжелых частиц с атомами, выраженное через скорость частицы, остается тем же, что и для электронов: $v \gg v_0$. Это

[1]) Для столкновений позитрона с атомом водорода обменный эффект отсутствует, и полное торможение получается просто подстановкой в (149,14) $\varepsilon_{\max} = E = v^2/2$ вместо ε_1: $\varkappa = \frac{4\pi}{v^2} \ln \frac{v^2}{0{,}55}$.