

УДК 539.1

РАСПРЕДЕЛЕНИЕ ИОНИЗАЦИОННЫХ ПОТЕРЬ ЭНЕРГИИ В МОДЕЛИ АТОМНЫХ ОБОЛОЧЕЧНЫХ ГАРМОНИЧЕСКИХ ОСЦИЛЛЯТОРОВ

В. М. Гришин, А. П. Костин, С. К. Котельников, М. А. Негодаев

Получено рекуррентное соотношение, связывающее коэффициенты распределения ионизационных потерь энергии в модели атомных оболочечных гармонических осцилляторов. Формула позволяет существенно ускорить вычисление флуктуаций ионизационных потерь энергии релятивистской заряженной частицы в очень тонких слоях вещества.

Флуктуации ионизационных потерь энергии релятивистской заряженной частицы в очень тонких слоях вещества (газы при $0,1 - 10 \text{ см} \cdot \text{атм}$, твердые тела толщиной $5 - 50 \text{ мкм}$) привлекают внимание в связи с разработкой трековых детекторов-идентификаторов, поскольку оказывают существенное влияние на их характеристики (эффективность регистрации, угловое и пространственное разрешения, сепарация электронов и адронов и т.д.). Сложная конфигурация современных трековых систем предъявляет жесткие требования к скорости и экономичности расчетов распределений $\Psi(\Delta)$ ионизационных потерь энергии Δ , которые позволяют оптимизировать геометрию детекторов. Недавно для описания распределения $\Psi(\Delta)$ была предложена модель атомных оболочечных гармонических осцилляторов (АГО) [1], которая является обобщением модели гармонического осциллятора [2] и согласуется с экспериментом в более широком диапазоне толщин вещества $l \geq 0,5 \text{ см} \cdot \text{атм}$ и лоренц-факторов γ частицы. В настоящей работе рассмотрен модифицированный вариант модели АГО, позволяющий за счет использования прямого рекуррентного соотношения между коэффициентами распределения $\Psi(\Delta)$ существенно ускорить вычисления и уменьшить объем требуемой памяти ЭВМ.

В общем виде распределения $\Psi(\Delta)$ описывается интегральным представлением обобщенного распределения Пуассона [3]

$$\Psi(\Delta) = \int_{\nu-i\infty}^{\nu+i\infty} \frac{dp}{2\pi i} \exp \left\{ p\Delta - lN \int_0^{T_0} \frac{d\sigma}{d\omega} [1 - \exp(-p\omega)] d\omega \right\}, \quad (1)$$

где $d\sigma/d\omega$ – дифференциальное сечение ионизирующих столкновений с передачей энергии ω , N – число атомов вещества в единице объема, T_0 – максимальное значение ω (определяется кинематикой столкновения или геометрией детектора), ν – действительная сколь угодно малая положительная величина. В модели АГО атомные электроны представляются в виде набора невзаимодействующих гармонических осцилляторов с потенциалами возбуждения I_s , пропорциональными энергии связи атомных оболочек и удовлетворяющими условию [4]

$$\sum_{s=1}^{s_0} Z_s \ln I_s = Z \ln I, \quad \sum_{s=1}^{s_0} Z_s = Z, \quad (2)$$

где Z – атомный номер, I – среднелогарифмический потенциал ионизации, s_0 – эффективное число атомных оболочек с числом электронов Z_s . Тогда в первом борновском приближении можно получить соотношения для сечений возбуждения s -го осциллятора на n -й уровень ($n \geq 1$) и затем провести в (1) интегрирование по ω (эквивалентное в этом случае суммированию по n).

$$\Psi(\Delta) = \int_{\nu-i\infty}^{\nu+i\infty} \frac{dp}{2\pi i} \exp \left\{ p\Delta - \sum_{s=1}^{s_0} \frac{\xi_s}{I_s} (1 - e^{-pI_s}) \ln \frac{\alpha_s}{1 - e^{-pI_s}} \right\}, \quad (3)$$

$$\ln \alpha_s = \ln \frac{2mv^2\gamma^2}{I_s} + 0,423 - \beta^2 - D_s, \quad \xi_s = \frac{2\pi N Z_s e^4 l}{mv^2},$$

где $\beta = v/c$ – скорость частицы v в единицах скорости света c , m и e – масса и заряд электрона, D_s – поправка на эффект плотности для взаимодействий с s -й оболочкой. Поскольку энергии связи оболочек сильно отличаются друг от друга, потенциалы I_s можно выбрать кратными наименьшему потенциалу I_1 , соответствующему внешней оболочке: $I_s = n_s I_1$, где целое число n_s выбрано так, чтобы максимально удовлетворить (2). Тогда из физических соображений ясно, что

$$\Psi(\Delta) = \sum_{n=0}^{\infty} c_n^* \delta(\Delta - nI_1), \quad (4)$$

В общем виде распределения $\Psi(\Delta)$ описывается интегральным представлением обобщенного распределения Пуассона [3]

$$\Psi(\Delta) = \int_{\nu-i\infty}^{\nu+i\infty} \frac{dp}{2\pi i} \exp \left\{ p\Delta - lN \int_0^{T_0} \frac{d\sigma}{d\omega} [1 - \exp(-p\omega)] d\omega \right\}, \quad (1)$$

где $d\sigma/d\omega$ – дифференциальное сечение ионизирующих столкновений с передачей энергии ω , N – число атомов вещества в единице объема, T_0 – максимальное значение ω (определяется кинематикой столкновения или геометрией детектора), ν – действительная сколь угодно малая положительная величина. В модели АГО атомные электроны представляются в виде набора невзаимодействующих гармонических осцилляторов с потенциалами возбуждения I_s , пропорциональными энергии связи атомных оболочек и удовлетворяющими условию [4]

$$\sum_{s=1}^{s_0} Z_s \ln I_s = Z \ln I, \quad \sum_{s=1}^{s_0} Z_s = Z, \quad (2)$$

где Z – атомный номер, I – среднелогарифмический потенциал ионизации, s_0 – эффективное число атомных оболочек с числом электронов Z_s . Тогда в первом борновском приближении можно получить соотношения для сечений возбуждения s -го осциллятора на n -й уровень ($n \geq 1$) и затем провести в (1) интегрирование по ω (эквивалентное в этом случае суммированию по n).

$$\Psi(\Delta) = \int_{\nu-i\infty}^{\nu+i\infty} \frac{dp}{2\pi i} \exp \left\{ p\Delta - \sum_{s=1}^{s_0} \frac{\xi_s}{I_s} (1 - e^{-pI_s}) \ln \frac{\alpha_s}{1 - e^{-pI_s}} \right\}, \quad (3)$$

$$\ln \alpha_s = \ln \frac{2mv^2 \gamma^2}{I_s} + 0,423 - \beta^2 - D_s, \quad \xi_s = \frac{2\pi N Z_s e^4 l}{mv^2},$$

где $\beta = v/c$ – скорость частицы v в единицах скорости света c , m и e – масса и заряд электрона, D_s – поправка на эффект плотности для взаимодействий с s -й оболочкой. Поскольку энергии связи оболочек сильно отличаются друг от друга, потенциалы I_s можно выбрать кратными наименьшему потенциалу I_1 , соответствующему внешней оболочке: $I_s = n_s I_1$, где целое число n_s выбрано так, чтобы максимально удовлетворить (2). Тогда из физических соображений ясно, что

$$\Psi(\Delta) = \sum_{n=0}^{\infty} c_n^* \delta(\Delta - nI_1), \quad (4)$$

где δ - дельта-функция Дирака, а c_n^* - безразмерные коэффициенты. Для их определения представим дельта-функцию с помощью интегрального преобразования и сравним правые части (3) и (4). Нетрудно видеть, что

$$c_n^* = I_1 \int_{-i\pi/I_1}^{i\pi/I_1} \frac{dp}{2\pi i} \exp \left\{ npI_1 - \sum_{s=0}^{s_0} \frac{\xi_s}{I_s} (1 - e^{-n_s p I_1}) \ln \frac{a_s}{1 - e^{-n_s p I_1}} \right\}.$$

Удобно ввести новую переменную $z = \exp(-pI_1)$. Тогда

$$c_n = \int_{\tilde{c}} \frac{dz}{2\pi i} \frac{\Phi(z)}{z^{(n+1)}}, \quad \Phi(z) = \exp \left\{ - \sum_{s=1}^{s_0} b_s (1 - z^{n_s}) \ln \frac{a_s}{1 - z^{n_s}} \right\}, \quad (5)$$

где интегрирование по z ведется вдоль окружности \tilde{c} с центром в точке $z = 0$ радиусом меньше единицы ($\nu > 0$) в направлении против часовой стрелки, а $b_s = \xi_s/I_s$. Из теории вычетов следует

$$c_n^* = \frac{1}{n!} \left. \frac{d^n \Phi(z)}{dz^n} \right|_{z=0} = \frac{1}{n!} \Phi^{(n)}(0); \quad \sum_{n=0}^{\infty} c_n^* = \Phi(1) \equiv 1.$$

Нетрудно видеть, что

$$\Phi^{(1)} = \Phi G, \quad G(z) = \sum_{s=1}^{s_0} b_s n_s z^{n_s-1} \left[\ln \frac{a_s}{1 - z^{n_s}} - 1 \right],$$

$$\Phi^{(n+1)} = \Phi^{(n)} G + \sum_{k=1}^n \frac{n!}{k!(n-k)!} \Phi^{(n-k)} G^{(k)}.$$

Отсюда, вычислив производные G с помощью разложения $\ln(1 - z^{n_s}) = - \sum_{k=1}^{\infty} z^{n_s k}/k$, окончательно получаем:

$$c_0^* = \exp \left\{ - \sum_{s=1}^{s_0} b_s \ln a_s \right\}, \quad c_1^* = c_0^* b_1 [\ln a_1], \quad (6)$$

$$(n+1)c_{n+1}^* = c_n^* b_1 [\ln a_1 - 1] + \sum_{k=1}^n c_{n-k}^* \left\{ \frac{b_1}{k} + \sum_{s=2}^{s_0} b_s n_s \left[(\ln a_s - 1) \delta(k, n_s - 1) + \sum_{j=2}^{\infty} \frac{\delta(k, j n_s - 1)}{j-1} \right] \right\} \begin{matrix} j \geq 2 \\ n \geq 2 \end{matrix}$$

где δ - символ Кронекера. Рекуррентное соотношение (6) обобщает формулу (9) в [2], соответствующую случаю одного гармонического осциллятора $s_0 = 1$, и позволяет

провести прямое вычисление распределения $\Psi(\Delta)$ в модели АГО. Процедура выбора потенциалов I_s для сложного вещества подробно описана в [1].

Точность вычисления распределения $\Psi(\Delta)$ определяется отношением $I_1/\bar{\Delta}$, где средние ионизационные потери энергии $\bar{\Delta} = \sum_{n=0}^{\infty} n I_1 c_n^* \propto l$ можно рассчитать по формуле Бете - Блоха - Штернхеймера [4]. Поскольку модель АГО достаточно упрощенно описывает квантовомеханическое поведение атомных электронов, разумная точность не может быть лучше нескольких процентов. Это позволяет при заданной толщине оптимизировать число осцилляторов и, следовательно, скорость расчета путем усреднения по внешним оболочкам аналогично (2):

$$\sum_{s=1}^{s_1} Z_s = \bar{Z}_1, \quad \sum_{s=1}^{s_1} Z_s \ln I_s = \bar{Z}_1 \ln \bar{I}_1, \quad \text{пока } I_{s_1}/\bar{\Delta} \leq \alpha, \quad (7)$$

где $\alpha \sim 0,02 - 0,1$. Остальные потенциалы выбираются кратными \bar{I}_1 . При $s_0 = s_1$ получается модель одного гармонического осциллятора [2], которая в свою очередь с ростом l переходит в распределение Ландау [3].

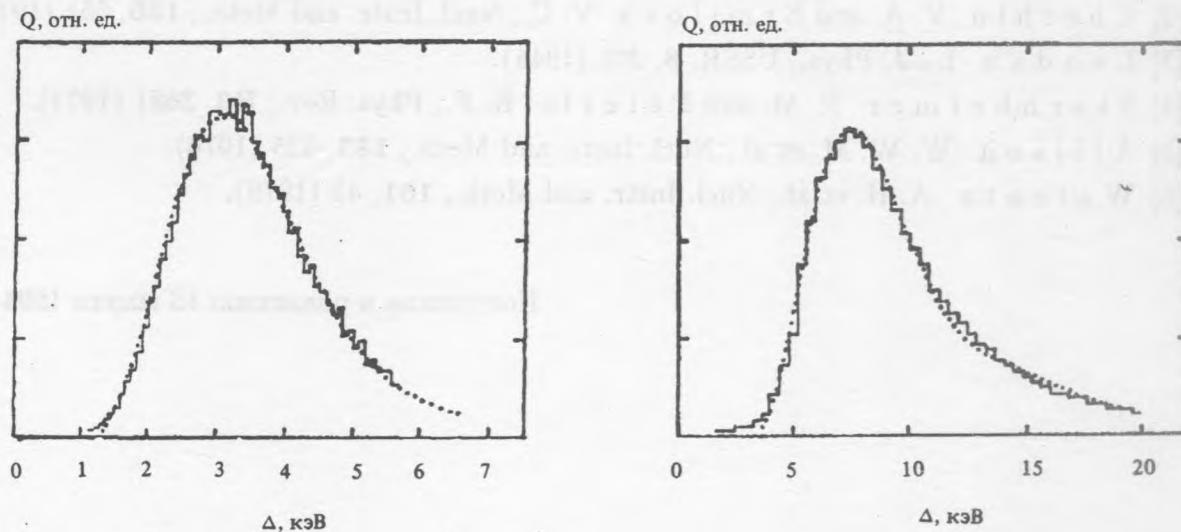


Рис. 1. Распределение ионизационных потерь энергии Q релятивистской ($\beta\gamma = 100$) частицы в слое газовой смеси $0,8 \text{ Ar} + 0,2 \text{ CO}_2$ толщиной $1,5 \text{ см}$ (1 атм , 0°C). Гистограмма - эксперимент [5], точки - расчет согласно (6) и (7), $\alpha = 0,02$.

Рис. 2. Распределение ионизационных потерь энергии Q протонов с импульсом 3 ГэВ/с в слое газовой смеси $87,5\% \text{ Xe} + 7,5\% \text{ CH}_4 + 5\% \text{ C}_3\text{H}_8$ толщиной $2,3 \text{ см}$ (1 атм , 20°C). Гистограмма - эксперимент [6], точки - расчет согласно (6) и (7) с $\alpha = 0,02$.

Рис. 1 и 2 иллюстрируют применение модели АГО согласно (6) и (7) с $\alpha = 0,02$ для описания известных экспериментальных данных [5, 6]. По сравнению с расчетом на основе рекуррентного соотношения для одного осциллятора с последующей дискретной сверткой распределений [1] скорость вычислений согласно (6) возрастает приблизительно в $s_0 \sim 5-10$ раз; примерно во столько же раз уменьшается объем требуемой памяти.

Рассмотренная схема расчета флуктуаций ионизационных потерь энергии релятивистской заряженной частицы в очень тонких ($\geq 0,5 \text{ см} \cdot \text{атм}$) слоях вещества может быть полезна для оптимизации характеристик трековых детекторов в современных ускорительных и астрофизических экспериментах. Заметим, что модифицированный вариант модели АГО на основе соотношения (6) был встроен в программный пакет GEANT (версия 3.16 от 15.12.93).

Авторы признательны С. И. Никольскому за поддержку настоящей работы.

ЛИТЕРАТУРА

- [1] Grishin V. M. et al., Nucl. Instr. and Meth., **A309**, 476 (1991).
- [2] Chechin V. A. and Ermilova V. C., Nucl. Instr. and Meth., **136**, 551 (1976).
- [3] Landau L., J. Phys., USSR, **8**, 201 (1944).
- [4] Sternheimer R. M. and Peierls R. F., Phys. Rev., **B3**, 3681 (1971).
- [5] Allison W. W. M. et al., Nucl. Instr. and Meth., **133**, 325 (1976).
- [6] Walenta A. H. et al., Nucl. Instr. and Meth., **161**, 45 (1979).

Поступила в редакцию 18 марта 1994 г.