V. F. Volkov, S. A. Gerasimov, INVERSE PROBLEM IN THE STATISTICAL ATOM MODEL, *Pisma v Zhurnal Tekhnicheskoi Fiziki*, 1984, Volume 10, Issue 18, 1111–1113

Письма в ЖТФ, том 10, вып. 18 26 сентября 1984г.

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 страгглинг и некоторые вопросы физики плазмы.

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

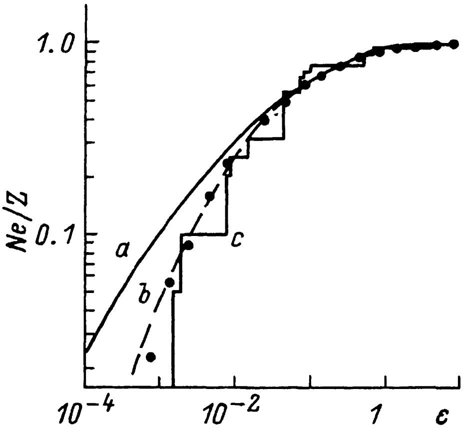
Если p – импульс электрона, $-E$ и r – соответственно, его энергия и расстояние от ядра с зарядом Ze, $b=\frac{1}{2}\left(\frac{3\pi}{4}\right)^{2/3}\frac{\hbar^2}{me^2}$, $x=\frac{rZ^{1/3}}{b}$, $\varepsilon=\frac{Eb}{e^2Z^{4/3}}$, $k=\frac{p\sqrt{b}}{\sqrt{2me^2}\,Z^{2/3}}$, то использование классического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

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

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

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

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 Ne, 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 $20 \leqslant Z \leqslant 90$ интегральному спектру атомных электронов (b) и, для примера, атому с зарядом ядра $Z=40$ (с). Экспериментальные значения величин энергий атомных электронов взяты из работы [2].



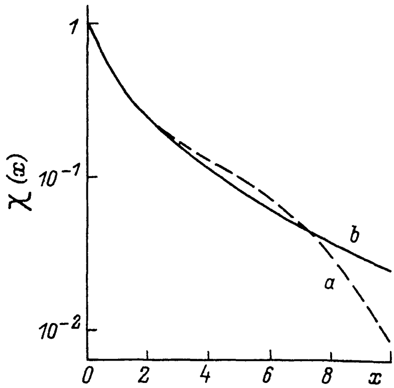


Рис. 1. Интегральный спектр атомных электронов.

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 $Q(\varepsilon)$ должна иметь асимптотику $3\pi/(32\varepsilon^{5/2})$.

2. Для описанной экспериментальными данными функции $Q(\varepsilon)$ 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 $g(u)\geqslant 0$ всюду в области $u\geqslant 0$. 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 $Q(\varepsilon)$ достаточно точно, то решение уравнения (2)

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

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.

Литература

[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.

ВЫНУЖДЕННОЕ 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 $\lambda \approx d/\gamma^2$, где d – пространственный период магнитного поля в ондуляторе, а γ – релятивистский масс-фактор. Однако генераторы такого типа (убитроны) могут использоваться и иметь КПД взаимодействия $\gtrsim 20\%$ [1, 2], не уступающий черенковским приборам, в случае, когда частоты волны накачки Ω и сигнала ω соизмеримы ($\omega \simeq \Omega = k V_{\parallel}$;