Вестник
МОСКОВСКОГО УНИВЕРСИТЕТА
№ 3 — 1971

УДК 539.196.2

А. П. КАЛИНИН, В. Б. ЛЕОНАС, А. В. СЕРМЯГИН

О РАЗРЕЩАЮЩЕЙ СПОСОБНОСТИ ПРИ ИЗМЕРЕНИИ ПОЛНЫХ И ДИФФЕРЕНЦИАЛЬНЫХ СЕЧЕНИЙ РАССЕЯНИЯ С ПОМОЩЬЮ АТОМНЫХ ПУЧКОВ

В работе рассмотрен вопрос о разрешающей способности при измерениях сечений при использовании атомных и молекулярных пучков конечной геометрии. Проделаны расчеты и представлены результаты вычислений аппаратной функции $f(\theta)$, позволяющей удобно интерпретировать измерения полных и дифференциальных сечений рассеяния.

Изучение рассеяния пучков (атомов, молекул и ионов) на газовых мишенях занимает в атомной физике особое место, поскольку в большинстве случаев является единственным источником сведений о силах взаимодействия и процессах, сопровождающих столкновения частиц. При этом измеряется обычно либо ослабление пучка, прошедшего слой рассеивающего газа, либо угловое распределение рассеянных частиц.

При изучении упругих и неупругих столкновений в эв-диапазоне удобнее всего использовать пучки относительно высоких энергий 10^2—10^3 *эв*. Однако в этом случае углы отклонения оказываются порядка 10^2—10^{-3} радиана и меньше. В этих условиях улучшение углового разрешения детектора будет неизбежно связано с весьма большой потерей интенсивности регистрируемого пучка. Этот путь неудобен, однако выход можно найти, если удастся правильно учитывать вклады потоков частиц, рассеянных на любые углы в пределах детектора.

Угловое распределение рассеянных частиц описывается с помощью дифференциального сечения рассеяния $\sigma(\theta)$, определяемого из условия, что число частиц $I(\theta)$, рассеянных в пределах угла между θ и $\theta+d\theta$, равно $2\pi I_0\sigma(\theta)\sin\theta n dx d\theta$, где I_0 — число частиц нерассеянного пучка, n — плотность рассеивающего газа, dx — длина пути рассеяния; ослабление пучка, прошедшего слой рассеивающего газа, из-за ухода частиц на все углы, большие θ_0, определяется полным эффективным сечением

$$Q(\theta_0) = 2\pi \int\limits_{\theta_0}^{\pi/2} \sigma(\theta)\sin\theta d\theta \text{ и равно } \Delta I = I_0(1-e^{-nQ(\theta_0)dx}).$$

В реальных условиях вследствие конечных размеров пучка, неоднородности его плотности по сечению, расходимости, а также конечных размеров детектора и толщины рассеивающего слоя возникает проблема перехода от измеренных зависимостей к истинным сечениям. Анализ и способ учета погрешностей, возникающих при вычислении дифференциальных сечений из измеренных угловых распределений рассеянных частиц, проведен в работе [1]. Автор приводит приближенные формулы (для расчета среднего телесного угла, соответствующего данному положению детектора, и среднего угла, которому следует приписать рассчитанное сечение), использующие экспериментальное угловое распределение. Однако в этой работе не учитывается высота щели детектора, влияние которой при малых углах рассеяния существенно больше влияния ширины [2].

Другой подход при анализе измерений сечений рассеяния использован Амдуром и сотрудниками в работах [3] и [4]. Здесь с измеряемыми величинами сопоставляются сечения, усредненные по пути рассеяния и распределению интенсивности частиц в пучке. Такие расчеты для случая «круглой» геометрии описаны в работе [3], для «прямоугольной» — в работе [5]. Однако все вычисления ограничены наиболее простым случаем обратностепенного потенциала. Общим для всех упомянутых выше работ является нахождение среднего угла отклонения и среднего телесного угла, с помощью которых и интерпретировались эксперименты. Более адекватным представляется подход, дающий априорную эффективность регистрации рассеяния на различные углы. Эту эффективность удобно характеризовать введенной Кушем [6] функцией $\eta(\theta, l)$, определяющей вероятность того, что частица, рассеянная на расстоянии l от детектора на угол θ, будет зарегистрирована последним.

Функцию $\eta(\theta, l)$ можно определить как отношение числа частиц зарегистрированных детектором в случае, если все частицы пучка отклонились на угол θ, к числу частиц регистрируемых детектором до рассеяния.

Рассмотрим последовательно применения функции $\eta(\theta, l)$ для случаев измерения полного и дифференциального сечений рассеяния.

В работе [7] приводится выражение, позволяющее вычислить $\eta(\theta, l)$ для «прямоугольной» геометрии. В обозначениях этой работы (S_g — площадь детектора, $i(x, y)$ — распределение интенсивности нерассеянного пучка в плоскости детектора, ψ — азимутальный угол) $\eta(\theta, l)$ представляется следующим образом

$$\eta(\theta, l) = \frac{\int\limits_{\psi}\iint\limits_{S_д} i(x - l\theta\cos\psi,\ y - l\theta\sin\psi)\,dx\,dy\,d\psi}{\int\limits_{\psi}\iint\limits_{S_д} i(x, y)\,dx\,dy\,d\psi}. \qquad (1)$$

В случае «круглой» геометрии удобно пользоваться полярными координатами и тогда

$$\eta(\theta, l) = \frac{\int\limits_0^{2\pi}\int\limits_0^{r_д} i\left(\sqrt{r^2 + (l\theta)^2 - 2rl\cos\psi}\right) r\,dr\,d\psi}{\int\limits_0^{2\pi}\int\limits_0^{r_д} i(r)\, r\,dr\,d\psi}, \qquad (2)$$

где r_g — радиус детектора.

Диапазон углов, дающих вклад в величину $\eta(\theta, l)$, определяется размерами детектора и его положением относительно оси пучка. Если детектор находится на оси пучка, углы заключены в интервале от 0 до θ_{max}, когда частица еще может быть зарегистрирована. При измерении угловых распределений минимальный и максимальный углы рассеяния зависят от положения детектора α, а функцию удобнее обозначить $\eta_\alpha(\theta, l)$ в отличие от $\eta_0(\theta, l)$ для предыдущего случая.

Найдем связь измеренных ослабления и тока рассеянных частиц с начальной интенсивностью I_0 и функцией $\eta(\theta, l)$ [1]. Будем считать при этом плотность мишени постоянной и равной n, а интенсивность ослабленного в мишени пучка на рассеянии l от детектора равной $I_0 A(l)$. Из определения $\eta(\theta, l)$ ясно, что разность $1-\eta(\theta, l)$ соответствует вероятности ухода из детектора рассеянной частицы. Таким образом, число частиц, отклонившихся на угол θ с расстояния l при прохождении слоя рассеивающего газа dl и ушедших из детектора, равно

$$dI(\theta, l) = 2\pi I_0 n A(l)\sigma(\theta)\sin\theta\,[1-\eta(\theta, l)]\,d\theta\,dl. \tag{3}$$

Проинтегрировав $dI(\theta, l)$ по длине рассеяния $2\Delta l$ и углам от 0 до $\pi/2$ (в случае равных масс), получим величину измеренного детектором ослабления ΔI

$$\Delta I = 2\pi n I_0 \int\limits_0^{\pi/2} \sigma(\theta)\sin\theta\,d\theta \int\limits_{l_0+\Delta l}^{l_0-\Delta l} A(l)\,[1-\eta_0(\theta, l)]\,dl. \tag{4}$$

Ток, который зарегистрирует детектор, отклоненный от оси пучка на угол α, получается простой заменой $[1-\eta_0(\theta, l)]$ на соответствующую этому положению детектора функцию $\eta_\alpha(\theta, l)$:

$$I(\alpha) = 2\pi I_0 n \int\limits_0^{\pi/2} \sigma(\theta)\sin\theta\,d\theta \int\limits_{l_0+\Delta l}^{l_0-\Delta l} A(l)\,\eta_\alpha(\theta, l)\,dl, \tag{5}$$

где пределы интегрирования по θ могут быть оставлены прежними, так как вне углов, охватываемых детектором, $\eta(\theta, l)\equiv 0$.

Обозначим

$$f(\theta) = \frac{\int\limits_{l_0+\Delta l}^{l_0-\Delta l} A(l)\,\eta(\theta, l)\,dl}{\int\limits_{l_0+\Delta l}^{l_0-\Delta l} A(l)\,dl}. \tag{6}$$

Функция $f(\theta)$ определяется только геометрией установки и характеристиками пучка, поэтому может быть названа аппаратной функцией. С учетом (6) соотношения (4) и (5) можно переписать в виде

$$\Delta I = 2\pi n I_0 \int\limits_{l_0+\Delta l}^{l_0-\Delta l} A(l)\,dl \int\limits_0^{\pi/2} \sigma(\theta)\,[1-f_0(\theta)]\sin\theta\,d\theta, \tag{7}$$

$$I(\alpha) = 2\pi n I_0 \int\limits_{l_0+\Delta l}^{l_0-\Delta l} A(l)\,dl \int\limits_0^{\pi/2} \sigma(\theta)\,f_\alpha(\theta)\sin\theta\,d\theta. \tag{8}$$

При слабых поглощениях $\sim 10\%$ $A(l)$, тождественно равную единице при $l=l_0+\Delta l$ и равную k при $l=l_0-\Delta l$, можно считать линейной функцией l

---

[1] При площади изображения нерассеянного пучка в плоскости детектора, бо́льшей площади детектора, ηI_0 следует заменить на $\eta I_0/F$, где F определяется выражением (12).

$$A(l) = \frac{1-k}{2\Delta l} l + \frac{(1+k)\Delta l - (1-k) l_0}{2\Delta l},$$

тогда

$$\int\limits_{l_0+\Delta l}^{l_0-\Delta l} A(l) dl = (1+k)\Delta l. \tag{9}$$

Окончательно связь измеренного сечения и величин токов рассеянных частиц с аппаратной функцией и начальной интенсивностью принимает следующий вид:

$$Q_{\text{изм}} = \frac{\Delta I}{(1+k)\, nI_0 \Delta l} = 2\pi \int\limits_0^{\pi/2} \sigma(\theta)\,[1 - f_0(\theta)] \sin\theta d\theta, \tag{10}$$

$$I(\alpha) = 2\pi(1+k)\, nI_0 \Delta l \int\limits_0^{\pi/2} \sigma(\theta) f_\alpha(\theta) \sin\theta d\theta. \tag{11}$$

Соотношение (10) при известной $f(\theta)$ более удобно для решения обратной задачи извлечения параметров потенциала из измеренных зависимостей $\Delta I(E)$, чем использовавшийся в [3], [5] метод, и свободно от ограничения случаем обратностепенного потенциала.

Соотношение (11) позволяет по измеренным угловым распределениям непосредственно восстановить истинное дифференциальное сечение, не задаваясь априори его видом. С другой стороны, использование соотношений (10) и (11) открывает возможность экспериментальной проверки (путем сравнения измеренных и рассчитанных значений) теоретически вычисленных потенциалов любой сложной формы.

Функции $f_0(\theta)$ и f_α (θ) вычислялись на ЭВМ (БЭСМ-4) с помощью метода Монте-Карло для «круглой» и «прямоугольной» геометрии и различных соотношений полуширин детектора $b_\text{д}$ и пучка $b_\text{п}$, расстояний l_0 и Δl, для различных форм пучка (трапециедального, прямоугольного и треугольного), а также для различных поглощений k. При расчетах аппаратной функции $f_0(\theta)$ по формуле (6) статистическая ошибка не превышала 1% при малых углах ($\theta < 5 \cdot 10^{-3}$ *рад*) и 2—3% для больших углов ($\theta > 5 \cdot 10^{-3}$ *рад*). Пользуясь безразмерным параметром $\rho = \frac{l_0\theta}{2b_\text{д} F}$, введенным в [7], где

$$F = \frac{\int\limits_{l_0+\Delta l}^{l_0-\Delta l} \int\limits_0^{2\pi} \iint\limits_{S_\text{п}} i(x, y) A(l)\, dx dy d\psi dl}{\int\limits_{l_0+\Delta l}^{l_0-\Delta l} \int\limits_0^{2\pi} \iint\limits_{S_\text{д}} i(x, y) A(l)\, dx dy d\psi dl} \tag{12}$$

($S_\text{п}$ — площадь изображения нерассеянного пучка в плоскости детектора), можно для различных геометрических условий описать $f_0(\theta)$ универсальной зависимостью. Результаты вычислений приведены на рис. 1. Как видно из рис. 1, *а*, аппаратная функция хорошо описывается формулой $\exp\{-1{,}232\,\rho^2\}$ при $\rho < 0{,}9$ только для треугольного и близкого к нему трапециедального распределений интенсивности при ширине детектора, равной ширине изображения пучка в плоскости детектора. Вычисления показали также, что в пределах использованной для вычисления точности функция $f_0(\theta)$ не зависит от величины k до значения 0,7. Аппаратная функция $f_0(\theta)$ для «круглой» геометрии при $\rho<0{,}6$ хорошо описывается

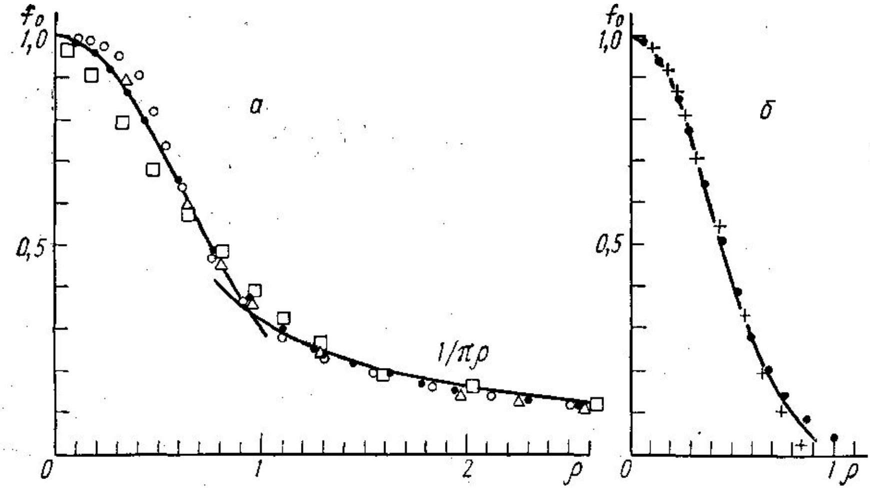

Рис. 1. *а* — аппаратная функция $f_0(\theta)$ для прямоугольной геометрии пучка и детектора: △ — треугольное распределение интенсивности и □ — прямоугольное распределение интенсивности при $b_д/b_п=1$, ● и ○ — трапециедальное распределение интенсивности при отношении оснований, равном 5 и $b_д/b_п$ равном 1 и 1,4 соответственно (высота пучка $h_п$ равна высоте детектора $h_д$, $h_п/b_п=40$ и $l_0/\Delta l=17$); *б* — аппаратная функция $f_0(\theta)$ для круглой геометрии пучка и детектора: ● — $r_д/r_п=1$, $l_0/\Delta l=17$, $l_0/r_д=800$, $r_д/r_п=1$, $l_0/\Delta l=2{,}2$, $l_0/r_д=55$ (трапециедальное распределение интенсивности при отношении оснований, равном 5)

формулой $\exp\{-3{,}66\rho^2\}$. Вид $f_\alpha(\theta)$ для «прямоугольной» геометрии при-

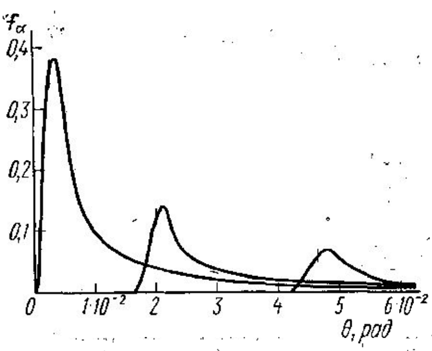

Рис. 2. Аппаратная функция $f_\alpha(\theta)$ для прямоугольной геометрии пучка и детектора при параметрах пучка, соответствующих пустым кружкам рис. 1, *а* (черточками обозначены положения детектора)

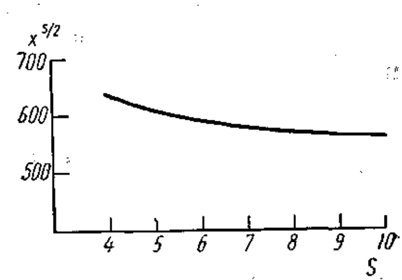

Рис. 3. Зависимость величины $X^{s/2}$ от s (формула (13)), параметры пучка и детектора соответствуют залитым кружкам (рис. 1, *а*)

веден на рис. 2. Функции вычислялись по формуле (6). Ошибка при вычислении $f_\alpha(\theta)$ не превосходила 1% для значений вблизи максимумов и увеличивалась до 7% в области, далекой от максимума. Ухудшение точности обусловлено ограничением потребного машинного времени, которое пропорционально точности и обратно пропорционально амплитуде $f_\alpha(\theta)$.

В отличие от случая соосного с пучком детектора не удается подобрать простой универсальной зависимости для $f_\alpha(\theta)$. Однако для практического применения $f_\alpha(\theta)$ была описана графически для 10 точек, отражающих изменение значений функции $f_\alpha(\theta)$.

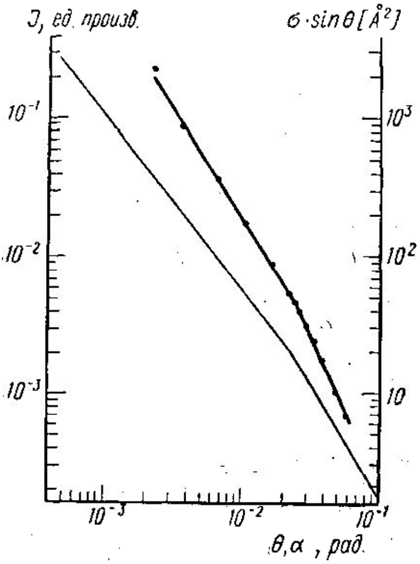

Рис. 4. Измеренные (сплошная линия) и вычисленные (точки) по формуле (11) угловые распределения рассеянных частиц (тонкой линией изображено восстановленное дифференциальное сечение $\sigma(\theta)\sin\theta$)

Для иллюстрации практического применения аппаратных функций $f_0(\theta)$ и $f_\alpha(\theta)$ рассмотрим последовательно способ определения параметров потенциала $V=K/r^s$ (*а*) и способ обработки измерений угловых распределений рассеянных частиц (*б*).

а. В случае потенциала вида $V=K/r^s$ зависимость $\lg Q_{изм}$ от $\lg E$ будет прямой линией с наклоном — 2/s [4]. Для нахождения второго параметра K разобьем интеграл (10) на две части от нуля до максимального в пределах детектора угла отклонения θ_{max} ($\theta_{max}\sim 10^{-1}$) и от θ_{max} до $\pi/2$. Тогда получим для K выражение

$$K = \frac{E}{c(s)}\left[\frac{Q_{изм}(E)}{2\pi X}\right]^{s/2},$$

где

$$X = \left\{\frac{1}{s}\int\limits_0^{Q_{max}} \theta^{-1-2/s}\left[1 - f_0(\theta)\right]d\theta + \frac{1}{2}\,\theta_{max}^{-2/s}\right\}$$

и

$$c(s) = \sqrt{\pi}\,\frac{\Gamma\left(\frac{s+1}{2}\right)}{\Gamma\left(\frac{s}{2}\right)}.$$

Величина X, необходимая для определения K, была вычислена как функция s для случая «прямоугольной» геометрии (см. рис. 3). Как видно из рисунка, $X^{s/2}$ слабо зависит от s и поэтому K определяется достаточно хорошо даже при некотором изменении s в исследуемом интервале расстояний сближения.

б. При обработке измерений угловых распределений рассеянных частиц с использованием $f_\alpha(\theta)$ необходимо подобрать тем или иным способом $\sigma(\theta)$, обеспечивающую воспроизведение измеренной зависимости $I(\alpha)$. Измеренный ток $I(\alpha)$ связан с $\sigma(\theta)$ выражением (11) и может вычисляться с пробными функциями $\sigma_{пр}(\theta)$ с точностью, которая обусловлена только разбросом экспериментальных значений. Восстановленное таким образом дифференциальное сечение для системы N_2—N_2 приведено на рис. 4, там же для сравнения приведены экспериментальная и рассчитанная по восстановленному сечению зависимость $I(\alpha)$.

Авторы выражают глубокую благодарность Ю. Г. Маламе и Б. В. Куксенко за помощь в составлении расчетных программ.

ЛИТЕРАТУРА

1. Филлипенко Л. Г. ЖТФ, 30, 57, 1960.
2. Lorents D. C., Aberth W. Phys. Rev., 139, 1017, 1965.
3. Amdur I., Harkness A. L. J. Chem. Phys., 22, 664, 1954.
4. Сб. «Исследования с молекулярными пучками». М., «Мир», 1969.
5. Камнев А. Б. «Вестн. Моск. ун-та», физ., астрон., № 3, 1966.
6. Kusch P. J. Chem. Phys., 40, 1, 1964.
7. Busch F. Phys., 193, 412, 1966.
8. Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М. Механика. М., Изд-во АН СССР, 1963.

Поступила в редакцию
10.4 1970 г.

Кафедра
молекулярной физики