



Math-Net.Ru

Общероссийский математический портал

В. Ф. Волков, С. А. Герасимов, Обратная задача в статистической модели атома, *Письма в ЖТФ*, 1984, том 10, выпуск 18, 1111–1113

Использование Общероссийского математического портала Math-Net.Ru подразумевает, что вы прочитали и согласны с пользовательским соглашением

<http://www.mathnet.ru/rus/agreement>

Параметры загрузки:

IP: 18.97.9.170

12 февраля 2025 г., 03:58:53



ОБРАТНАЯ ЗАДАЧА В СТАТИСТИЧЕСКОЙ МОДЕЛИ АТОМА

В.Ф. Волков, С.А. Герасимов

В настоящей работе предложен метод восстановления атомного потенциала из известного распределения атомных электронов по энергиям. Приведенные в работе результаты расчетов функции экранирования могут быть использованы в широком ряде задач технической физики. К таким задачам относятся изучение потенциального рассеяния заряженных частиц веществом, описание процессов неупругого рассеяния заряженных частиц и фотонов в рамках импульсного приближения, исследование потерь энергии заряженными частицами при прохождении через различные среды, энергетический стратлинг и некоторые вопросы физики плазмы.

Распределение атомных электронов по энергиям в статистической модели атома может быть определено исходя из следующих предположений.

Если p - импульс электрона, $-E$ и r - соответственно, его энергия и расстояние от ядра с зарядом Ze , $b = \frac{1}{2} \left(\frac{3\pi}{4} \right)^{2/3} \frac{\hbar^2}{mc^2}$, $x = \frac{r Z^{1/3}}{b}$, $\varepsilon = \frac{Eb}{e^2 Z^{4/3}}$, $k = \frac{p\sqrt{b}}{\sqrt{2me^2 Z^{2/3}}}$, то использование классического выражения

$$k^2 + \varepsilon = \frac{\chi(x)}{x}, \quad (1)$$

справедливость которого предполагается в статистической модели атома, позволяет записать нормированную на единицу функцию распределения $Q(\varepsilon)$ электронов по энергиям в виде

$$Q(\varepsilon) = \frac{1}{2} \int_0^\infty g^3(u) dk = \frac{1}{4} \int_\varepsilon^\infty \frac{g^3(u) du}{\sqrt{u-\varepsilon}}. \quad (2)$$

Здесь $u = k^2 + \varepsilon$, $x = g(u)$ - решение уравнения (1), $\chi(x)$ - универсальная функция модели Томаса-Ферми [1]. Сравнение между теоретическим (а) и экспериментальным (b и c) интегральными спектрами, определяющими число электронов N_e , приведенные энергии ε которых по модулю меньше заданной, представлено на рис. 1 и обнаруживает значительные расхождения в области малых величин ε . Экспериментальные результаты на рис. 1 соответствуют усредненному по всем $20 \leq Z \leq 90$ интегральному спектру атомных электронов (b) и, для примера, атому с зарядом ядра $Z = 40$ (c). Экспериментальные значения величин энергий атомных электронов взяты из работы [2].

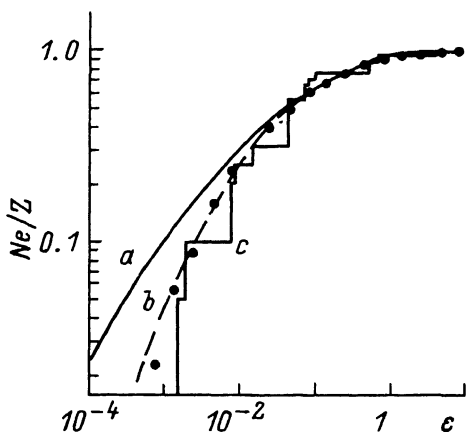


Рис. 1. Интегральный спектр атомных электронов.

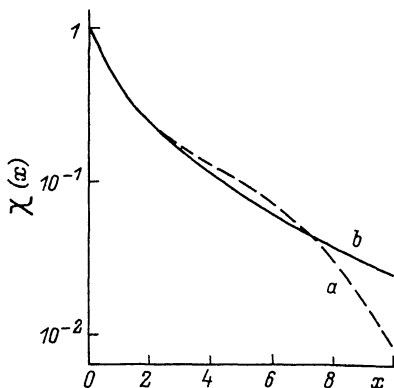


Рис. 2. Функция экранирования в статистической модели атома.

Использование усредненного интегрального спектра позволяет достаточно точно восстановить функции $g(u)$ и $\chi(x)$ из экспериментальных данных при выполнении следующих условий.

1. При малых расстояниях r потенциал будем предполагать кулоновским. Это означает, что при больших величинах ϵ функция $Q(\epsilon)$ должна иметь асимптотику $3\pi/(32\epsilon^{5/2})$.

2. Для описанной экспериментальными данными функции $Q(\epsilon)$ предполагаем справедливым условие нормировки.

3. Предполагаем, что найденная из экспериментальных данных функция $g(u)$ должна быть монотонна.

Последнее условие необходимо для единственности решения уравнения (1). Для восстановления только функции $g(u)$ без рассмотрения $\chi(x)$ достаточно наложить условие $g(u) \geq 0$ всюду в области $u \geq 0$. Найденная таким образом функция $g(u)$ будет корректно в рамках квазиклассического приближения описывать распределение атомных электронов по импульсам и энергиям и может быть полезна при решении в импульсном приближении ряда задач, связанных с неупругим рассеянием заряженных частиц атомами.

Если при соблюдении условий 1–3 экспериментальные результаты описаны функцией $Q(\epsilon)$ достаточно точно, то решение уравнения (2)

$$g(u) = \left[-\frac{4}{\pi} \int_u^\infty \frac{dQ(s)}{ds} \frac{ds}{\sqrt{s-u}} \right]^{1/3} \quad (3)$$

в рамках квазиклассического приближения позволяет найти из уравнения (1) функцию $\chi(x)$, определяющую потенциал атома.

На рис. 2 представлены результаты расчета восстановленной таким методом функции экранирования $\chi(x)$. При больших величинах x восстановленная функция $\chi(x)$ дает существенно заниженные по сравнению с функцией Томаса-Ферми (b) значения, что согласуется с известными представлениями [3].

Функция $\chi(x)$ получена для среднего интегрального спектра атомных электронов и имеет универсальный характер. Аналогичные расчеты могут быть проделаны и для любого конкретного атома с достаточно большим Z .

Предложенный в настоящей работе метод решения обратной задачи и восстановления атомного потенциала достаточно прост, принципиально отличается от уже известных методов и корректен в рамках квазиклассического приближения. Достоинством описанного метода является также то, что он не связан с модельными расчетами в теории рассеяния, характерными для большинства обратных задач.

Л и т е р а т у р а

- [1] Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Квантовая механика, М.: Наука, 1982.
- [2] Карлсон Т.А. Фотоэлектронная и Оже-спектроскопия. Л.: Машиностроение, 1981.
- [3] Киржниц Д.А., Лозовик Ю.Е., Шпатаковская Г.В. - УФН, 1975, т. 117, с. 3.

Ростовский государственный университет

Поступило в Редакцию
31 октября 1983 г.
В окончательной редакции
14 декабря 1983 г.

Письма в ЖТФ, том 10, вып. 18

26 сентября 1984 г.

ВЫНУЖЕННОЕ ОНДУЛЯТОРНОЕ ИЗЛУЧЕНИЕ В РЕЖИМЕ ВЫСОКОГО КПД

А.С. Ельчанинов, С.Д. Коровин,
Г.А. Месяц, В.В. Ростов

В настоящее время интенсивно исследуется вынужденное ондуляторное излучение релятивистских электронов в режиме преобразования частоты. При этом достигается длина волны $\lambda \approx d/\gamma$, где d - пространственный период магнитного поля в ондуляторе, а γ - релятивистский масс-фактор. Однако генераторы такого типа (убитроны) могут использоваться и иметь КПД взаимодействия $\geq 20\%$ [1, 2], не уступающий черенковским приборам, в случае, когда частоты волны накачки Ω и сигнала ω соизмеримы ($\omega \approx \Omega = k\bar{v}_{||}$;