

Физико-технический институт им. А.Ф.Иоффе

На правах рукописи

Бакалейников Леонид Александрович

**ПЕРЕНОС ЭЛЕКТРОНОВ СРЕДНИХ ЭНЕРГИЙ В ВЕЩЕСТВЕ И
СВОЙСТВА НЕЛИНЕЙНОГО ИНТЕГРАЛА СТОЛКНОВЕНИЙ
УРАВНЕНИЯ БОЛЬЦМАНА**

Специальность 01.04.04 – физическая электроника

ДИССЕРТАЦИЯ
на соискание ученой степени
доктора физико-математических наук

Научный консультант-
доктор физико-математических
наук, профессор Эндер А.Я.

Санкт-Петербург

2013

Содержание

Введение	5
Глава 1. Асимптотическое исследование линейного кинетического уравнения для электронов	
1.1 Анализ дифференциального сечения рассеяния электронов средних энергий и характерных длин процесса релаксации	31
1.2 Исследование собственных чисел упругой части интеграла столкновений	42
1.3 Асимптотическое преобразование неупругой части интеграла столкновений	47
1.4 Асимптотическое расщепление кинетического уравнения для электронов средних энергий в тяжелых мишенях	53
Глава 2. Пограничные слои в задачах кинетики электронов средних энергий	
2.1 Координатная асимптотика пограничного слоя эффективной изотропизации	62
2.2 Сращивание решений в пограничном слое эффективной изотропизации и в области диффузии	67
2.3 Пограничные слои в задаче релаксации узкого по углам и энергиям пучка электронов в полубесконечной тяжелой мишени.	73
Глава 3. Аналитическое решение некоторых задач кинетики электронов в диффузионном приближении	
3.1 Аналитическое решение кинетического уравнения в области диффузии в задаче о взаимодействии электронного пучка с мишенью	85
3.2 Расчет функции выхода электронов из полубесконечной однородной мишени в диффузионном приближении	92
3.3 Расчет функции выхода электронов из образцов типа «слой на подложке» в диффузионном приближении	98
Глава 4. Моментный метод решения уравнения Больцмана и ядра интеграла столкновений	
4.1 Основные соотношения моментного метода	103
4.2 Ядра интеграла столкновений	110
Глава 5. Асимптотика матричных элементов и построение линейных ядер для некоторых моделей взаимодействия частиц	
5.1 Асимптотические свойства МЭ	119
5.2 Построение ядра линейного интеграла столкновений в изотропном случае для псевдомаксвелловских молекул	139

5.3 Построение ядра линейного интеграла столкновений для твердых шаров	151
Глава 6. Общие свойства ядер нелинейного интеграла столкновений уравнения Больцмана и их построение	
6.1 Некоторые общие свойства ядер нелинейного интеграла столкновений	166
6.2 Общие свойства ядер интеграла прямых столкновений и их построение	174
6.3 Связи между ядрами нелинейного интеграла столкновений	184
6.4 Рекуррентная процедура	190
Глава 7. Расчет ядер интеграла столкновений для некоторых моделей взаимодействия и решение задач релаксации	
7.1 Ядра $G_{0,0}^{+0}(c, c_1, c_2)$ для псевдомаксвелловских молекул и твердых шаров	200
7.2 Расчет ядер нелинейного интеграла обратных столкновений	207
7.3 Численный расчет ядра $G_{0,0}^{+0}(c, c_1, c_2)$	215
7.4 Решение задач однородной нелинейной релаксации	229
7.5 Расчет ядер интеграла столкновений для электронов средних энергий и решение задачи угловой релаксации в пограничном слое эффективной изотропизации	238
Глава 8. Численное моделирование транспорта электронов по методу Монте-Карло	
8.1 Дифференциальное сечение упругого рассеяния	250
8.2 Дифференциальное сечение неупругого взаимодействия электронов с веществом	255
8.3 Метод Монте-Карло	273
8.4 Сравнение с известными результатами	283
Глава 9. Приложение разработанных методов к решению прикладных задач, связанных с транспортом электронов средних энергий	
9.1 Расчет функции выхода электронов средних энергий из однородных образцов и образцов типа «слой на подложке»	290
9.2 Расчет теплового воздействия электронного зонда на образец	306
9.3 Ограничения на пространственное разрешение в комбинированной технике рентгено-электронного изображения	318
9.4 Метод Монте-Карло в задачах рентгеноспектрального микроанализа	330

Заключение	346
Приложения	352
Список литературы	361
Список основных публикаций по теме диссертации	376

Введение

Актуальность проблемы. Многие современные прикладные и технические проблемы приводят к необходимости исследования процессов взаимодействия потоков частиц с веществом. Такая необходимость возникает, например, при рассмотрении процессов обработки поверхностей, в полупроводниковой технологии, при использовании пучков для модификации физических свойств материалов. Особое значение для разработки новых материалов и технологий имеет использование пучков частиц для решения задач диагностики. Стремление к созданию структур со сверхмалыми размерами активных областей приводит к необходимости разработки диагностических методов, позволяющих определять параметры исследуемых объектов с высоким разрешением.

Для широкого класса современных диагностических методов ключевой проблемой является проблема транспорта электронов средних энергий. Теоретической основой для описания транспорта электронов служит кинетическое уравнение, решение которого представляет собой сложную математическую задачу. В связи с этим были предложены различные приближенные формы кинетического уравнения, позволяющие выявить отдельные черты процесса переноса. Наличие большого количества таких приближений и отсутствие четких критериев их пригодности при рассмотрении транспорта электронов средних энергий ставит вопрос об определении областей применимости и классификации приближенных форм кинетического уравнения. Такая классификация оказывается возможной при выявлении малых параметров задачи и использовании методов теории возмущений. Более того, асимптотический подход позволяет выявить структуру решения, провести его полный качественный анализ и найти приближенное решение.

Развитие технологии непрерывно повышает требования к точности количественных оценок эффектов, происходящих при взаимодействии электронов с веществом. Это приводит к тому, что качественных закономерностей процесса переноса, даваемых приближенными моделями, оказывается недостаточно для отыскания распределения электронов с необходимой точностью. Поэтому наряду с развитием асимптотического подхода к исследованию кинетического уравнения для электронов оказалась необходимой разработка численных методов его решения. Разработка численных методов решения уравнения Больцмана при сильном отклонении ФР от равновесия является общей проблемой и в кинетической теории газов. При изучении, например, кинетических режимов в пристеночных областях, где ФР оказывается сильно неравновесной, метод описания процессов переноса, основанный на решении линеаризованного уравнения Больцмана – метод Чепмена-Энскога - плодотворно развивавшийся более полувека, оказывается

неприменимым, и возникает необходимость в решении нелинейного кинетического уравнения. Серьезные трудности возникают и при применении численных методов, широко используемых для решения задач кинетической теории газов, к расчету функции распределения в области больших скоростей. В то же время информация о поведении ФР в этой области оказывается определяющей при изучении химических реакций, процессов возбуждения, ионизации и других неупругих процессов. В связи с этим изучение структуры интеграла столкновений и развитие новых подходов к решению нелинейного уравнения Больцмана представляется важной и актуальной задачей.

Стремление к реалистической постановке задачи и к более точному учету особенностей процесса переноса электронов в веществе и регистрации сигнала заставляет использовать для решения кинетического уравнения метод прямого численного моделирования – метод Монте Карло. Создание удобного инструмента расчета электронного распределения на основе этого метода имеет большое практическое значение.

Таким образом, разработка асимптотического и численного методов в задачах транспорта электронов средних энергий и развитие методов решения кинетического уравнения при сильном отклонении функции распределения от равновесия представляет как фундаментальный научный, так и практический интерес, что и обеспечивает актуальность выбранной темы диссертации.

Целью работы является разработка асимптотического и численного методов решения кинетического уравнения для электронов средних энергий и развитие метода разложения по сферическим гармоникам при сильном отклонении функции распределения от равновесия.

Заметим, что реализация асимптотического подхода к решению кинетического уравнения для электронов средних энергий требует выделения малых параметров в задаче. Эти параметры могут быть найдены при анализе дифференциальных сечений рассеяния и характерных длин различных процессов.

Развитие метода разложения по сферическим гармоникам требует глубокого исследования структуры и свойств нелинейного интеграла столкновений. Как известно, интеграл столкновений может быть представлен в виде интеграла от ядра, $G(\vec{v}, \vec{v}_1, \vec{v}_2)$, зависящего от трех векторных скоростей $\vec{v}$, $\vec{v}_1$, $\vec{v}_2$, умноженного на произведение функций распределения от $\vec{v}_1$ и $\vec{v}_2$. Именно расчет этого шестикратного интеграла представляет наибольшую сложность при решении уравнения Больцмана. Разложение ФР по сферическим гармоникам приводит к замене интеграла столкновений набором интегральных операторов,

ядра которых $G_{l_1 l_2}^l(v, v_1, v_2)$ зависят лишь от модулей скоростей v, v_1, v_2 и целочисленных индексов l, l_1, l_2 .

Разработка метода прямого моделирования транспорта электронов по методу Монте-Карло требует вычисления дифференциальных сечений упругого и неупругого рассеяния и реализации алгоритма расчета распределения электронов.

Сформулируем теперь конкретные задачи, которые необходимо было решить в работе.

1. Выполнить анализ дифференциального сечения рассеяния электронов средних энергий, сравнить характерные длины различных процессов, происходящих при распространении электронов в веществе и выделить малые параметры задачи;
2. Провести асимптотическое разложение упругой и неупругой частей интеграла столкновений по выделенным в дифференциальных сечениях рассеяния параметрам малости;
3. Выявить структуру решения кинетического уравнения для электронов (типы и расположение пограничных слоев) на основе выделения разномасштабных процессов и применения методов сингулярной теории возмущений;
4. Разработать алгоритм построения асимптотических разложений для полученной цепочки задач;
5. Выявить связи между матричными элементами (МЭ) в стандартном моментном методе и ядрами интеграла столкновений $G_{l_1 l_2}^l(v, v_1, v_2)$, возникающими при использовании разложения по сферическим гармоникам, и провести исследование асимптотики МЭ при больших индексах;
6. Разработать процедуру построения линейных ядер интеграла столкновений на основе линейных МЭ для различных потенциалов взаимодействия;
7. Исследовать общие свойства ядер интегралов прямых и обратных столкновений;
8. Найти связи между ядрами и разработать рекуррентную процедуру их отыскания на основе использования свойства инвариантности интеграла столкновений относительно выбора скорости системы отсчета;
9. Применить разработанную процедуру для построения ядер в аналитической форме для некоторых сечений взаимодействия и использовать их для решения модельных задач нелинейной релаксации;
10. Рассчитать ядра и использовать их для решения задач линейной кинетики электронов;

11. Разработать и реализовать алгоритмы расчета дифференциальных сечений рассеяния и численного моделирования кинетики электронов средних энергий по методу Монте-Карло;
12. Применить разработанные методы расчета распределения электронов к решению некоторых прямых и обратных диагностических задач.

Научная новизна полученных результатов.

1. Разработан метод решения кинетического уравнения для электронов средних энергий, основанный на использовании схемы асимптотического расщепления многомасштабных задач.
2. Впервые получена аналитическая структура решения кинетического уравнения для электронов средних энергий в мишенях с большими атомными номерами, облучаемых электронным зондом. Для получения этой структуры выявлены малые параметры задачи и использованы методы асимптотического анализа.
3. Проведено обобщение способа асимптотического разложения интегралов с δ -образным ядром, убывающим степенным образом, на случай зависимости ядра от медленной переменной. Полученный результат использован для выполнения корректного разложения неупругой части интеграла столкновений.
4. Впервые найдена асимптотика линейных и нелинейных матричных элементов (МЭ) интеграла столкновений, возникающих при применении моментного метода к решению нелинейного уравнения Больцмана.
5. Впервые предложен способ построения ядер линейного интеграла столкновений, возникающих при разложении функции распределения по сферическим гармоникам, основанный на прямом суммировании произведений МЭ на полиномы Сонина и отыскании асимптотики остатка ряда. Разработанный метод асимптотической оценки остатка ряда позволяет рассчитывать ядро с высокой точностью при использовании лишь нескольких десятков членов ряда.
6. Впервые на основе инвариантности интеграла столкновений относительно скорости системы отсчета найдены связи между ядрами нелинейного интеграла столкновений. С помощью этих соотношений построены рекуррентные соотношения для последовательного определения ядер.
7. Впервые найдены явные аналитические выражения для нескольких первых ядер нелинейного интеграла столкновений для газа из твердых шаров и псевдомаксвелловских молекул.

8. Впервые показано, что использование найденных ядер в задачах однородной нелинейной изотропной релаксации приводит к корректным результатам и в случае нарушения условия сходимости разложения ФР в стандартном моментном методе.

Научные положения, выносимые на защиту:

1. Путем применения общей схемы асимптотического расщепления для многомасштабной задачи переноса электронов с энергиями порядка нескольких десятков кэВ в твердом теле получены уравнения сокращенного описания кинетики электронов как в основной области, так и в пограничных слоях.

2. Для уравнений меньшей размерности получены граничные условия с помощью сращивания решений в пограничном слое эффективной изотропизации и в области диффузии. Показано, что эти условия являются условиями первого рода, и их явный вид следует из координатной асимптотики решения в пограничном слое эффективной изотропизации.

3. Найдена структура решения задачи о взаимодействии пучка электронов с тяжелой мишенью на основе выделения разномасштабных процессов. С помощью асимптотического расщепления кинетического уравнения определена область применимости различных приближенных форм кинетического уравнения для электронов средних энергий в различных пограничных слоях и построена процедура сращивания асимптотических разложений.

4. Проведен анализ нелинейного интеграла столкновений уравнения Больцмана и ядер $G_{l_1, l_2}^l(c, c_1, c_2)$, возникающих при разложении по сферическим гармоникам. Показано, что интеграл прямых столкновений выражается через линейный оператор, а его ядра вычисляются с помощью одной квадратуры. Ядра нелинейного интеграла столкновений, $G_{l_1, l_2}^l(c, c_1, c_2)$, в случае степенных потенциалов обладают свойством подобия.

5. Из условия инвариантности интеграла столкновений относительно выбора скорости системы отчета найдены связи между ядрами нелинейного интеграла столкновений, которые представляют собой дифференциальные соотношения. На основе этих связей разработана рекуррентная процедура отыскания ядер $G_{l_1, l_2}^l(c, c_1, c_2)$ по известному ядру $G_{0,0}^0(c, c_1, c_2)$.

6. Получены аналитические выражения для ядер нелинейного интеграла обратных столкновений $G_{l_1, l_2}^{l+}(c, c_1, c_2)$ с суммой индексов $l + l_1 + l_2 \leq 4$ для твердых шаров и псевдомаксвелловских молекул.

7. С помощью полученных ядер найдено решение нелинейных однородных релаксационных задач. Показано, что разработанный метод с высокой точностью описывают эволюцию ФР в

области до 10 тепловых скоростей как в ситуациях, когда стандартный моментный метод может быть использован, так и в ситуациях, когда он неприменим.

8. Разработан метод решения граничных кинетических задач для электронов средних энергий на основе использования ядер интеграла столкновений и модифицированного метода дискретных ординат.

9. Разработаны базы данных по сечениям взаимодействия электронов с веществом и программные пакеты по методу Монте-Карло, которые являются гибким инструментом исследования электронного распределения в твердом теле. Использование этих пакетов приводит к адекватному описанию основных характеристик переноса электронов в области энергий 100эВ – 30 кэВ.

Научная и практическая значимость

Основная научная ценность работы заключается в том, что в ней:

1. Для электронов средних энергий, распространяющихся в веществе, получено асимптотическое разложение неупругой части интеграла столкновений и исследован спектр упругой части для оценки применимости дифференциальных приближений.
2. Для электронов средних энергий в однородных тяжелых мишенях разработан алгоритм построения асимптотического разложения решения кинетического уравнения.
3. Установлены области применимости различных приближенных форм кинетического уравнения, используемых для отыскания распределения электронов, и найдены связи между этими моделями.
4. Выявлена структура решения задачи о релаксации пучка электронов средних энергий в полубесконечных тяжелых мишенях.
5. Получены связи между ядрами интеграла столкновений $G_{l,l_2}^l(v, v_1, v_2)$, возникающими при использовании метода разложения по сферическим гармоникам. Эти связи являются следствием инвариантности нелинейного интеграла столкновений по отношению к выбору скорости системы отсчета и представляют собой дифференциальные соотношения.
6. Разработана рекуррентная процедура последовательного отыскания ядер $G_{l,l_2}^l(v, v_1, v_2)$ на основе найденных связей.
7. Показано, что полученные ядра позволяют решать задачу нелинейной релаксации в случае сильного отклонения ФР от равновесия даже в том случае, когда нарушается условие сходимости разложения ФР в стандартном моментном методе.

Практическая значимость полученных результатов заключается в

1. Применении для решения задач кинетики электронов средних энергий предложенной в работе общей схемы, объединяющей различные модели кинетического уравнения и позволяющей переходить от одной из них к другой при изменении рассматриваемых масштабов длин, углов и энергий.
2. Широком использовании созданной базы данных по дифференциальным сечениям упругого и неупругого рассеяния электронов в веществе для решения разнообразных задач в области кинетики электронов средних энергий.
3. Применении разработанных численных методов моделирования кинетики электронов и созданных на их основе программных пакетов для исследования характеристик распределения электронов с энергиями 100эВ – 30 кэВ в веществе.
4. Использовании метода диагностики тонких нанометровых слоев в однородных образцах с помощью рентгеноспектрального микроанализа, разработанного на основе моделирования источников рентгеновского излучения.
5. Возможности использования для расчета интеграла столкновений ядер нелинейного интеграла столкновений, что открывает перспективу для решения задач нелинейной кинетики при сильном отклонении ФР от равновесия.

Апробация работы

Результаты работы неоднократно докладывались на семинарах лаборатории прикладной математики и математической физики и лаборатории физической газодинамики ФТИ им. А.Ф.Иоффе РАН (С.-Петербург), на семинарах факультета конструирования материалов (Технион, Хайфа, Израиль), а также представлялись на отечественных и международных конференциях: XI CANAS Conference on analytical atomic spectroscopy (Moscow, USSR, July 29 – August 4, 1990), “Scanning” (Charlton, South Karolina, USA, May 17 – May 20, 1994; Monterey, Kalifornia, USA, April 10 – April 13, 1996), The 35-th Annual Meeting of the Israel Society for Microscopy (Israel, Haifa, May 15, 2001), 8-th European Workshop on Modern Developments and Applications in Microbeam Analysis EMAS-2003 (Spain, May 18 – May 22, 2003), 10-th European Workshop on Modern Developments and Applications in Microbeam Analysis EMAS-2007 (Antwerp, Belgium, May 6 – May 10, 2007), XV Российский симпозиум по растровой электронной микроскопии и аналитическим методам исследования твердых тел РЭМ-2007 (Черноголовка, 4 июня -7 июня, 2007), Всероссийский семинар по аэрогидродинамике (СПб, 5 февраля -7 февраля, 2008), VI Всероссийская конференция по рентгеноспектральному анализу (Краснодар, 5 октября -10 октября, 2008), V Поляховские чтения (СПб, 3 февраля -6 февраля, 2009), Струйные, отрывные и нестационарные течения (XXII Юбилейный семинар с международным участием, СПб, 22 июня - 25 июня, 2010), 2-й

Симпозиум "Полупроводниковые лазеры: физика и технология" (СПб, 10 ноября -12 ноября 2010), 4-ый международный семинар «Вопросы математической физики и прикладной математики» (СПб, 29 сентября, 2010), 5-ый Международный семинар «Вопросы математической физики и прикладной математики», посвященный 100-летию со дня рождения профессора Н.Н.Лебедева (СПб, 15 июня, 2011).

Публикации

Основное содержание диссертации опубликовано в 37 работах, из них 32 статьи в рецензируемых научных журналах, рекомендованных в действующем перечне ВАК РФ и 1 авторское свидетельство. Список приведен в конце диссертации.

Личный вклад автора

Содержание диссертации отражает персональный вклад автора в опубликованные работы. Вклад автора в выбор направлений исследований, постановку задач и полученные в работе результаты был определяющим.

Структура и объем диссертации.

Диссертация состоит из введения, 9 глав, списка литературы из 238 наименований и изложена на 379 страницах машинописного текста включая 82 рисунков и 29 таблиц.

Для широкого класса современных диагностических методов ключевой проблемой является проблема транспорта электронов средних энергий. Теоретической основой для описания транспорта электронов служит линейное кинетическое уравнение, решение которого представляет собой сложную математическую задачу. Линейные кинетические уравнения составляют отдельный класс уравнений математической физики, давно привлекающий интерес исследователей. Развитие функционального анализа, теории обобщенных функций и теории обобщенных решений краевых задач позволило провести математическое исследование свойств решений задач линейной теории переноса. В работах В.С.Владимирова [1, 2], Т.А.Гермогеновой [3, 4], Д.Дэвиса, С.Каплана [5, 6], А.Баслика [7], С.Б.Шихова [8, 9] были исследованы такие вопросы, как существование и единственность решения, его гладкость, непрерывная зависимость от коэффициентов уравнения и источникового члена, а также рассмотрены приложения вариационных принципов к задачам переноса и спектральные свойства операторов уравнения переноса.

Для понимания основных закономерностей процесса переноса большое значение имеют явные аналитические решения линейного кинетического уравнения. В связи со сложностью кинетического уравнения для их получения используются различные приближения и допущения. Большое количество работ посвящено исследованию и решению односкоростных задач. Основополагающей здесь явилась работа К.Кейза [10], в которой были найдены собственные функции односкоростного кинетического уравнения в плоской геометрии с изотропным рассеянием и доказана их полнота и ортогональность. Доказанная в [10] теорема о полноте и ортогональности с некоторым весом найденной системы собственных функций на половинном промежутке расширила класс задач теории переноса, для которого оказалось возможным записать решение в аналитической форме. Обобщение результатов этой работы на случай анизотропного рассеяния проведено в [11, 12, 13, 14]. Собственные функции задач теории переноса для пространственной геометрии получены В.И.Лебедевым в [15, 16] и Е.Берейсом в [17]. Несмотря на большую общность, реализация метода разложения по собственным функциям оказывается достаточно трудоемкой при применении его к реальным задачам кинетики частиц. Другой путь получения приближенных решений односкоростных задач в теории переноса заряженных частиц основан на упрощении уравнения за счет учета особенностей процесса их рассеяния на атоме. Поскольку при взаимодействии с атомом быстрые заряженные частицы рассеиваются преимущественно вперед, интеграл столкновений может быть заменен своим дифференциальным приближением, что позволяет перейти от интегро-дифференциального кинетического уравнения к дифференциальному (приближение Фоккера-Планка) (см., например, [18]).

Для получения аналитического решения кинетического уравнения часто используют малоугловое приближение, предполагая, что среднеквадратичный угол рассеяния заряженных частиц мал на всей глубине их проникновения в вещество. Решение односкоростных задач в приближении малых углов для широких пучков получено в работах А.С.Компанейца [19, 20] и Г.Мольер [21]. В монографии [22] приведено решение задачи о прохождении узкого пучка быстрых заряженных частиц через плоский рассеиватель в малоугловом приближении.

Для изучения основных особенностей процесса переноса в многоскоростных задачах применяют приближение «прямо-вперед», в котором не учитывается угловое перераспределение при рассеянии частиц. Так же, как и в случае односкоростных задач, для быстрых заряженных частиц возможна замена интеграла столкновений дифференциальным приближением вследствие преимущественно малых потерь энергии при рассеянии. Такое

преобразование приводит к приближению непрерывного замедления, в котором интеграл столкновений выражается через производную по энергии [23]. Уравнение переноса в этом случае является дифференциальным уравнением в частных производных первого порядка, решение которого может быть легко получено (см., например [22]). Использование приближения непрерывного замедления приводит к однозначной связи между пробегом и энергией частицы. Для учета влияния флуктуаций энергии, теряемой частицей в каждом столкновении, на энергетический спектр частиц необходимо сохранить в разложении интеграла столкновений при переходе к дифференциальному приближению по крайней мере два члена. Получающееся уравнение совпадает по форме с уравнением для одномерной диффузии, аналитическое решение которого приведено в [24]. В работе Л.Д.Ландау [25] получен энергетический спектр быстрых частиц без использования дифференциального приближения интеграла столкновений. Впоследствии решение этой задачи было несколько уточнено и обобщено в работах [26, 27].

Получены также аналитические результаты при исследовании некоторых задач, учитывающих угловое и энергетическое перераспределение частиц. Так, в работе Д.А.Шулая [28] получены собственные функции кинетического уравнения и доказаны теоремы полноты для целого и половинного отрезков, аналогичные теоремам Кейза для односкоростного случая. В [22] получено решение уравнения переноса в малоугловом приближении с использованием дифференциальных форм упругой и неупругой части интеграла столкновений. В работе [29] И.Я.Померанчуком сделана попытка учесть флуктуации пробегов тяжелых заряженных частиц, вызванных многократным упругим рассеянием. На основе решения в малоугловом приближении им был вычислен средний путь, проходимый частицей в слое вещества заданной толщины. Однако результаты, полученные в [29], не позволяют вычислить энергетический спектр частиц на фиксированной глубине, интегральный поток и т.д. Последовательный метод нахождения решения уравнения переноса для быстрых заряженных частиц в приближении непрерывного замедления, позволяющий в рамках малоуглового приближения учесть влияние многократного упругого рассеяния на энергетический спектр частиц, приведен в [30, 22].

Перечисленные выше модели были получены на основании интуитивных соображений, однако имеются работы, в которых упрощенные формы кинетического уравнения получаются на основании асимптотического преобразования интеграла столкновений. Зависимость дифференциального сечения рассеяния электронов средних энергий от угла и потери энергии, как будет показано в главе 1, является пикообразной, и интеграл столкновений может быть представлен в виде асимптотического разложения по параметрам малости, характеризующим ширину пика. Так, переход от полного

односкоростного кинетического уравнения к дифференциальному приближению был выполнен в работе Н.А.Гунько и Э.А.Троппа [31] путем разложения упругой части интеграла столкновений. Попытка корректного получения модели непрерывного замедления преобразованием неупругой части интеграла столкновений была предпринята В.А.Кузюком и А.Х.Рахматулиной [32]. Отметим, что степенное убывание дифференциальных сечений упругого и неупругого рассеяния электрона на атоме при удалении от пика приводит к появлению в разложении интеграла столкновений дополнительных интегральных членов, отличающихся от традиционных дифференциальных операторов множителями порядка логарифма от малого параметра. Эти члены описывают рассеяние с немалыми изменениями угла или энергии.

Как будет показано в главе 1, кинетическое уравнение для электронов средних энергий в веществе является многомасштабной задачей. Это позволяет использовать для его исследования метод сингулярных возмущений. В задачах кинетической теории газов методы сингулярной теории возмущений используются давно. Основой их использования является наличие разномасштабных характерных длин процесса релаксации. Первым примером применения теории возмущений для решения кинетических задач является разложение Гильберта [33, 34], позволившее вывести уравнения гидродинамики идеальной жидкости из уравнения Больцмана. Рассмотрение пограничных и начальных слоев, необходимых для получения равномерно пригодных асимптотических разложений, проводилось Г.Грэдом [35, 36], К.Черчиньяни [37], Я.Соуном [38].

Приведенный выше обзор показывает, что решение даже линейного кинетического уравнения связано с весьма значительными трудностями. В случае рассмотрения задачи о взаимодействии электронов средних энергий с веществом могут быть использованы некоторые упрощенные модели кинетического уравнения. Наличие большого количества таких моделей при отсутствии четких критериев их пригодности ставит вопрос о классификации этих моделей и определении областей их применимости. В силу того, что задача кинетики электронов средних энергий является многомасштабной, такая классификация оказывается возможной при выявлении малых параметров задачи и использовании методов теории возмущений. Более того, асимптотический подход позволяет выявить структуру решения, провести его полный качественный анализ и найти приближенное решение.

Развитие технологии непрерывно повышает требования к точности количественных оценок эффектов, происходящих при взаимодействии электронов с веществом. Это приводит к тому, что качественных закономерностей процесса переноса, даваемых приближенными моделями, оказывается недостаточно для отыскания распределения электронов с

необходимой точностью. Поэтому наряду с развитием асимптотического подхода к исследованию кинетического уравнения для электронов оказалась необходимой разработка численных методов его решения. Разработка численных методов решения уравнения Больцмана при сильном отклонении ФР от равновесия является общей проблемой и в кинетической теории газов.

Начало современной кинетической теории было заложено Больцманом, который сформулировал свое знаменитое интегро-дифференциальное уравнение для функции распределения частиц газа по скоростям и пространству. При этом им был получен интеграл столкновений, описывающий изменение функции распределения за счет взаимодействия между частицами. Интеграл столкновений представляет собой шестикратный интеграл, квадратичный относительно функции распределения. Его можно рассматривать как нелинейный оператор, действующий на скоростные аргументы ФР.

В силу нелинейного характера столкновительного члена решение и анализ уравнения Больцмана связаны со значительными трудностями. Эффективные методы его решения, как и в линейном случае, основаны на теории возмущений. Первый значительный шаг в применении теории возмущения для решения уравнения Больцмана, как уже отмечалось, был сделан Гильбертом. Анализ в его работах [34, 39] основан на предположении о малости числа Кнудсена. Уравнение Больцмана при этом оказывается сингулярно возмущенным. Отыскание решения в виде ряда по малому параметру сводит задачу к решению бесконечной последовательности линейных интегральных уравнений Фредгольма второго рода. Условия разрешимости задачи на каждом шаге определяют параметры решения, оставшиеся неизвестными на предыдущем шаге. Для модели твердых шаров Гильбертом был подробно рассмотрен линейный столкновительный оператор, который, как оказалось, обладает свойством ортогональной инвариантности. Исследования столкновительного оператора были продолжены в работах Гекке [40, 41]. Он доказал, что собственными функциями ортогонально-инвариантного интегрального оператора являются сферические гармоники. Им было построено разложение по сферическим гармоникам ядра Гильберта для модели твердых шаров и получены формулы для коэффициентов этого разложения.

В случае небольших отклонений от равновесия Чепменом и Энскогом в 1916-1917 годах был разработан метод решения линеаризованного уравнения Больцмана. Этот метод развивался в течение полувека и оказался очень плодотворным при расчетах коэффициентов переноса. Коэффициенты переноса при использовании метода Чепмена – Энскога выражаются через интегральные скобки, которые представляют собой линейные матричные элементы от интеграла столкновений.

Следующий значительный шаг в изучении нелинейного столкновительного члена был сделан Барнетом. В работе [42] он предложил использовать моментный метод для отыскания ФР. В моментном методе ФР представляется в виде отрезка ряда по ортогональным полиномам, и для коэффициентов разложения составляется система дифференциальных уравнений. Барнетом впервые была выписана система нелинейных моментных уравнений с базисными функциями в виде произведения полиномов Сонина и сферических гармоник. В этом базисе были рассмотрены нелинейные матричные элементы (МЭ) интеграла столкновений и разработан алгоритм вычисления этих МЭ для степенных потенциалов. Однако, как отмечал сам Барнет, формулы для вычисления нелинейных МЭ оказываются чересчур громоздкими. Поэтому для конкретных расчетов Барнет и его последователи (см., например [43]) ограничились вычислениями для максвелловских молекул и твердых шаров при $l \leq 2$, где l - индекс полинома Лежандра.

Моментный метод решения уравнения Больцмана получил дальнейшее развитие в работах Грэда [44], [45]. В методе Грэда разложение ведется по тензорам различного ранга в декартовых координатах – полиномам Грэда-Эрмита. Этот метод (в основном его 13-ти и 20-ти моментные приближения) широко используется при решении многих задач кинетической теории газа и плазмы. В зависимости от числа моментов в разложении ФР в методе Грэда необходимо использовать различные нелинейные МЭ интеграла столкновений.

В работе [46] Кумар предпринял анализ систем полиномов, выбираемых разными авторами в качестве базисных функций при разложении ФР. Им было показано, что наиболее экономичной является система, предложенная Барнетом, т.е. система ортогональных с максвелловским весом функций, представляющих собой произведение сферических функций и полиномов Сонина. Кумар предложил также использовать при расчете нелинейных МЭ преобразование Талми, которое успешно применялось в квантовой теории.

Проблема дальнейшего развития моментного метода оказалась тесно связанной с вычислением матричных элементов, соответствующих моментам от нелинейного интеграла столкновений. Хотя Барнету удалось сформулировать основные положения этого метода и вывести формулы для нелинейных матричных элементов, он смог провести вычисления лишь для небольших значений индексов. При больших значениях индексов формулы становятся весьма громоздкими, и провести расчеты МЭ с их использованием становится практически невозможно даже на современных ЭВМ. Вычисление нелинейных МЭ с большими индексами до недавнего времени представляло большие трудности даже в случае изотропного по скоростям уравнения Больцмана, когда базисными функциями являются только полиномы Сонина.

Некоторое развитие методов расчета МЭ было осуществлено авторами работы [47]. В случае степенных потенциалов и в предположении независимости сечения рассеяния от углов (псевдостепенные потенциалы) ими были рассчитаны МЭ для изотропного уравнения Больцмана. Аналитические формулы для МЭ, найденные в [47], содержат 6 вложенных сумм. В [47] удалось провести вычисления МЭ до $N_0 = 13$, где N_0 - максимальное число членов в разложении ФР. При значениях $N_0 > 13$ рассчитать МЭ не удалось из-за катастрофического нарастания как времени счета, так и погрешности вычислений. Авторами [47] было показано, что описание ФР в области больших скоростей существенно улучшается с ростом N_0 . Это стимулировало поиск возможностей расчета МЭ с большими значениями индексов.

Авторам работы [48] на основе метода разложения ФР по максвеллианам удалось построить аналитические формулы для МЭ в случае произвольных степенных потенциалов, в том числе и для кулоновского взаимодействия частиц. Формулы содержали 4 вложенные суммы и расчеты удалось провести до $N_0 = 30$.

Наконец, в книге [49] предложен способ расчета МЭ на основе рекуррентных соотношений. Эти соотношения являются следствием инвариантности интеграла столкновений относительно выбора базисных функций и выполняются для любого потенциала взаимодействий. В изотропном случае базисные функции представляют собой полиномы Сонина, ортогональные с максвелловской весовой функцией. Температура этой максвелловской весовой функции может выбираться произвольно. Такие системы полиномов Сонина с различными температурами представляют собой различные базисы. Авторами [49] реализован расчет линейных и нелинейных МЭ в изотропной задаче до $N_0 = 128$. Это позволило продвинуться в точном описании ФР до 8-10 тепловых скоростей. Инвариантность интеграла столкновений относительно выбора базиса использована в [49] для получения связей между МЭ и в осесимметричном случае. Связи между МЭ в этом случае находятся при переходе к базису с максвелловским распределением не только с другой температурой, но и с другой средней скоростью. Тем самым трудности моментного метода, связанные с вычислением МЭ с большими индексами, можно считать преодоленными.

Этот исторический обзор показывает, что исследование структуры интеграла столкновений, в частности, путем изучения его МЭ при полиномиальном разложении представляет собой очень интересную и глубокую математическую и физическую проблему. Каждый успешный шаг в решении этой проблемы сопровождался появлением нового или

усовершенствованием существовавшего ранее метода решения уравнения Больцмана. Это, в свою очередь, способствовало решению ряда физических и технических вопросов.

Несмотря на значительный прогресс, достигнутый в расчете МЭ, в реализации стандартного моментного метода существует и другая трудность – сходимость разложения для ФР. Известно, что разложение в моментном методе сходится лишь при конечности интеграла от квадрата ФР деленного на весовую функцию системы полиномов Сонина. Поскольку это ограничение возникает при разложении по полиномам Сонина, ортогональным с максвелловским весом, то от него можно избавиться, если рассматривать разложение ФР только по сферическим гармоникам. Использование такого подхода приводит к замене интеграла столкновений набором интегральных операторов. Ядра этих операторов, зависящие только от модулей скоростей, играют ту же роль, что и МЭ в обычном моментном методе.

Проблема построения ядер весьма сложна. Достаточно сказать, что до сих пор явные выражения даже для ядер линеаризованного интеграла столкновений были известны только для случая твердых шаров [34, 41]. Лишь в последнее время были найдены ядра линеаризованного интеграла столкновений и для псевдомаксвелловских молекул [50]. Ядра нелинейного интеграла столкновений для максвелловских молекул и твердых шаров впервые были построены в [51].

Ядра линейного столкновительного оператора для твердых шаров использовались рядом исследователей для решения кинетических задач. Так в работе Лойялки [52] при решении граничных задач линейный интеграл столкновений рассчитывался с помощью ядер. Им было отмечено, что такой подход позволяет находить коэффициенты переноса с очень высокой точностью. Использование ядер, возникающих при разложении линейного интеграла столкновений по сферическим гармоникам, является перспективным и для решения линейных граничных задач переноса электронов.

Таким образом, дальнейшее изучение свойств интеграла столкновений на основе исследования ядер нелинейного интеграла столкновений и развитие метода разложения по сферическим гармоникам при сильном отклонении функции распределения от равновесия представляется весьма важной и актуальной задачей, как в линейном, так и в нелинейном случае.

Остановимся теперь на содержании диссертации. Она состоит из девяти глав, введения и заключения. В первой главе на основе анализа дифференциальных сечений взаимодействия электронов с веществом исследуются соотношения между характерными длинами процесса релаксации и выявляются малые параметры задачи. При прохождении электронов средних (порядка нескольких десятков keV) энергий через вещество основным

механизмом энергетических потерь являются процессы возбуждения и ионизации атомов среды, а перераспределение электронов по направлениям движения осуществляется в основном за счет упругого рассеяния. Особенности процесса взаимодействия электронов с веществом, заключающиеся в преимущественном рассеянии вперед с малыми потерями энергии, приводят к тому, что длины свободного пробега по упругим и неупругим столкновениям l_{el} , l_{in} не характеризуют процессы угловой и энергетической релаксации в целом. Характерными длинами этих процессов являются длина изотропизации λ и полный пробег электрона в веществе s .

Отмеченные особенности взаимодействия электронов с веществом позволяют выделить малые параметры в кинетическом уравнении и использовать методы теории возмущений для его упрощения.

Очевидными малыми параметрами являются ширины пиков дифференциальных сечений упругого и неупругого рассеяния. Пикообразность дифференциальных сечений дает возможность упростить упругую и неупругую части интеграла столкновений, сводя их к дифференциальному оператору. Степенной характер убывания дифференциального сечения при удалении от пика приводит к необходимости использования метода последовательного разложения ядра и функции нагрузки [53] для отыскания корректного асимптотического разложения. Как показано в работе Гунько и Троппа [31], в результате применения этой методики к упругой части интеграла столкновений помимо обычного оператора Лапласа по угловым переменным возникает интегральный член, который может быть интерпретирован как оператор рассеяния на большие углы. Порядок этого члена оказался равным $O((\ln(\beta))^{-1})$, где β - малый параметр, характеризующий пикообразность ядра. В параграфе 1.2 проведено исследование собственных чисел упругой части интеграла столкновений, которое выявило структуру оператора рассеяния на большие углы и позволило сравнить спектр интеграла столкновений со спектром аппроксимирующих его операторов. Было показано, что собственные числа дифференциального оператора $\Delta_{g,q}$, являющегося первым членом асимптотического разложения упругой части интеграла столкновений $\hat{I}_{el}$, значительно отличается от спектра $\hat{I}_{el}$ даже для нескольких первых гармоник. Учет оператора рассеяния на большие углы существенно улучшает аппроксимацию спектра $\hat{I}_{el}$ для малых номеров гармоник, однако асимптотическое поведение спектров $\hat{I}_{el}$ и аппроксимирующих его операторов оказывается различным.

Несмотря на степенной характер убывания дифференциального сечения неупругого рассеяния при удалении от пика, непосредственное использование метода последовательного

разложения ядра и функции нагрузки для асимптотического разложения неупругой части интеграла столкновений невозможно. Это связано с тем, что ядро подынтегрального выражения зависит как от быстрой, так и от медленной переменной. В параграфе 1.3 проводится обобщение способа асимптотического разложения интегралов с пикообразным ядром, убывающим степенным образом, на случай зависимости ядра от медленной переменной. Полученный результат используется для выполнения корректного разложения неупругой части интеграла столкновений $\hat{I}_{in}$. Первый член полученного разложения совпадает с обычно используемым приближением непрерывных потерь. Следующий член разложения представляет собой интегральный оператор и имеет величину порядка $O((\ln(\varepsilon))^{-1})$, где ε - малый параметр, характеризующий пикообразность дифференциального сечения неупругого рассеяния.

Как уже отмечалось, в силу малости потери угла и энергии в акте рассеяния процесс угловой и энергетической релаксации электронов средних энергий в веществе характеризуется не длинами свободного пробега по упругим и неупругим столкновениям l_{el} , l_{in} , а длиной изотропизации λ и полным пробегом электрона в веществе s . При этом справедливы неравенства $l_{in} \ll s$, $l_{el} \ll \lambda$. Даже при использовании дифференциальных аппроксимаций для интеграла столкновений кинетическое уравнение представляет собой дифференциальное уравнение в частных производных, зависящее от шести (в простейшем случае – от трех) переменных.

Как показывает анализ дифференциальных сечений рассеяния, для вещества с атомным номером Z отношение длин свободных пробегов l_{el}/l_{in} ведет себя как $Z^{-4/3}$ и при энергии $E = 10$ кэВ и $Z=50$ имеет величину порядка 0.02. Отношение λ/s имеет порядок $1/Z$ и слабо зависит от энергии. Таким образом, в задаче имеются характерные длины, между которыми возможны различные соотношения. В частности, в веществах с большим атомным номером все эти длины оказываются различными и выстраиваются в цепочку $l_{el} \ll l_{in} \ll \lambda \ll s$.

Наличие существенно различных характерных длин в задаче транспорта электронов позволяет отнести ее к классу многомасштабных задач и применить для ее решения методы теории возмущений. При переходе к безразмерным переменным с использованием в качестве масштаба длины величины $\sqrt{\lambda(E) \cdot s(E)}$ в кинетическом уравнении при производных по пространственным переменным появляется малый параметр $\delta = \sqrt{\lambda(E_0)/s(E_0)}$, что позволяет отнести задачу переноса электронов к классу сингулярно возмущенных задач. Согласно схеме асимптотического расщепления многомасштабных задач [54] процесс отыскания асимптотического разложения решения может быть разбит на два итерационных

процесса – основной итерационный процесс и нахождение погранслоиных функций. В ходе основного итерационного процесса формулируются уравнения меньшей размерности, являющиеся условием разрешимости задач для коэффициентов асимптотического разложения решения по параметру малости задачи. Отыскание решений уравнений меньшей размерности позволяет найти и коэффициенты асимптотического разложения. Полученное в результате проведения основного итерационного процесса решение, вообще говоря, не удовлетворяет граничным условиям. В связи с этим оно должно быть дополнено погранслоиными функциями, которые находятся во втором итерационном процессе. Сращивание внешнего и внутреннего разложений определяет граничные условия, необходимые для решения уравнений меньшей размерности. Корректный переход от полного кинетического уравнения к сокращенному описанию с помощью уравнения меньшей размерности проведен в параграфе 1.4. Показано, что задача определения функций $\Phi_n(\vec{r}, \vec{\Omega}, E)$, зависящих от $\vec{r}$, $\vec{\Omega}$ и E и представляющих собой коэффициенты разложения решения по малому параметру δ , сводится к задаче для функций $U_n(\vec{r}, E)$, зависящих лишь от пространственных переменных и энергии. Функции $U_n(\vec{r}, E)$ могут определяться последовательно из уравнений, следующих из условий разрешимости задач для $\Phi_{n+2}(\vec{r}, \vec{\Omega}, E)$.

Для получения равномерно пригодного приближения рассматриваются погранслоиные функции, удовлетворяющие граничным условиям и выходящие на решение в основной области при удалении от границы. При этом в качестве масштаба глубины, измеряемой по нормали к плоскости границы, выбирается величина $\lambda(E_0)$. Решение и в этом случае ищется в виде ряда по малому параметру δ , $v = \sum_{k=0}^{\infty} v_k \delta^k$. Функции v_k при этом зависят от погранслоиной пространственной переменной $\xi = z/\delta$, переменной $\mu = \cos\theta$, где θ – полярный угол, отсчитываемый от оси z , и азимутального угла φ . Подстановка этого ряда в кинетическое уравнение приводит к цепочке задач для v_k , причем задачи для v_0, v_1 являются однородными, в то время как функции $v_k, k \geq 2$ оказываются решениями неоднородных задач с источниковыми членами, зависящими от v_{k-2} . Таким образом, задача построения погранслоиного решения сводится к решению цепочки односкоростных задач. Источник в этих задачах параметрически зависит от энергии. Сращивание внешнего и внутреннего разложения определяет граничные условия, необходимые для решения уравнений меньшей размерности.

Вторая глава посвящена исследованию пограничного слоя. Для реализации процедуры сращивания асимптотического разложения решения в пограничном слое и в области диффузии необходимо прежде всего исследовать поведение погранслойных функций v_k вдали от границ. Такое исследование проводится в параграфе 2.1, где координатная асимптотика погранслойных функций в слое эффективной изотропизации отыскивается по аналогии с алгоритмом, предложенным в [37]. Показано, что асимптотика решения однородного кинетического уравнения в пограничном слое имеет вид линейной комбинации собственной и присоединенной функций, соответствующих задаче $\lambda(E_0)\hat{I}_{el}g = \alpha\mu \cdot g$ при $\alpha = 0$.

На основе полученных результатов в параграфе 2.2 проводится сращивание решений в области диффузии и в пограничном слое, что позволяет определить недостающие граничные условия для уравнений меньшей размерности и условия на бесконечности для погранслойных функций и замкнуть алгоритм отыскания последовательных приближений. Условия сращивания дают условия на значения функций $U_n(\vec{r}, E)$ на границе, а также условие на поток для погранслойных функций v_k на бесконечности.

В параграфе 2.3 проведено рассмотрение структуры решения задачи о взаимодействии мононаправленного моноэнергетического пучка электронов с твердотельной мишенью. Показано, что в соответствии с цепочкой длин $l_{el} \ll l_{in} \ll \lambda \ll s$ в структуре решения имеются пограничные слои, в которых происходит перераспределение электронов по углам и энергиям в различных масштабах. В каждом из пограничных слоев выделены параметры малости и проведено упрощение кинетического уравнения. Указаны масштабы длин, углов и энергий, в которых кинетическое уравнение имеет универсальный вид. Сформулированы условия сращивания решения в смежных пограничных слоях. В некоторых слоях для первых членов разложения по малым параметрам приведено решение возникающих задач.

В третьей главе рассмотрены аналитические результаты, полученные при решении некоторых задач теории переноса электронов средних энергий в диффузионном приближении. Параграф 3.1 посвящен расчету распределения электронов в мишени, облучаемой моноэнергетическим пучком по нормали к поверхности. На основе разработанной в главе 1 схемы асимптотического расщепления кинетического уравнения отыскание функции распределения электронов сводится к решению уравнения меньшей размерности в области диффузии. При этом функция распределения в нулевом приближении выражается через решения одномерного обобщенного однородного уравнения диффузии. Для приближенного аналитического решения этого уравнения используется

дифференциальное приближение для неупругой части интеграла столкновений. Граничные условия для решения уравнения диффузии при $z = 0$ представляют собой условия первого рода. Решение при этом имеет особенность в окрестности $z = 0$. Для ее устранения необходимо провести сращивание полученного решения с решением в пограничном слое.

В параграфе 3.2 проведен расчет функции выхода электронов $q(z, E)$ с энергиями в диапазоне 0.5-30keV из полубесконечной однородной мишени в диффузионном приближении. Эта задача оказывается актуальной для теоретического описания процесса эмиссии электронов из образцов, облучаемых рентгеновским излучением.

Следующий параграф посвящен расчету функции выхода электронов из образцов типа «слой на подложке». Кинетическое уравнение в диффузионном приближении в такой задаче сводится к уравнению с кусочно-непрерывными коэффициентами. Слабая зависимость отношения средних потерь энергии в слое к средним потерям в подложке от энергии электрона позволяет свести рассматриваемое уравнение к уравнению теплопроводности с кусочно-постоянными коэффициентами.

В главах 4 – 7 рассматриваются численные методы решения кинетического уравнения. Глава 4 посвящена формулировке основных положений моментного метода и краткому обзору способа расчета МЭ на основе рекуррентных соотношений. Эти соотношения являются следствием инвариантности интеграла столкновений относительно выбора базисных функций и выполняются для любого потенциала взаимодействий. Вводится понятие ядер нелинейного, линеаризованного и линейного интеграла столкновений, приводятся результаты для ядер линейного интеграла столкновений в случаях твердых шаров и псевдомаксвелловских молекул. Следует отметить, что набору ядер интегральных операторов однозначно соответствует полный набор МЭ, и каждое ядро представляет собой ряд из произведений МЭ на соответствующие полиномы Сонина. Однако при аппроксимации суммы ряда его отрезком оказывается необходимым учитывать очень большое число членов, что приводит к значительным трудностям при непосредственном построении ядра. Эту трудность можно обойти, если воспользоваться асимптотической оценкой остатка ряда. При этом требуется информация об асимптотическом поведении МЭ при больших значениях индексов. Асимптотика МЭ и построение ядер линейного интеграла столкновений для некоторых моделей взаимодействия рассматриваются в пятой главе. В параграфе 5.1 найдено выражение для линейных МЭ в случае псевдостепенных потенциалов взаимодействия, не содержащее суммирования. На основе этого выражения строится асимптотика линейных МЭ K_{0n}^r с индексами, стремящимися к бесконечности так, что разность между ними остается фиксированной. Получена также асимптотика МЭ K_{0n}^r в

случае, когда один из индексов стремится к бесконечности, а второй фиксирован. Использование рекуррентных соотношений позволяет построить асимптотику нелинейных МЭ $K_{p,n}^r$ при фиксированном p и больших значениях индексов r, n . Аналогичный прием дает асимптотику нелинейных МЭ в том случае, когда два индекса фиксированы. В случае максвелловских молекул получена также асимптотика МЭ по трем индексам, основанный на разложении по сферическим гармоникам. В параграфе 5.2 найдена асимптотическая оценка остатка ряда для ядра линейного интеграла столкновений в случае максвелловских молекул. При этом использована формула Эйлера-Маклорена и развит предложенный в [55] метод получения асимптотики полиномов Сонина. В параграфе 5.3 асимптотика остатка ряда для ядра линейного интеграла столкновений найдена также и для случая твердых шаров. Показано, что использование асимптотики остатка ряда позволяет рассчитывать ядра линейного интеграла столкновений с высокой точностью при использовании нескольких десятков МЭ.

Шестая глава посвящена рассмотрению свойств ядер нелинейного интеграла столкновений. В параграфе 6.1 получено аналитическое выражение для ядра нелинейного интеграла столкновений, зависящего от векторных скоростей. Далее рассмотрены свойства ядер при изменении скорости системы отсчета и единицы измерения скорости. Показано, что в случае степенных потенциалов ядро оказывается однородной функцией своих аргументов. Степень однородности при этом определяется показателем степени в зависимости потенциала взаимодействия от расстояния. Это свойство мы будем называть свойством подобия. Вследствие подобия ядра нелинейного интеграла столкновений, зависящие от модулей скоростей, могут быть представлены в виде произведения функции, зависящей от двух переменных, на степень от суммы квадратов модулей скоростей. Построение функции, зависящей от двух переменных, позволяет найти ядро для любых, сколь угодно больших модулей скоростей. Интегрирование ядра нелинейного интеграла столкновений с максвеллианом решает проблему построения линейного ядра в области больших скоростей.

В этой же главе рассмотрены свойства ядер интеграла прямых столкновений. Показано, что это ядро выражается через ядро некоторого линейного оператора, обладающего свойством ортогональной инвариантности. Ядра интеграла прямых столкновений, зависящие от модулей скорости, выражаются через полное сечение с помощью одной квадратуры, и их построение не вызывает особых затруднений. В параграфе 6.3 на основе инвариантности интеграла столкновений относительно выбора скорости системы отсчета получены связи между ядрами нелинейного интеграла столкновений. Эти связи, в отличие от соотношений между МЭ, содержат дифференциальные операторы. На основании найденных связей между ядрами удастся построить рекуррентную процедуру их

последовательного отыскания. Эта процедура позволяет последовательно находить наборы (слои) ядер $G_{l_1 l_2}^l(c, c_1, c_2)$ с фиксированной суммой индексов $l + l_1 + l_2 = 2\lambda$ при $\lambda = 1, 2, \dots$. В каждом слое задача сводится к отысканию ядра с индексами $l = l_1 = \lambda$, $l_2 = 0$. Это ядро находится путем выполнения конечного числа дифференцирований и интегрирований известных функций. Остальные ядра на слое выражаются через ядро $G_{\lambda 0}^\lambda(c, c_1, c_2)$ и некоторые известные функции и тоже могут быть получены выполнением конечного числа дифференцирований и интегрирований. Стартовым для такой процедуры является ядро $G_{00}^0(c, c_1, c_2)$.

В седьмой главе предложен способ отыскания ядер $G_{00}^{+0}(c, c_1, c_2)$ и выполнены первые два шага рекуррентной процедуры. В параграфе 7.1 показано, что ядра нелинейного интеграла столкновений связаны с ядрами линейного интеграла столкновений обратным преобразованием Лапласа. Переменная, по которой выполняется обратное преобразование Лапласа, обратно пропорциональна корню из температуры фона в линейной задаче. Если известна зависимость линейного ядра от температуры фона, то в некоторых случаях можно найти аналитическое выражение для ядра интеграла обратных столкновений $G_{00}^{+0}(c, c_1, c_2)$. Такое выражение удастся найти для случаев твердых шаров и псевдомаксвелловских молекул. Оказалось, что ядра $G_{00}^{+0}(c, c_1, c_2)$ в этих случаях имеют одинаковую структуру. При фиксированном значении c вся область $c_1 > 0$, $c_2 > 0$ разбивается на ряд подобластей, в которых ядра задаются различными формулами. Границами этих подобластей являются прямые $c_1 = c$, $c_2 = c$ и дуга $c_1^2 + c_2^2 = c^2$. На границах ядра непрерывны и имеют излом. В области $c_1^2 + c_2^2 < c^2$ ядра обращаются в ноль, что является следствием закона сохранения энергии. Ядра симметричны относительно перестановки второго и третьего аргументов и удовлетворяют соотношению подобия.

В параграфе 7.2 выполнен первый шаг рекуррентной процедуры с использованием найденных выражений для $G_{00}^{+0}(c, c_1, c_2)$ в качестве стартовых ядер. Показано, что полученные при этом ядра $G_{10}^{+1}(c, c_1, c_2)$, $G_{11}^{+0}(c, c_1, c_2)$, $G_{01}^{+1}(c, c_1, c_2)$ удовлетворяют соотношению подобия и некоторым соотношениям, следующим из законов сохранения числа частиц, импульса и энергии. Приведены также выражения для ядер $G_{l_1 l_2}^{+l}(c, c_1, c_2)$ в случае $l + l_1 + l_2 = 4$, полученные в результате выполнения второго шага рекуррентной процедуры.

Получение аналитических выражений для ядер $G_{0,0}^{+0}(c, c_1, c_2)$ с помощью обратного преобразования Лапласа возможно не всегда. Даже при наличии аналитического выражения

для зависимости линейного ядра от температуры фона расчет $G_{0,0}^{+0}(c, c_1, c_2)$ может потребовать численного обращения преобразования Лапласа. При отсутствии аналитической зависимости $\bar{L}_l^+(c, c_1; \alpha)$ подход, основанный на использовании обратного преобразования Лапласа, и вовсе может оказаться неприменимым. В этой ситуации перспективным представляется прямой расчет $G_{0,0}^{+0}(c, c_1, c_2)$ с помощью МЭ. Такой подход позволяет рассчитывать ядра для произвольного закона взаимодействия, если известны МЭ. Тем не менее, его использование сталкивается с определенными трудностями – при расчете суммы оказывается необходимым учитывать очень большое число членов. Подобные трудности возникали и при отыскании линейных ядер интеграла столкновений, расчет которых был рассмотрен в пятой главе. Там же был предложен способ учета остатка ряда, заключающийся в использовании асимптотики МЭ и полиномов Сонина при больших индексах и переходе от суммирования к интегрированию по формуле Эйлера-Маклорена. Такой подход позволил с высокой точностью рассчитывать линейное ядро при учете сравнительно небольшого числа членов конечной суммы. Применимость подобного подхода продемонстрирована на примере расчета нелинейного ядра $G_{0,0}^{+0}(c, c_1, c_2)$ для случая псевдомаксвелловских молекул. Наличие аналитического выражения для $G_{0,0}^{+0}(c, c_1, c_2)$, полученного в параграфе 7.1, обеспечивает возможность контроля точности полученных результатов.

Полученные в седьмой главе ядра прямых и обратных нелинейных интегралов столкновений позволяют рассмотреть одну из фундаментальных задач кинетической теории газов - задачу нелинейной релаксации сильно неравновесной по скоростям ФР к равновесному распределению. Как уже отмечалось, метод, использующий ядра интеграла столкновений, применялся ранее рядом исследователей для решения линейных задач. Такой подход был, например, применен в [52, 56] для решения некоторых граничных задач кинетической теории газов и отыскания пристеночных скачков. Единственными известными ядрами к моменту появления этих работ были ядра линейного интеграла столкновений для твердых шаров, полученные еще в [41]. Именно они и были использованы авторами [52, 56] для расчета интеграла столкновений линеаризованного уравнения Больцмана. По замечанию Лойялки, такой подход впервые дал возможность с высокой точностью описать поведение ФР малой примеси на равновесном газе вблизи границы для модели твердых шаров.

В параграфе 7.4 рассматривается несколько задач нелинейной релаксации для пространственно однородной изотропной по скоростям ФР. При этом используется два вида сечений взаимодействия – псевдомаксвелловские молекулы и твердые шары. Интегрирование по скоростям при вычислении интеграла столкновений осуществляется с

помощью квадратурной формулы Гаусса-Кристоффеля. Для обеспечения гладкости подинтегральной функции в интеграле обратных столкновений целесообразно перейти к полярным координатам на плоскости c_1, c_2 . Кинетическое уравнение интегрируется методом Рунге-Кутты четвертого порядка. В качестве первого примера рассмотрен процесс релаксации для псевдомаксвелловских молекул. Начальное условие представляет собой ВКВ-моду, т.е. ФР в начальный момент времени является линейной комбинацией нулевого и первого полиномов Сонина. Такая задача, как известно, имеет аналитическое решение.

Расчет производился для $c = 0.1, 0.2, \dots, 12$ с шагом по времени $\Delta t = 0.2$ до $t = 80$. Относительная ошибка в функции распределения по сравнению с аналитическим решением не превышает 0.0015 во всем рассматриваемом интервале скоростей от нуля до 10 тепловых скоростей.

Задача релаксации была решена также для модели твердых шаров. В качестве начального условия для ФР была использована та же ВКВ-мода, что и для псевдомаксвелловских молекул. Поскольку аналитическое решение задачи в этом случае отсутствует, то рассчитанные зависимости ФР сравнивались с результатами, полученными моментным методом в [49]. Это сравнение продемонстрировало полное совпадение зависимостей ФР от скорости во всем рассматриваемом диапазоне скоростей (до 14 тепловых скоростей) во все моменты времени.

В этом же параграфе решена задача релаксации для псевдомаксвелловских молекул в случае, когда в начальный момент ФР представляет собой линейную комбинацию двух максвеллианов с разными температурами T_1 и T_2 , причем $T_1/T_2 = 0.1$, а коэффициенты линейной комбинации равны $2/3$ и $1/3$. В этой ситуации критерий сходимости нарушается и стандартный моментный метод неприменим. Тем не менее, использование ядер для расчета интеграла столкновений позволяет и в этом случае рассчитать эволюцию ФР. Сопоставление процессов релаксации ФР при различных начальных условиях показывает, что хвост ФР в случае начального условия в виде ВКВ-моды релаксирует значительно быстрее. Таким образом, можно утверждать, что метод, основанный на использовании ядер нелинейного интеграла столкновений, позволяет строить ФР с очень высокой точностью до скоростей порядка 10 тепловых скоростей как в ситуациях, когда стандартный моментный метод может быть использован, так и в ситуациях, где он неприменим.

В параграфе 7.5 рассмотрен метод разложения по сферическим гармоникам применительно к линейному уравнению Больцмана, описывающему перенос электронов средних энергий в веществе. Получено выражение для ядер интеграла столкновений в этом случае. Показано, что в случае односкоростной задачи расчет ядер сводится к вычислению коэффициентов разложения дифференциального сечения упругого рассеяния по полиномам

Лежандра. В общем случае, в силу малости отношения l_{el}/l_{in} , ядра интеграла столкновений мало отличаются от ядер односкоростной задачи.

В этом же параграфе проводится численное решение задачи об угловой релаксации электронов в пограничном слое эффективной изотропизации. При этом используется метод дискретных ординат [57, 58] и представление интеграла столкновений через ядра. Такое представление интеграла столкновений с помощью ядер аналогично использованному Лойялкой в работе [52] при решении стационарной граничной задачи о диффузии газа в полупространстве на полностью поглощающую стенку.

Особенность решаемой задачи заключается в сильной пикообразности дифференциального сечения рассеяния электронов и связанной с этим необходимостью использования большого числа узлов в формуле Гаусса для интегрирования по углам при расчете интеграла столкновений. Кроме того, δ -образный характер граничного условия, описывающего падение мононаправленного пучка на мишень заставляет выделять в решении нерассеянную и рассеянную части. При решении задачи для рассеянной части методом итераций с нулевым начальным приближением оказывается необходимым выполнить очень большое число итераций. Отмеченные особенности привели к необходимости модификации стандартного S_N метода. Выгодным оказалось использование уравнения переноса в интегральной форме и использование малоуглового приближения в качестве начального приближения для отыскания рассеянной части решения. С помощью разработанного алгоритма решены задачи отыскания ФР в пограничном слое эффективной изотропизации для Al, Cu, Au при начальных энергиях пучка 5, 10, 15 и 20 кэВ. В качестве дифференциального сечения упругого рассеяния использовалось сечение Мотта. Как показали расчеты, предельное значение ФР на больших глубинах практически не зависит от атомного номера мишени и энергии пучка.

Рассмотренный в главах 1 - 3 асимптотический подход к решению кинетического уравнения для электронов и аналитические решения, полученные на его основе, позволяют выявить характер зависимости распределения электронов от основных параметров задачи. Разработанный численный метод решения дает возможность принять во внимание особенности взаимодействия электронов с веществом и получить детальную информацию о распределении электронов. Тем не менее, в ряде случаев для учета сложной геометрии мишени и различных способов регистрации сигнала оказывается удобным использовать метод прямого моделирования транспорта электронов – метод Монте-Карло. В рамках этого метода удастся особенно просто учитывать неоднородность мишени, наличие включений, тонкую структуру дифференциальных сечений рассеяния электронов и т.д.

При реализации моделирования транспорта электронов по методу Монте-Карло наибольшие трудности представляет расчет взаимодействия электронов с веществом. В восьмой главе рассмотрены методы расчета дифференциальных сечений упругого и неупругого рассеяния. На их основе были вычислены дифференциальные сечения упругого рассеяния по формуле Мотта в широком диапазоне энергий налетающего электрона (от 5 эВ до 30 кэВ) для атомов с атомными номерами от 1 до 103. В том же диапазоне энергий рассчитаны дифференциальные сечения неупругого рассеяния для ряда веществ. Все эти данные помещены в архив www.ioffe.ru/ES/. В параграфе 8.3 приведен обзор принципов, моделей и процедур, используемых для моделирования транспорта электронов по методу Монте-Карло. Там же описаны особенности программных пакетов, разработанных для моделирования процессов взаимодействия электронного пучка с мишенью и электронной фотоэмиссии, возникающей при облучении образца рентгеновским излучением, а также для расчета функции выхода электронов. В параграфе 8.4 полученные при моделировании результаты сравниваются с экспериментальными данными и результатами других авторов.

Последняя глава иллюстрирует применение разработанных в предыдущих главах аналитических и численных методов к решению самых разнообразных проблем, связанных с транспортом электронов. В параграфе 9.1 проведено сравнение результатов аналитической и численной аппроксимации функции выхода электронов средних энергий для полубесконечных образцов и образцов типа «слой на подложке». Эти результаты важны для процедур диагностики материалов, базирующихся на явлении электронной эмиссии. В параграфе 9.2 рассмотрена задача о расчете теплового воздействия электронного зонда на образец нитрида галлия. Распределение плотности источников тепла при этом рассчитывается с помощью моделирования по методу Монте-Карло. В параграфе 9.3 с помощью метода Монте-Карло получены оценки пространственного разрешения в методах регистрации изображения, основанных на рентгеновской фотоэмиссии. Наконец, в последнем параграфе описаны задачи, где расчеты плотности генерации рентгеновского излучения при облучении мишени электронным пучком позволили разработать методику диагностики нанометровых слоев In (Cd) в однородных образцах GaAs (ZnSe), а также способ определения параметров распределения концентрации примеси в приповерхностном слое глубиной 0,1-1,0 мкм.

Глава 1.

Асимптотическое исследование линейного кинетического уравнения для электронов

1.1 Анализ дифференциального сечения рассеяния электронов средних энергий и характерных длин процесса релаксации

Как уже отмечалось во введении, для широкого класса современных диагностических методов ключевой проблемой является проблема транспорта электронов средних энергий. Теоретической основой для описания транспорта электронов служит кинетическое уравнение. Распространение электронов в веществе происходит на заданном атомном фоне, и задача оказывается линейной. Несмотря на это существенное упрощение, получить ее решение в аналитическом виде невозможно. Однако особенности процесса взаимодействия электронов средних энергий с веществом позволяют выделить в задаче ряд малых параметров, что дает возможность использовать для ее исследования асимптотический подход.

Рассмотрим стационарную задачу для линейного кинетического уравнения, описывающего взаимодействие электронов с веществом в отсутствии внешних полей. Пусть $f(\vec{v}, \vec{r})$ - нормированная на единицу функция распределения электронов, $n_0(\vec{r})$ - концентрация электронов. Кинетическое уравнение имеет вид

$$\vec{v} \cdot \frac{\partial}{\partial \vec{r}} n_0(\vec{r}) f(\vec{v}, \vec{r}) = n_0(\vec{r}) \hat{I}(f) \quad (1.1)$$

Интеграл столкновений $\hat{I}(f)$ представляет собой линейный оператор, описывающий взаимодействие электронов со средой. Заметим, что обычно в задачах по переносу электронов вместо функции распределения $f(\vec{v}, \vec{r})$, зависящей от координат и скоростей, рассматривают дифференциальную плотность потока $\Phi(\vec{r}, \vec{\Omega}, E)$, зависящую от координат, направления движения $\vec{\Omega}$ и энергии E электрона

$$\Phi(\vec{r}, \vec{\Omega}, E) = v n_0(\vec{r}) f(\vec{v}, \vec{r}). \quad (1.2)$$

Здесь $\vec{\Omega} = \vec{v}/v$, $v = |\vec{v}|$, $E = mv^2/2$ - энергия электрона. Обозначая дифференциальное сечение рассеяния, представляющее собой вероятность того, что электрон с направлением движения $\vec{\Omega}'$ и энергией E' при взаимодействии с атомом перейдет в единичный телесный угол около направления $\vec{\Omega}$ и приобретет энергию из единичного интервала около E , через $\frac{d^2\sigma(E', \vec{\Omega}', E, \vec{\Omega})}{d\Omega dE}$, запишем кинетическое уравнение для электронов в виде

$$\vec{\Omega} \cdot \nabla_{\vec{r}} \Phi(\vec{r}, \vec{\Omega}, E) = \hat{I}(\Phi). \quad (1.3)$$

Здесь интеграл столкновений $\hat{I}(\Phi)$ имеет вид

$$\begin{aligned} \hat{I}(\Phi) = N \int \int_{4\pi E}^{\infty} \frac{d^2 \sigma(E', \vec{\Omega}', E, \vec{\Omega})}{d\Omega dE} \Phi(\vec{r}, \vec{\Omega}', E') dE' d\vec{\Omega}' - \\ - N \Phi(\vec{r}, \vec{\Omega}, E) \int \int_{4\pi 0}^E \frac{d^2 \sigma(E, \vec{\Omega}, E', \vec{\Omega}')}{d\Omega dE} dE' d\vec{\Omega}', \end{aligned} \quad (1.4)$$

где N - концентрация рассеивателей. Для отыскания дифференциальной плотности потока в области D уравнение (1.3) должно быть дополнено граничными условиями, описывающими распределение электронов, падающих на область:

$$\Phi(\vec{r}, \vec{\Omega}, E) \Big|_{\vec{r}=\vec{r}_\Gamma} = \Phi_\Gamma(\vec{r}_\Gamma, \vec{\Omega}, E); \quad \vec{\Omega} \cdot \vec{n}_\Gamma < 0 \quad (1.5)$$

Здесь $\vec{r}_\Gamma$ - радиус-вектор точки поверхности, ограничивающей область D , $\vec{n}_\Gamma$ - направление внешней нормали в точке $\vec{r}_\Gamma$.

При взаимодействии электронов средних (10-100 кэВ) энергий с веществом происходит возбуждение и ионизация дискретных атомных уровней, генерация плазмонов, электронно-дырочных пар, тормозного излучения, фононов. Дифференциальное сечение рассеяния электрона в веществе обычно представляется в виде суммы упругой и неупругой части. При достаточно больших энергиях можно ограничиться рассмотрением взаимодействия электрона с одним атомом. При упругом процессе рассеяния атом не меняет своего внутреннего состояния, и потери энергии определяются лишь эффектом отдачи. В силу малости отношения масс электрона и атома эти потери оказываются весьма малыми по сравнению с потерями энергии при неупругом рассеянии, когда атом-мишень переходит в возбужденное или ионизованное состояние, и ими можно пренебречь. В данном параграфе мы рассмотрим лишь качественное описание дифференциальных сечений упругого и неупругого рассеяния, которое позволит определить малые параметры в задаче переноса электронов средних энергий в веществе и выявить ее многомасштабность.

Дифференциальные сечения упругого рассеяния могут быть рассчитаны в различных аппроксимациях. В самом простом случае используется Борновская аппроксимация. Использование модели Томаса-Ферми для описания атомного потенциала позволяет найти дифференциальное сечение рассеяния в виде экранированного Резерфордского сечения

$$\frac{d\sigma_{el}(E, \vec{\Omega}, \vec{\Omega}')}{d\Omega} = \frac{Z^2 e^4}{16E^2} \frac{1}{(\sin^2(\vartheta/2) + \beta^2)^2}, \quad (1.6)$$

где $\beta = 0.565Z^{1/3} \frac{e^2 \sqrt{m}}{\hbar \sqrt{2E}}$ - параметр экранирования, ϑ - угол рассеяния, Z - атомный номер рассеивателя, E - энергия налетающего электрона. Полное сечение упругого рассеяния, задаваемое формулой

$$\Sigma_{el}(E) = \int_{4\pi} \frac{d\sigma_{el}(E, \vec{\Omega}, \vec{\Omega}')}{d\vec{\Omega}} d\vec{\Omega}', \quad (1.7)$$

для (1.6) имеет вид

$$\Sigma_{el}(E) = \frac{\pi Z^2 e^4}{4E^2 \beta^2 (1 + \beta^2)} \quad (1.8)$$

Хотя формула Резерфорда проста и удобна для использования, точность ее невелика, поэтому в тех случаях, когда существенными оказываются детали процесса рассеяния, она неприменима. В этом случае для описания дифференциального сечения упругого рассеяния используется формула, предложенная Моттом [59]. Мы подробно опишем алгоритм расчета сечения Мотта в параграфе 8.1. Сейчас отметим лишь, что нами были проведены систематические расчеты дифференциального сечения упругого рассеяния Мотта для атомов с атомными номерами в диапазоне $1 \leq Z \leq 103$, результаты которых были представлены в организованной нами базе данных www.ioffe.rssi.ru/ES на WEB-странице Физико-Технического Института.

Несмотря на невысокую точность формулы (1.6), она отражает основные особенности процесса рассеяния быстрых электронов на атомах, и мы используем ее для дальнейших оценок. Это оправдывается тем фактом, что, как следует из сравнения с дифференциальным сечением Мотта, формула Резерфорда довольно плохо аппроксимирует сечение для больших углов рассеяния, однако в области малых углов при достаточно высоких энергиях наблюдается неплохое согласие (см. рисунок 8.2). При энергии налетающего электрона E порядка 10 кэВ параметр экранирования является малой величиной $\beta \approx 0.02Z^{1/3}$, и сечение рассеяния имеет резкий пик при нулевом угле рассеяния. Формула (1.6) позволяет оценить средний квадрат угла рассеяния на единице длины, $\langle g^2 \rangle = N \int_{4\pi} \frac{d\sigma_{el}(E, \vec{\Omega}, \vec{\Omega}')}{d\vec{\Omega}} g^2 d\vec{\Omega}'$, и транспортную длину упругого рассеяния

$$\lambda = \frac{2}{\langle g^2 \rangle} \approx \frac{2E^2}{N\pi Z^2 e^4 (\ln(1/\beta^2) - 1)} \quad (1.9)$$

Выбор формулы для неупругой части дифференциального сечения рассеяния электрона на атоме представляет некоторую трудность. Существующие формулы, основанные на борновском приближении, достаточно сложны и не дают хорошей точности.

В то же время подход, основанный на использовании экспериментальных данных, не позволяет использовать простые аналитические приближения. Степень детализации описания дифференциального сечения рассеяния зависит от рассматриваемого круга задач. В том случае, когда мы интересуемся интегральными характеристиками процесса переноса (распределением источников рентгеновского излучения, распределением потерянной энергии по глубине и т.д.) в масштабе длин полного пробега электронов, детали процесса неупругого рассеяния не играют определяющей роли и для описания дифференциального сечения можно пользоваться достаточно грубыми моделями.

Как показано в [60], для аппроксимации сечения ионизации при больших значениях переданной энергии и импульса можно воспользоваться классическим бинарным сечением. В таком приближении учитывается взаимодействие налетающего электрона лишь с одним из атомных электронов, а влиянием ядра и остальных атомных электронов пренебрегают. Процесс столкновения рассматривается как упругое рассеяние налетающего электрона на атомном электроном (который считается свободным) и описывается формулой Резерфорда. В припороговой области поведение сечения в бинарном приближении довольно сильно отличается от экспериментально установленного, что приводит к неверному асимптотическому поведению полного сечения ионизации при $E \rightarrow \infty$. Это объясняется тем, что при больших E основной вклад в сечение ионизации вносит область малых передаваемых импульсов, которые не учитываются в бинарном приближении из-за слишком ограниченного интервала интегрирования по импульсу q (минимальная переданная энергия ΔE не менее потенциала ионизации I и связана с q формулой $q^2 = (m \cdot \Delta E / (\hbar^2 k) + 4k^2 \sin^2(\vartheta/2))$, где ϑ - угол рассеяния а k - волновой вектор налетающего электрона). Если в выражении для сечения в борновском приближении заменить e^{iqr} на $1 + iqr$ для малых q , то сечение окажется пропорциональным dq/q и интегрирование по углам при фиксированной потере энергии Q приведет к выражению для дифференциального по энергии сечения ионизации в виде

$$\frac{d\sigma_{ion}}{dQ} = A \frac{\ln E}{E} + \frac{B}{E} + \frac{C}{E^2} + \dots, \quad E \rightarrow \infty, \quad (1.10)$$

где коэффициенты A , B , C будут являться функциями Q . Можно показать, что аналогичная асимптотика (с коэффициентами, не зависящими от Q) будет иметь место и для полного сечения рассеяния Σ_{ion} , в то время как в бинарном приближении

$$\Sigma_{ion} = \frac{A}{E} + O(E^{-2}), \quad E \rightarrow \infty. \quad (1.11)$$

Оценим среднюю потерю энергии $\bar{Q}_{ion}$ и полное сечение Σ_{ion} , используя выражение для сечения ионизации в бинарном приближении

$$\frac{d\sigma_{ion}(E, Q)}{dQ} = \begin{cases} \frac{Ze^4\pi}{EQ^2} & Q > I \\ 0 & Q < I \end{cases} \quad (1.12)$$

Здесь Z - число электронов на оболочке с потенциалом ионизации I . Простые вычисления дают:

$$\Sigma_{ion} = \int_I^E \frac{d\sigma_{ion}(E, Q)}{dQ} dQ = \frac{Ze^4\pi}{E} \left(\frac{1}{I} - \frac{1}{E} \right) \quad (1.13)$$

$$\bar{Q}_{ion} = \int_I^E Q \frac{d\sigma_{ion}(E, Q)}{dQ} dQ = \frac{Ze^4\pi}{E} \ln \frac{E}{I} \quad (1.14)$$

При наличии нескольких оболочек с потенциалами ионизации I_i и числом электронов на них Z_i полное сечение и средняя потеря энергии будут

$$\Sigma_{ion} = \frac{Ze^4\pi}{E} \left(\frac{1}{I_\sigma} - \frac{1}{E} \right) \quad (1.15)$$

$$\bar{Q}_{ion} = \frac{Ze^4\pi}{E} \ln \frac{E}{I_Q} \quad (1.16)$$

где $Z = \sum_{i=1}^n Z_i$ - общее число электронов в атоме, $I_\sigma = \frac{Z}{\sum_{i=1}^n Z_i / I_i}$, $I_Q = \prod_{i=1}^n I_i^{Z_i/Z}$ - эффективные

потенциалы ионизации.

Средние потери энергии обычно описываются с помощью формулы Бете

$$\bar{Q} = \frac{2\pi Ze^4}{E} \ln \frac{E}{J} \sqrt{\frac{e}{2}} \quad (1.17)$$

где J - средний потенциал ионизации. Формула (1.17) получена Бете в борновском приближении, причем для малых потерь энергии и больших значений q применяется теорема суммирования, вклад от малых q учитывается с помощью дипольного приближения для сечения, а для учета вклада от больших потерь энергии используется бинарное приближение [61].

Для согласования с экспериментом принято подбирать в формуле (1.17) средний потенциал ионизации J . Ф.Блох [62] с помощью модели Томаса-Ферми пришел к выражению

$$J = 13.5 \cdot Z \quad (1.18)$$

Р.Уилсон [63] определил

$$J = 11.5 \cdot Z \quad (1.19)$$

из эксперимента по проникновению протонов с энергией 4мэВ в алюминий. В работе [64] рекомендуется формула

$$J = (9.76 + 58.8 \cdot Z^{-1.19}) \cdot Z \quad (1.20)$$

Данкамб и Да Каза [65] определили величину J из косвенного эксперимента, используя данные анализа бинарных соединений известного состава, в которых поправками на поглощение и флюоресценцию можно пренебречь. Их результаты суммируются эмпирической зависимостью

$$J = (14 \cdot (1 - \exp(-0.1 \cdot Z)) + 75.5 / Z^{Z/7.5} - Z / (Z + 100)) \cdot Z \quad (1.21)$$

Сложный вид этой формулы обусловлен стремлением передать немонотонную зависимость J от Z при $Z < 12$.

При энергиях налетающего электрона и потерях энергии в столкновении, существенно превосходящих потенциалы ионизации оболочек атома, дифференциальное сечение ионизации описывается формулой (1.12), где в качестве I используется некоторый эффективный потенциал ионизации, а под Z подразумевается общее число электронов в атоме. Однако, как показывает сравнение формул (1.16), (1.17), асимптотика средних потерь при $E \rightarrow \infty$ рассчитанная с использованием бинарного приближения, отличается множителем 2 от асимптотики формулы Бете. Появление этого множителя обусловлено вкладом малых потерь энергии в $\bar{Q}$.

Для согласования средних потерь энергии $\bar{Q}_{ion}$ с формулой Бете можно модифицировать сечение (1.12), представляя его в виде

$$\frac{d\sigma_{ion}(E, Q)}{dQ} = \begin{cases} 0 & Q < J \\ \frac{Ze^4\pi}{E} \left(\frac{1}{Q^2} + \frac{a}{J^5} (Q - J - J/a)(Q - 2J)^2 \right) & J < Q < 2J \\ \frac{Ze^4\pi}{EQ^2} & 2J < Q \end{cases} \quad (1.22)$$

где $a = \frac{60}{7} \left(\ln \frac{Ee}{2J} + \frac{5}{12} \right)$. Такая формула обеспечивает непрерывность и гладкость сечения и

представляет собой удобную для моделирования аналитическую аппроксимацию дифференциального сечения рассеяния при энергиях налетающего электрона, существенно превосходящих потенциалы ионизации оболочек атома. Естественно, она не претендует на точность в окрестности порога ионизации. Ее основным достоинством является то, что она обеспечивает правильную асимптотику средних потерь энергии и верно отражает поведение дифференциального сечения рассеяния при больших Q . Отметим также, что полное сечение,

рассчитанное с использованием (1.22), обладает правильным асимптотическим поведением при $E \rightarrow \infty$, совпадающим с (1.9). Как показано в [32], формулы для сечений, обладающие указанными свойствами, приводят к асимптотически эквивалентным результатам при разложении интеграла столкновений по малому параметру J/E .

В том случае, когда энергия налетающего электрона сравнима с потенциалом ионизации некоторых оболочек, аппроксимация (1.22) неприменима. Для таких оболочек сечение ионизации может быть описано с помощью формулы Гризинского [66]

$$\frac{d\sigma_n(E, Q)}{dQ} = \frac{\pi e^4 Z_n E_n}{EQ^3} \left(\frac{E}{E + E_n} \right)^{3/2} \left(1 - \frac{Q}{E} \right)^{E_n/(E_n + Q)} \left\{ \frac{Q}{E_n} \left(1 - \frac{E_n}{E} \right) + \frac{4}{3} \ln \left(2.7 + \sqrt{\frac{E - Q}{E_n}} \right) \right\} \quad (1.23)$$

Здесь Z_n - число электронов на оболочке, а E_n - потенциал ее ионизации. Для остальных оболочек сечение неупругого рассеяния может по-прежнему аппроксимироваться формулой (1.22). Средний потенциал ионизации J рассчитывается при этом без учета оболочек первой группы.

Обзор более точных методов расчета дифференциального сечения неупругого рассеяния приведен в параграфе 8.2. Нами были выполнены расчеты дифференциального сечения неупругого рассеяния для ряда материалов в диапазоне энергий 10эВ – 30кэВ на основе диэлектрической функции. Значения дифференциальных сечений рассеяния находятся на сайте <http://www.ioffe.rssi.ru/ES>.

Помимо взаимодействия с атомами, на вид дифференциального сечения рассеяния могут влиять такие процессы как тормозное излучение, взаимодействие с плазмонами и с фононами. Оценим последовательно вклад каждого из процессов, следуя работе [67].

Для оценки влияния тормозного излучения воспользуемся результатами работы [68], в которой приведен вид дифференциального сечения рассеяния, рассчитанного с учетом тормозного излучения $\frac{d^2\sigma_{bs}(E, \vec{\Omega}, E', \vec{\Omega}')}{dEd\Omega}$. Из последующего анализа приведенной формулы

следует, что искажение углового распределения электронов, наблюдающегося при упругом рассеянии, незначительно. Так, для электронов с энергиями $E \leq 0.1$ мэВ имеем

$$\left| \int_0^E \frac{d^2\sigma_{bs}(E, \vec{\Omega}, E', \vec{\Omega}')}{dEd\Omega} dE' \left/ \frac{d\sigma_{el}(E, \vec{\Omega}, \vec{\Omega}')}{d\Omega} - 1 \right| \leq 2 \cdot 10^{-5} \quad (1.24)$$

Как указано в [69], отношение энергетических потерь, вызванных тормозным излучением, к энергетическим потерям, обусловленным ионизацией, равно $(EZ^2)/(1600mc^2)$, что при энергиях 10-100 кэВ не превосходит 10^{-2} .

Оценим влияние на дифференциальное сечение взаимодействия с плазмонами. Как показано в [70], сечение рассеяния электрона с возбуждением плазмона для углов $\theta < \theta_c$, рассчитанное на один валентный электрон, может быть представлено в виде

$$\frac{d^2\sigma_p(E, \vec{\Omega}, E', \vec{\Omega}')}{dEd\Omega} = \frac{e^4}{E\hbar\omega_p(\theta^2 + \theta_E^2)} \delta(E - E' - \hbar\omega_p - 2E\gamma\theta^2), \quad (1.25)$$

где $\hbar\omega_p$ - энергия плазмона при нулевом угле рассеяния, $\theta_E = \hbar\omega_p/(2E)$, γ - параметр порядка единицы. При углах рассеяния $\theta > \theta_c$ возбуждение плазмонов невозможно. Величина угла θ_c зависит от состава мишени. Типичное его значение $\theta_c = (1 - 5) \cdot 10^{-2}$ радиан. Используя это сечение, можно найти выражения для длины свободного пробега, среднего квадрата угла рассеяния и средних потерь энергии, рассчитанных на единицу длины:

$$l_p = \frac{1}{\sum_p n_v} = \left(\frac{\pi e^4 n_v}{E\hbar\omega_p} \ln \frac{\theta_c^2 + \theta_E^2}{\theta_E^2} \right)^{-1} \quad (1.26)$$

$$\langle \theta^2 \rangle_p = \frac{\pi e^4 n_v}{E\hbar\omega_p} \left(\theta_c^2 - \theta_E^2 \ln \frac{\theta_c^2}{\theta_E^2} \right) \quad (1.27)$$

$$\bar{Q}_p = \hbar\omega_p \sum_p n_v + \frac{\pi e^4 n_v}{\hbar\omega_p} \left(\theta_c^2 - \theta_E^2 \ln \frac{\theta_c^2}{\theta_E^2} \right) \quad (1.28)$$

Здесь n_v - концентрация валентных электронов. Найденные значения $\langle \theta^2 \rangle_p$, $\bar{Q}_p$ оказываются существенно меньше величин $\langle \theta^2 \rangle$, $\bar{Q}_{ion}$.

При распространении электронов в кристалле часть их энергии теряется на возбуждение фононов. Приближенный учет взаимодействия электронов с фононами может быть осуществлен с помощью модели, в которой атом считается находящимся в поле межатомных сил, а колебания атомов независимы (модель Эйнштейна) [71]. Такой подход позволяет рассчитать сечение рассеяния электрона на атоме с учетом перехода атома в другое колебательное состояние:

$$\begin{aligned} \frac{d^2\sigma_{phon}(E, \vec{\Omega}, E', \vec{\Omega}')}{dEd\Omega} = \sum_{n_1+n_2+n_3 \geq 0} \frac{Z^2 e^4}{16E^2} \frac{\sqrt{1-n\alpha\tau}}{\left(\sin^2(\theta/2) \sqrt{1-n\alpha\tau} + (1-\sqrt{1-n\alpha\tau})/2 - n\alpha\tau/4 + \beta^2 \right)^2} \times \\ \times \prod_{i=1}^3 \left(\frac{\hbar q_i^2}{2M\omega_i} \right)^{n_i} \exp\left(-\frac{\hbar q_i^2}{2M\omega_i} \right) \frac{1}{n_i!} \delta(E' - E + n\alpha\tau). \end{aligned} \quad (1.29)$$

Здесь ω_i - частоты колебаний атома вдоль взаимно перпендикулярных осей $\vec{e}_i$, $\omega = \frac{1}{3} \sum_{i=1}^3 \omega_i$,

$\alpha_i = \frac{\omega_i}{\omega}$, $\hbar\omega$ - характерная величина колебательного кванта, $n\alpha = \sum_{i=1}^3 n_i \alpha_i$, M - масса атома,

$\tau = \hbar\omega / E$. Проекции переданного импульса $\vec{q}$ на оси $\vec{e}_i$ задаются формулой

$$q_i = k(b_i \sin \theta + a_i (\cos \theta - \sqrt{1 - n\alpha\tau})) \quad (1.30)$$

$$a_i = (\vec{e}'_1, \vec{e}_i), \quad b_i = (\vec{e}'_2, \vec{e}_i) \quad (1.31)$$

Орт $\vec{e}'_1$ направлен по $\vec{p}'$ - импульсу электрона после рассеяния, орт $\vec{e}'_2$ лежит в плоскости рассеяния, k - волновой вектор налетающего электрона. При энергии налетающего электрона E порядка 10 кэВ параметр τ имеет величину порядка $5 \cdot 10^{-6}$ и дифференциальное сечение рассеяния по углам можно представить отрезком ряда Тейлора

$$\begin{aligned} \frac{d\sigma_{phon}(E, \vec{\Omega}, \vec{\Omega}'; \tau)}{d\Omega} &= \int_0^E \frac{d^2\sigma_{phon}(E, \vec{\Omega}, E', \vec{\Omega}')}{dEd\Omega} dE' = \\ &= \frac{d\sigma_{phon}(E, \vec{\Omega}, \vec{\Omega}'; 0)}{d\Omega} + \tau \frac{\partial}{\partial \tau} \left(\frac{d\sigma_{phon}(E, \vec{\Omega}, \vec{\Omega}'; \tau)}{d\Omega} \right) \Bigg|_{\tau=0} \end{aligned} \quad (1.32)$$

Первый член в правой части совпадает с сечением упругого рассеяния $\frac{d\sigma_{el}(E, \vec{\Omega}, \vec{\Omega}')}{d\Omega}$, а

второй может быть приведен к виду

$$\tau \frac{\partial}{\partial \tau} \left(\frac{d\sigma_{phon}(E, \vec{\Omega}, \vec{\Omega}'; \tau)}{d\Omega} \right) \Bigg|_{\tau=0} = \frac{Z^2 e^4}{16E^2} \frac{\beta^2 m}{M} \frac{4 \sin(\theta/2)}{(\sin^2(\theta/2) + \beta^2)^3} \quad (1.33)$$

Это позволяет оценить искажение углового распределения электронов, вызванное учетом взаимодействия с фононами:

$$\left| \int_0^E \frac{d^2\sigma_{phon}(E, \vec{\Omega}, E', \vec{\Omega}')}{dEd\Omega} dE' \Bigg/ \frac{d\sigma_{el}(E, \vec{\Omega}, \vec{\Omega}')}{d\Omega} - 1 \right| \approx 4 \frac{m}{M} \approx 10^{-4} \quad (1.34)$$

Выражение для средних потерь энергии также может быть представлено двумя членами разложения по τ :

$$\begin{aligned} \bar{Q}_{phon}(E, \vec{\Omega}; \tau) &= \int \int_{4\pi 0}^E (E - E') \frac{d^2\sigma_{phon}(E, \vec{\Omega}, E', \vec{\Omega}')}{dEd\Omega} dE' d\vec{\Omega}' = \\ &= \bar{Q}_{phon}(E, \vec{\Omega}; 0) + \tau \frac{\partial}{\partial \tau} (\bar{Q}_{phon}(E, \vec{\Omega}; \tau)) \Bigg|_{\tau=0} \end{aligned} \quad (1.35)$$

Несложные, но достаточно громоздкие вычисления позволяют оценить отношение второго члена к первому неравенством вида

$$\left| \tau \frac{\partial}{\partial \tau} (\bar{Q}_{phon}(E, \bar{\Omega}; \tau)) \right|_{\tau=0} / \bar{Q}_{phon}(E, \bar{\Omega}; 0) \leq 10^{-4} \quad (1.36)$$

и ограничиться первым членом для определения величины $\bar{Q}_{phon}$. Сравнение $\bar{Q}_{phon}$ с $\bar{Q}_{ion}$ показывает, что потери энергии на ионизацию на три-четыре порядка превосходят потери на генерацию фононов.

Полученные оценки показывают, что для электронов с энергиями порядка нескольких десятков кэВ основным механизмом потерь энергии является процесс ионизации, а перераспределение по углам происходит в основном за счет упругого взаимодействия электронов с атомами. Таким образом, дифференциальное сечение рассеяния может быть приближенно представлено в виде

$$\frac{d^2 \sigma(E, \bar{\Omega}, E', \bar{\Omega}')}{dE d\Omega} \approx \frac{d\sigma_{el}(E, \bar{\Omega}, \bar{\Omega}')}{d\Omega} \delta(E' - E) + \frac{d\sigma_{in}(E, E - E')}{dQ} \delta(\bar{\Omega}' - \bar{\Omega}), \quad (1.37)$$

где $\frac{d\sigma_{el}(E, \bar{\Omega}, \bar{\Omega}')}{d\Omega}$ задается формулой (1.6), а $\frac{d\sigma_{in}(E, E - E')}{dQ}$ - формулой (1.22).

Как уже отмечалось, зависимость дифференциального сечения упругого рассеяния от угла рассеяния характеризуется наличием пика в окрестности малых углов рассеяния. Ширина этого пика является величиной порядка 2β . Пикообразный характер имеет и зависимость дифференциального сечения неупругого рассеяния $\frac{d\sigma_{in}(E, Q)}{dQ}$ от потери энергии Q в окрестности среднего потенциала ионизации. Масштаб этого пика характеризуется отношением J/E . Эти особенности упругого и неупругого рассеяния электронов средних энергий приводят к тому, что длины свободного пробега по упругим $l_{el} = 1/(N\Sigma_{el})$ и неупругим $l_{in} = 1/(N\Sigma_{in})$ столкновениям не являются определяющими длинами процесса релаксации электронов в целом. Длина угловой релаксации электронов определяется транспортным свободным пробегом по импульсу λ , а полная длина пути электрона характеризуется величиной пробега s . Используя формулы (1.6), (1.22), можно найти выражения для длин l_{el} , l_{in} , λ , s :

$$l_{el}(E) \approx \frac{4E^2 \beta^2}{N\pi Z^2 e^4}, \quad (1.38)$$

$$l_{in}(E) \approx \frac{7EJ}{5N\pi Z e^4 \ln\left(\frac{E}{J} \frac{e}{2}\right)}, \quad (1.39)$$

$$\lambda \approx \frac{2E^2}{N\pi Z^2 e^4 (\ln(1/\beta^2) - 1)}, \quad (1.40)$$

$$s \approx \frac{E^2}{2N\pi Ze^4 \ln\left(\frac{E}{J} \frac{e}{2}\right)} . \quad (1.41)$$

Из (1.38) – (1.41) видно, что $l_{el} \ll \lambda$, $l_{in} \ll s$ при $E \gg J$, отношение l_{el}/l_{in} ведет себя как $Z^{-4/3}$ при $E \gg J$ и является величиной порядка 0.02 для $E = 10$ кэВ и $Z = 50$. Отношение $l_{in}/\lambda \propto Z^2/E$ зависит от соотношения между энергией электрона и атомным номером рассеивателя и может оказаться большим при больших атомных номерах. Отношение λ к полному пробегу s для нескольких значений E и Z приведено в таблице 1.1. Как видно из таблицы, величина λ/s имеет порядок $1/Z$ и слабо зависит от энергии.

Z	E	20	30	50	70	79
	10	0.164	0.100	$0.550 \cdot 10^{-1}$	$0.364 \cdot 10^{-1}$	$0.315 \cdot 10^{-1}$
кэВ						
	20	0.168	0.105	$0.582 \cdot 10^{-1}$	$0.399 \cdot 10^{-1}$	$0.343 \cdot 10^{-1}$
кэВ						
	30	0.170	0.107	$0.601 \cdot 10^{-1}$	$0.408 \cdot 10^{-1}$	$0.356 \cdot 10^{-1}$
кэВ						
	50	0.172	0.110	$0.618 \cdot 10^{-1}$	$0.426 \cdot 10^{-1}$	$0.373 \cdot 10^{-1}$
кэВ						
	10	0.176	0.112	$0.641 \cdot 10^{-1}$	$0.444 \cdot 10^{-1}$	$0.387 \cdot 10^{-1}$
0 кэВ						

Таблица 1.1 Отношение длины транспортного пробега к полному пробегу, λ/s

Как известно, наличие существенно различных характерных длин позволяет отнести задачу к классу многомасштабных задач. С этой точки зрения уже одного соотношения между длиной свободного пробега и полным пробегом электрона достаточно для выявления многомасштабности кинетического уравнения для электронов средних энергий. Однако, как показывает проведенный анализ, задача кинетики электронов осложнена наличием четырех характерных длин, между которыми возможны различные соотношения. В частности, в веществах с большим атомным номером для энергий электронов порядка 10 кэВ все эти длины оказываются существенно различными и выстраиваются в цепочку $l_{el} \ll l_{in} \ll \lambda \ll s$.

Установленная многомасштабность процесса переноса электронов позволяет утверждать, что кинетическое уравнение, записанное в безразмерных длинах, содержит некоторое число малых параметров. Естественным подходом к решению таких задач является метод возмущений.

Пикообразный характер дифференциального сечения рассеяния дает возможность упростить интеграл столкновений кинетического уравнения и заменить его дифференциальным оператором. Степенной характер убывания сечения при удалении от пика приводит к появлению дополнительных интегральных операторов при выполнении корректного асимптотического разложения по малым параметрам, определяющим пикообразность сечения. Рассмотрению асимптотического преобразования интеграла столкновений посвящены следующие два параграфа этой главы.

1.2 Исследование собственных чисел упругой части интеграла столкновений

Проведенный в предыдущем параграфе анализ показал, что дифференциальное сечение рассеяния может быть представлено в виде (1.37), и, следовательно, весь интеграл столкновений может быть разбит на сумму упругой и неупругой части

$$\hat{I}(\Phi) = \hat{I}_{el}(\Phi) + \hat{I}_{in}(\Phi) \quad (1.42)$$

$$\hat{I}_{el}(\Phi) = N \int_{4\pi} \frac{d\sigma_{el}(E, \vec{\Omega}, \vec{\Omega}')}{d\Omega} \Phi(E, \vec{\Omega}') d\vec{\Omega}' - N \Sigma_{el}(E) \Phi(E, \vec{\Omega}) \quad (1.43)$$

$$\hat{I}_{in}(\Phi) = N \int_0^\infty \frac{d\sigma_{in}(E+Q, Q)}{dQ} \Phi(E+Q) dQ - N \Sigma_{in}(E) \Phi(E, \vec{\Omega}) \quad (1.44)$$

Особенности процесса упругого взаимодействия электронов с веществом позволяют провести существенное упрощение задачи. Вследствие преимущественного рассеяния электронов на малые углы упругую часть интеграла столкновений можно свести к дифференциальному оператору. Вывод дифференциального приближения проводится обычно по аналогии с асимптотической оценкой интегралов с δ -образным ядром методом Лапласа. Однако для корректности такой процедуры требуется экспоненциальное убывание дифференциального сечения при удалении от пика. Убывание же сечения упругого рассеяния быстрых электронов носит степенной характер. Это обуславливает необходимость использования метода последовательного разложения ядра и функции нагрузки [53] для получения корректной асимптотической оценки. С помощью этой методики в [31] было выполнено разложение упругой части интеграла столкновений. В результате, кроме обычного оператора Лапласа по угловым переменным, был получен интегральный член, который может быть интерпретирован как оператор рассеяния на большие углы.

Процедура разложения интеграла столкновения $\hat{I}_{el}(\Phi)$, выполненная в [31], оказалась достаточно трудоемкой и не выявила структуру оператора рассеяния на большие углы. Существенно более экономным является подход, основанный на разложении собственных чисел интеграла столкновений, который был реализован в [72]. С его помощью удастся легко получить первый член разложения и найти собственные числа оператора рассеяния на большие углы. Кроме того, сравнение спектра интеграла столкновений со спектром первых членов асимптотического разложения позволяет выявить пределы применимости модели.

В качестве дифференциального сечения упругого рассеяния будем использовать Резерфордовское сечение (1.6). В том случае, когда дифференциальное сечение рассеяния зависит от угла рассеяния, т.е. от скалярного произведения $(\vec{\Omega}, \vec{\Omega}')$, собственными функциями интеграла столкновений являются сферические гармоники $Y_{l,m}^i(\theta, \varphi)$, а собственные числа при этом зависят только от индекса l . Для доказательства этого факта достаточно разложить зависимость дифференциального сечения рассеяния от угла рассеяния в ряд по полиномам Лежандра и воспользоваться теоремой сложения для присоединенных функций Лежандра (см., например [73]). В случае Резерфордовского сечения нормированное дифференциальное сечение $g_{el}(\cos \vartheta) = \frac{1}{\Sigma_{el}(E)} \frac{d\sigma_{el}(E, \vec{\Omega}, \vec{\Omega}')}{d\Omega}$ имеет вид

$$g_{el}(\cos \vartheta) = \frac{\beta^2(1 + \beta^2)}{\pi(1 + 2\beta^2 - \cos \vartheta)^2}. \quad (1.45)$$

Здесь и далее будем опускать аргумент E . Легко показать, что коэффициенты a_l^{el} разложения $g_{el}(\cos \vartheta)$ по полиномам Лежандра выражаются через производную от функций Лежандра второго рода $Q_n(x)$:

$$\begin{aligned} a_l^{el} &= \int_{4\pi} g_{el}(\cos \vartheta) P_l(\cos \vartheta) d\Omega = \beta^2(1 + \beta^2) \cdot 2 \int_{-1}^1 \frac{P_l(u) du}{(1 + 2\beta^2 - u)^2} = \\ &= -4\beta^2(1 + \beta^2) \cdot \frac{d}{dx} Q_l(x) \Big|_{x=1+2\beta^2} \end{aligned} \quad (1.46)$$

Функции Лежандра удовлетворяют рекуррентным соотношениям

$$lQ_l(x) = xQ_l'(x) - Q_{l-1}(x) \quad (1.47)$$

$$(l+1)Q_l(x) = -xQ_l'(x) - Q_{l+1}'(x). \quad (1.48)$$

Для коэффициентов a_l^{el} отсюда легко получить

$$la_{l+1}^{el} = (2l+1)(1 + 2\beta^2)a_l^{el} - (n+1)a_{l-1}^{el}, \quad l \geq 1 \quad (1.49)$$

Вычисляя интеграл в (1.46) при $l = 0, 1$, найдем

$$a_0^{el} = 1$$

$$a_1^{el} = 1 + 2\beta^2 \ln \frac{\beta^2}{1 + \beta^2} + 2\beta^2 + 2\beta^4 \ln \frac{\beta^2}{1 + \beta^2} \quad (1.50)$$

Из (1.49), (1.50) следует, что коэффициент a_l^{el} может быть представлен в виде

$$a_l^{el} = \sum_{m=0}^l K_l^m (2\beta^2)^m + \sum_{m=0}^l P_l^m (2\beta^2)^{m+1} \ln \frac{\beta^2}{1 + \beta^2} \quad (1.51)$$

Подставляя это выражение в рекуррентное соотношение (1.49) и равенства (1.50), найдем рекуррентные соотношения и начальные условия для коэффициентов K_l^0 , P_l^0 . Они имеют вид

$$\begin{cases} lK_{l+1}^0 = (2l+1)K_l^0 - (l+1)K_{l-1}^0 & l \geq 1 \\ K_0^0 = 1, & K_1^0 = 1 \end{cases} \quad (1.52)$$

$$\begin{cases} lP_{l+1}^0 = (2l+1)P_l^0 - (l+1)P_{l-1}^0 & l \geq 1 \\ P_0^0 = 1, & P_1^0 = 1 \end{cases} \quad (1.53)$$

Коэффициенты K_n^m , P_n^m определяются из соотношений вида

$$\begin{cases} lK_{l+1}^m = (2l+1)(K_l^m + K_l^{m-1}) - (l+1)K_{l-1}^m & l \geq m+1 \\ K_m^m = \frac{2m-1}{m-1} K_{m-1}^{m-1}, & K_{m+1}^m = \frac{2m+1}{m} (K_m^m + K_m^{m-1}) \end{cases} \quad (1.54)$$

$$\begin{cases} lP_{l+1}^m = (2l+1)(P_l^m + P_l^{m-1}) - (l+1)P_{l-1}^m & l \geq m+1 \\ P_m^m = \frac{2m-1}{m-1} P_{m-1}^{m-1}, & P_{m+1}^m = \frac{2m+1}{m} (P_m^m + P_m^{m-1}) \end{cases} \quad (1.55)$$

Система разностных уравнений (1.52) - (1.55) позволяет последовательно определить все K_l^m , P_l^m . Из однородных разностных уравнений (1.52), (1.53) находим

$$K_l^0 = 1, \quad P_l^0 = l(l+1)/2, \quad (1.56)$$

что дает возможность построить фундаментальное решение неоднородных уравнений и найти

$$K_l^1 = \frac{l(l+1)}{2} (2S_l + 1), \quad S_l = \sum_{k=2}^l \frac{1}{k} \quad (1.57)$$

Подставляя найденные значения K_l^0 , P_l^0 , K_l^1 в (1.51), для собственных чисел χ_l интеграла столкновений с точностью до членов порядка $O(\beta^4 \ln \beta)$ получим

$$\begin{aligned} \chi_l &= N \Sigma_{el} (a_l^{el} - 1) = \\ &= N \Sigma_{el} \left(2\beta^2 \ln \frac{\beta^2}{1 + \beta^2} \cdot \frac{l(l+1)}{2} + 2\beta^2 \cdot \frac{l(l+1)}{2} (2S_l + 1) + O(\beta^4 \ln \beta) \right) \end{aligned} \quad (1.58)$$

Обозначим через $\hat{J}_{el}^1(\Phi)$ оператор, имеющий собственные значения $\frac{l(l+1)(2S_l+1)}{2}$.

Тогда, учитывая, что собственные числа оператора Лапласа есть $-l(l+1)$, можно написать разложение интеграла столкновений в виде

$$\hat{I}_{el}(\Phi) = N\Sigma_{el} \left[\beta^2 \ln \frac{1+\beta^2}{\beta^2} \Delta\Phi + 2\beta^2 \hat{J}_{el}^1(\Phi) + O(\beta^4 \ln \beta) \right], \quad \beta \rightarrow 0 \quad (1.59)$$

Отметим, что главный член разложения (1.59) определяет порядок интеграла столкновений, который оказывается равным $1/\lambda$. Таким образом, именно длина транспортного свободного пробега по импульсу оказывается характерной для процесса угловой релаксации.

Сравнение (1.59) с разложением, полученным в [31], дает возможность связать оператор $\hat{J}_{el}^1(\Phi)$ с оператором рассеяния на большие углы¹

$$J(\Phi) = \iint q^{-4} \left[\Phi(\mathcal{G}', \varphi') - \Phi(\mathcal{G}, \varphi) - \mathcal{G}_x \frac{\partial \Phi(\mathcal{G}, \varphi)}{\partial \mathcal{G}_x} - \mathcal{G}_y \frac{\partial \Phi(\mathcal{G}, \varphi)}{\partial \mathcal{G}_y} - \frac{\mathcal{G}_x^2}{2} \frac{\partial^2 \Phi(\mathcal{G}, \varphi)}{\partial \mathcal{G}_x^2} - \frac{\mathcal{G}_y^2}{2} \frac{\partial^2 \Phi(\mathcal{G}, \varphi)}{\partial \mathcal{G}_y^2} - \mathcal{G}_x \mathcal{G}_y \frac{\partial^2 \Phi(\mathcal{G}, \varphi)}{\partial \mathcal{G}_x \partial \mathcal{G}_y} \right] \sin \mathcal{G}' d\mathcal{G}' d\varphi' = \pi \left(\frac{1}{2} \hat{J}_{el}^1(\Phi) + \frac{1}{4} \Delta\Phi \right) \quad (1.60)$$

и определить собственные числа оператора $J(\Phi)$, которые оказываются равными $l(l+1)\pi S_l/2$. Полученные результаты позволяют сравнить спектр интеграла столкновений со спектром аппроксимирующих его операторов

$$\hat{I}_{el}^0(\Phi) = N\Sigma_{el} \beta^2 \ln \frac{1+\beta^2}{\beta^2} \cdot \Delta\Phi, \quad (1.61)$$

$$\hat{I}_{el}^1(\Phi) = N\Sigma_{el} \left(\beta^2 \ln \frac{1+\beta^2}{\beta^2} \cdot \Delta\Phi + 2\beta^2 \hat{J}_{el}^1(\Phi) \right). \quad (1.62)$$

Пользуясь формулами (1.46), (1.58) можно найти несколько первых собственных чисел операторов $\hat{I}_{el}$, $\hat{I}_{el}^0$, $\hat{I}_{el}^1$. Зависимость их от номера l для $\beta = 0.025$ и $\beta = 0.005$ приведена на рисунке 1.1. Из рисунка видно, что учет второго члена разложения в (1.59) существенно улучшает аппроксимацию спектра интеграла столкновений, даваемую диффузионным приближением при $l \leq 10$.

Поведение спектра операторов $\hat{I}_{el}^0$, $\hat{I}_{el}^1$ при $l \rightarrow \infty$ очевидно из (1.58): собственные числа $\hat{I}_{el}^0$ неограниченно убывают, а собственные числа $\hat{I}_{el}^1$ неограниченно растут. В то же время, можно показать, что собственные числа интеграла столкновений $\hat{I}_{el}$ монотонно убывают от 0 до $-N\Sigma_{el}$ и их асимптотика при больших l есть

¹ В этом выражении использованы обозначения работы [31].

$$\chi_l = N\Sigma_{el} \left(2\beta^2(1+\beta^2) \sqrt{\frac{\pi}{2l}} \frac{(1+2\beta^2-2\beta\sqrt{1+\beta^2})^{+1/2}}{(4\beta^2(1+\beta^2))^{3/4}} \left(\frac{1+2\beta^2}{2\beta\sqrt{1+\beta^2}} + 2l+1 \right) - 1 \right), \quad (1.63)$$

$$l \rightarrow \infty$$

Это показывает, что спектры операторов $\hat{I}_{el}^0$, $\hat{I}_{el}^1$ годятся для приближенного описания спектра интеграла столкновений лишь при небольших l , и, следовательно, аппроксимация интеграла столкновений первыми членами разложения по малому параметру β применима для достаточно гладких функций распределения. Для δ -образных функций распределения необходимо пользоваться другой приближенной моделью – моделью малоуглового приближения, в которой интеграл столкновений распространен на всю числовую ось и соответствующий оператор имеет непрерывный спектр.

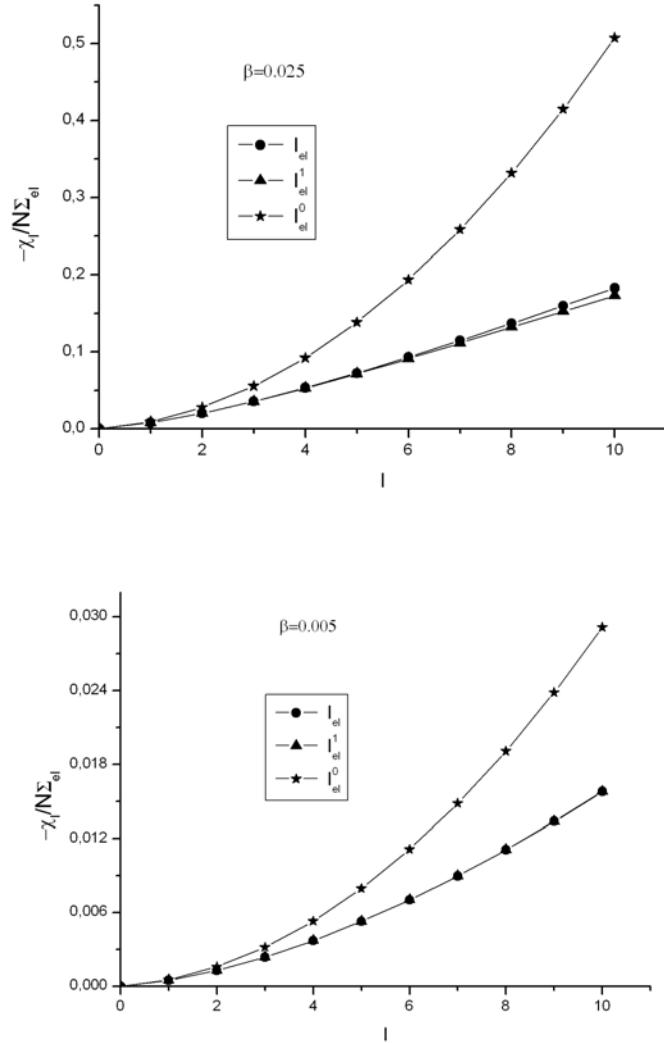


Рисунок 1.1 Поведение спектров интеграла столкновений $\hat{I}_{el}$ и операторов $\hat{I}_{el}^0$, $\hat{I}_{el}^1$ при $\beta = 0.025$ и $\beta = 0.005$.

1.3 Асимптотическое преобразование неупругой части интеграла столкновений

Как следует из анализа дифференциального сечения неупругого рассеяния, электрон при взаимодействии с атомом рассеивается преимущественно с малыми потерями энергии, что позволяет упростить и неупругую часть интеграла столкновений, заменяя ее дифференциальным приближением. Однако, как и в случае упругого рассеяния, неупругое дифференциальное сечение при удалении от пика убывает степенным образом, и для получения правильного асимптотического разложения вновь необходимо использовать метод последовательного разложения ядра и функции нагрузки. Этот метод был применен для преобразования неупругой части интеграла столкновений, описывающей потери на ионизацию, Кузюком В.А. и Рахматулиной А.Х. [32], однако в их работе не была учтена зависимость дифференциального сечения от медленной переменной. Вследствие этого для полученного приближенного кинетического уравнения не выполнялся закон сохранения числа частиц. В этом параграфе изложены основные результаты работы [74], в которой способ асимптотического разложения интегралов с δ -образным ядром, убывающим степенным образом, обобщается на случай зависимости ядра от медленной переменной и полученные формулы используются для выполнения корректного разложения неупругой части интеграла столкновений.

Рассмотрим задачу о вычислении асимптотики интегралов вида

$$I(\varepsilon) = \int_0^1 \omega\left(x, \frac{x}{\varepsilon}\right) f(x) dx, \quad (1.64)$$

где ядро $\omega(x, \xi)$ интегрируемо на любом конечном интервале и при $\xi \rightarrow \infty$ имеет асимптотику вида

$$\omega(x, \xi) = \frac{q_1(x, \xi)}{\xi} + \frac{q_2(x, \xi)}{\xi^2} + \dots \quad (1.65)$$

Действуя по аналогии с методом работы [53], имеем

$$\begin{aligned} I(\varepsilon) &= f(0) \int_0^1 \omega(0, \frac{x}{\varepsilon}) dx + \int_0^1 \left[\omega(x, \frac{x}{\varepsilon}) f(x) - \omega(0, \frac{x}{\varepsilon}) f(0) \right] dx = \\ &= f(0) \int_0^1 \omega(0, \frac{x}{\varepsilon}) dx + \varepsilon \int_0^1 \frac{1}{x} \left[\omega(x, \frac{x}{\varepsilon}) - \omega(0, \frac{x}{\varepsilon}) \right] \frac{x}{\varepsilon} f(x) dx + \varepsilon \int_0^1 \omega(0, \frac{x}{\varepsilon}) \frac{x}{\varepsilon} \frac{f(x) - f(0)}{x} dx = \\ &= \varepsilon f(0) \int_0^1 \omega(0, \frac{x}{\varepsilon}) \frac{dx}{\varepsilon} + \varepsilon \int_0^1 \frac{1}{x} \left(q_1(x, \frac{x}{\varepsilon}) - q_1(0, \frac{x}{\varepsilon}) \right) f(x) dx + \varepsilon \int_0^1 q_1(0, \frac{x}{\varepsilon}) \frac{f(x) - f(0)}{x} dx + \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& + \varepsilon \int_0^1 \left[\frac{1}{x} \left(\omega(x, \frac{x}{\varepsilon}) - \omega(0, \frac{x}{\varepsilon}) \right) \frac{x}{\varepsilon} - \frac{q_1(x, \frac{x}{\varepsilon}) - q_1(0, \frac{x}{\varepsilon})}{x} \right] f(x) dx + \\
& + \varepsilon \int_0^1 \left(\omega(0, \frac{x}{\varepsilon}) \frac{x}{\varepsilon} - q_1(0, \frac{x}{\varepsilon}) \right) \frac{f(x) - f(0)}{x} dx \quad (1.66)
\end{aligned}$$

Предпоследний интеграл имеет тот же вид, что и исходный, а асимптотика последнего члена может быть получена непосредственно по [53]. Повторно применяя указанный прием к предпоследнему члену и выделяя следующий член асимптотики в последнем интеграле, получим

$$\begin{aligned}
I(\varepsilon) = & \varepsilon \left\{ f(0) \int_0^1 \omega(0, \frac{x}{\varepsilon}) \frac{dx}{\varepsilon} + \int_0^1 \Phi_{1,1}(x, \frac{x}{\varepsilon}) dx \right\} + \varepsilon^2 \left\{ \frac{\partial}{\partial x} \left[f(x) \int_0^1 \omega_1(x, \frac{x}{\varepsilon}) \frac{dx}{\varepsilon} \right] \right\}_{x=0} + \\
& + \int_0^1 \Phi_{2,2}(x, \frac{x}{\varepsilon}) dx \left\{ + \varepsilon^2 \left\{ \int_0^1 \left[\frac{1}{x^2} \left(\omega(x, \frac{x}{\varepsilon}) - \omega(0, \frac{x}{\varepsilon}) - \frac{\partial \omega(x, \frac{x}{\varepsilon})}{\partial x} \right) \cdot x \right] \left(\frac{x}{\varepsilon} \right)^2 - \right. \right. \\
& - \frac{1}{x^2} \left(q_1(x, \frac{x}{\varepsilon}) - q_1(0, \frac{x}{\varepsilon}) - \frac{\partial q_1(x, \frac{x}{\varepsilon})}{\partial x} \right) \cdot x \left. \frac{x}{\varepsilon} - \frac{1}{x^2} \left(q_2(x, \frac{x}{\varepsilon}) - q_2(0, \frac{x}{\varepsilon}) - \right. \right. \\
& \left. \left. - \frac{\partial q_2(x, \frac{x}{\varepsilon})}{\partial x} \right) \cdot x \right] f(x) dx + \int_0^1 \left[\frac{\partial \omega(x, \frac{x}{\varepsilon})}{\partial x} \left(\frac{x}{\varepsilon} \right)^2 - \frac{\partial q_1(x, \frac{x}{\varepsilon})}{\partial x} \left(\frac{x}{\varepsilon} \right) - \frac{\partial q_2(x, \frac{x}{\varepsilon})}{\partial x} \right]_{x=0} \times \\
& \times \frac{f(x) - f(0)}{x} dx + \int_0^1 \left[\omega(0, \frac{x}{\varepsilon}) \left(\frac{x}{\varepsilon} \right)^2 - q_1(0, \frac{x}{\varepsilon}) \frac{x}{\varepsilon} - q_2(0, \frac{x}{\varepsilon}) \right] \frac{1}{x^2} (f(x) - f(0) - f'(0)x) dx \left. \right\} \quad (1.67)
\end{aligned}$$

Здесь

$$\omega_1(x, \frac{x}{\varepsilon}) = \omega(x, \frac{x}{\varepsilon}) \frac{x}{\varepsilon} - q_1(x, \frac{x}{\varepsilon}) \quad (1.68)$$

$$\Phi_{1,1}(x, \xi) = \frac{1}{x} (q_1(x, \xi) f(x) - q_1(0, \xi) f(0)) \quad (1.69)$$

$$\Phi_{2,2}(x, \xi) = \frac{1}{x^2} (q_2(x, \xi) f(x) - q_2(0, \xi) f(0) - \frac{\partial}{\partial x} (q_2(x, \xi) f(x)) \Big|_{x=0} \cdot x) \quad (1.70)$$

Дальнейшее применение описанного алгоритма приводит к асимптотическому разложению

$$I(\varepsilon) = \sum_{i=0}^m \varepsilon^{i+1} \left\{ \frac{1}{i!} \frac{\partial^i}{\partial x^i} \left[f(x) \int_0^1 \omega_i \left(x, \frac{x}{\varepsilon} \right) \frac{dx}{\varepsilon} \right] \right\}_{x=0} + \int_0^1 \Phi_{i+1, i+1} \left(x, \frac{x}{\varepsilon} \right) dx \Bigg\} + o(\varepsilon^{m+1}), \quad (1.71)$$

$$\varepsilon \rightarrow 0$$

где

$$\begin{aligned} \omega_0 \left(x, \frac{x}{\varepsilon} \right) &= \omega \left(x, \frac{x}{\varepsilon} \right) \\ \omega_i \left(x, \frac{x}{\varepsilon} \right) &= \omega_{i-1} \left(x, \frac{x}{\varepsilon} \right) \frac{x}{\varepsilon} - q_i \left(x, \frac{x}{\varepsilon} \right), \quad i = 1, \dots, m; \\ \Phi_{j,0} \left(x, \xi \right) &= q_j \left(x, \xi \right) f(x); \quad j = 1, \dots, m+1 \\ \Phi_{j,k} \left(x, \xi \right) &= \frac{1}{x} (\Phi_{j,k-1} \left(x, \xi \right) - \Phi_{j,k-1} \left(0, \xi \right)); \quad k = 1, \dots, j \end{aligned} \quad (1.72)$$

Полученное выражение обобщает формулу для асимптотического разложения интеграла с ядром, убывающим степенным образом, на случай зависимости ядра от медленной переменной.

Используем полученный результат для преобразования неупругой части интеграла столкновений, описывающей потери энергии на ионизацию².

$$\hat{I}_{in}(\Phi) = N \int_0^\infty \frac{d\sigma_{in}(E+Q, Q)}{dQ} \Phi(E+Q) dQ - \Phi(E) N \int_0^E \frac{d\sigma_{in}(E, Q)}{dQ} dQ. \quad (1.73)$$

Рассмотрим вначале $\hat{I}_{in}(\Phi)$ в области энергий, существенно превосходящих энергию связи электронов в атоме. Перейдем в (1.73) к безразмерным величинам, выбирая в качестве масштаба по энергии характерную энергию быстрых электронов E_0 , а в качестве масштаба длины – длину полного пробега s . Наиболее вероятной является потеря энергии порядка среднего потенциала ионизации атома J , что в безразмерных переменных составляет величину $J/E_0 = \varepsilon \sim 10^{-3} - 10^{-2}$ при энергии электронов порядка 100keV. Поэтому зависимость дифференциального сечения от потерь энергии в окрестности пика описывается быстрой переменной и $\hat{I}_{in}(\Phi)$ в безразмерном виде можно записать

$$\begin{aligned} \hat{I}_{in}(\Phi) &= \int_0^\infty \alpha \omega \left(E + Q, \frac{Q}{\varepsilon} \right) \Phi(E+Q) dQ - \Phi(E) \int_0^E \alpha \omega \left(E, \frac{Q}{\varepsilon} \right) dQ \\ \alpha &= \frac{N\pi Z e^4 s}{E_0}, \quad \omega \left(E, \frac{Q}{\varepsilon} \right) = \frac{E_0^3}{\pi Z e^4} \frac{d\sigma_{in}(E, Q)}{dQ} \end{aligned} \quad (1.74)$$

² Здесь и далее в этом параграфе угловые и пространственные переменные опущены.

При потерях $Q \gg \varepsilon$ можно считать, что рассеяние происходит на Z свободных электронах, и, используя в качестве $\frac{d\sigma_{in}(E, Q)}{dQ}$ классическое бинарное сечение, найти асимптотику для ядра ω

$$\omega(E, \frac{Q}{\varepsilon}) = \frac{1}{\varepsilon^2} \left[\frac{1}{E \left(\frac{Q}{\varepsilon} \right)^2} + o \left(\left(\frac{Q}{\varepsilon} \right)^{-2} \right) \right], \quad \varepsilon \rightarrow 0 \quad (1.75)$$

Разобьем область интегрирования в первом члене в (1.74) на промежутки $[0, E)$ и $[E, \infty)$. Используя формулу (1.71) для интеграла по первому промежутку, найдем

$$\begin{aligned} \int_0^E \omega(E+Q, \frac{Q}{\varepsilon}) \Phi(E+Q) dQ &= \Phi(E) \int_0^E \omega(E, \frac{Q}{\varepsilon}) dQ + \Phi(E) \int_0^E Q \frac{\partial \omega(E, \frac{Q}{\varepsilon})}{\partial E} dQ + \\ &+ \frac{\partial \Phi}{\partial E} \int_0^E \omega(E, \frac{Q}{\varepsilon}) Q dQ + \int \left(\frac{\Phi(E+Q)}{E+Q} - \frac{\Phi(E)}{E} - \frac{\partial}{\partial E} \left(\frac{\Phi(E)}{E} \right) Q \right) \cdot Q^{-2} dQ + O(\varepsilon) \end{aligned} \quad (1.76)$$

$\varepsilon \rightarrow 0$

Асимптотика интеграла по промежутку $[E, \infty)$ может быть получена подстановкой асимптотики ядра (1.75) в интеграл. Для средних потерь энергии $\bar{Q}(E)$ в рассматриваемом диапазоне энергий может быть использована формула Бете (1.17). Учитывая, что $\frac{\bar{Q}(E)}{\bar{Q}(E_0)} = \alpha \int_0^E \omega(E, \frac{Q}{\varepsilon}) Q dQ$, вычисляя $\alpha = -\frac{1}{2 \ln(\varepsilon/1.166)}$ и отделяя в $\bar{Q}(E)/\bar{Q}(E_0)$ члены порядка $O(1/\ln \varepsilon)$, окончательно получим

$$\begin{aligned} \hat{I}_{in}(\Phi) &= \frac{\partial}{\partial E} \left(\frac{\Phi(E)}{E} \right) - \frac{1}{2 \ln \frac{\varepsilon}{1.166}} \left[2 \frac{\partial}{\partial E} \left(\frac{\Phi(E)}{E} \ln E \right) + \right. \\ &+ \left. \int_0^E \left(\frac{\Phi(E+Q)}{E+Q} - \frac{\Phi(E)}{E} - \frac{\partial}{\partial E} \left(\frac{\Phi(E)}{E} \right) Q \right) \cdot Q^{-2} dQ + \int_E^\infty \frac{\Phi(E+Q)}{(E+Q)Q^2} dQ - \frac{\Phi(E)}{E^2} \right] + O(\varepsilon) \end{aligned} \quad (1.77)$$

$\varepsilon \rightarrow 0$

Отметим, что порядок величины неупругой части интеграла столкновений определяется главным членом разложения (1.77) и в размерных переменных совпадает с $1/s$. Это означает, что длина полного пробега электрона s является характерной длиной энергетической релаксации.

Из разложения (1.77) видно, что в первом приближении выражение для интеграла столкновений совпадает с обычно используемым приближением непрерывных потерь.

Однако, как уже указывалось в работе [32], степенное убывание ядра при удалении от пика приводит к тому, что следующий член асимптотического разложения $\hat{I}_{in}(\Phi)$ имеет порядок $1/\ln \varepsilon$. Для разложения (1.77) выполняется закон сохранения числа частиц, что легко доказывается интегрированием по E и сменой порядка интегрирования в двойных интегралах. Отметим, что использование формулы Бете для средних потерь не является необходимым в первом приближении, так как использование более простой формулы $\bar{Q}(E) \sim 1/E$ вносит погрешность того же порядка, что и отброшенные члены.

Асимптотическое разложение интеграла столкновений может быть получено и для энергий порядка энергии связи электронов на внутренних оболочках. В этом случае дифференциальное сечение рассеяния можно представить в виде

$$\frac{d\sigma_{in}(E, Q)}{dQ} = \frac{d\sigma_{in}^0(E, Q)}{dQ} + \sum_{k=1}^n \frac{d\sigma_{in}^k(E, Q)}{dQ} \cdot \theta(Q - I_k), \quad (1.78)$$

где $\frac{d\sigma_{in}^k(E, Q)}{dQ}$ - дифференциальное сечение ионизации k -ой внутренней оболочки с потенциалом ионизации I_k ($k = 1, \dots, n$), $\frac{d\sigma_{in}^0(E, Q)}{dQ}$ - дифференциальное сечение ионизации с внешних оболочек. Для электронов на внешних оболочках можно ввести эффективный потенциал ионизации $J_0 \ll E_0$, в окрестности которого дифференциальное сечение $\frac{d\sigma_{in}^0(E, Q)}{dQ}$ имеет пик. Запишем, как и раньше, интеграл столкновений в безразмерном виде

$$\begin{aligned} \hat{I}_{in}(\Phi) = & \alpha^0 \int_0^\infty \omega^0(E + Q, \frac{Q}{\varepsilon}) \Phi(E + Q) dQ - \alpha^0 \Phi(E) \int_0^E \omega^0(E, \frac{Q}{\varepsilon}) dQ + \\ & + \sum_{k=1}^n \alpha^k \left(\int_0^\infty \omega^k(E + Q, \frac{Q}{\varepsilon}) \Phi(E + Q) dQ - \Phi(E) \int_0^E \omega^k(E, \frac{Q}{\varepsilon}) dQ \right), \\ \alpha^0 = & \frac{N\pi Z_0 e^4 S}{E_0}, \quad \omega^0(E, \frac{Q}{\varepsilon}) = \frac{E_0^3}{\pi Z_0 e^4} \frac{d\sigma_{in}^0(E, Q)}{dQ} \end{aligned} \quad (1.79)$$

$$\alpha^k = \frac{\bar{Q}^k(E_0)}{\bar{Q}(E_0)}, \quad \omega^k(E, Q) = \frac{E_0^2}{\bar{Q}^k(E_0)} \frac{d\sigma_{in}^k(E, Q)}{dQ} \cdot \theta(Q - I_k).$$

Здесь Z_0 - число электронов на внешних оболочках, $\bar{Q}^k(E_0) = \int_{I_k}^{E_0} \frac{d\sigma_{in}^k(E_0, Q)}{dQ} Q dQ$ - средние

потери энергии, вызванные ионизацией k -ой внутренней оболочки. Если потери энергии при

взаимодействии $Q \gg \varepsilon = \frac{J_0}{E_0}$, то внешние электроны можно считать свободными, и в качестве асимптотики $\omega^0(E, \frac{Q}{\varepsilon})$ использовать бинарное сечение (1.12). Таким образом, часть интеграла столкновений, описывающая ионизацию с внешних оболочек, имеет тот же вид, что и интеграл столкновений (1.74), и может быть преобразован аналогично. Считая, что потери при ионизации с внешних оболочек описываются формулой Бете, для средних потерь $\bar{Q}(E)$ найдем

$$\bar{Q}(E) = \frac{2\pi Z_0 e^4}{E} \ln \frac{1.166 \cdot E}{J_0} + \sum_{k=1}^n \bar{Q}^k(E) = \bar{Q}^0(E) + \sum_{k=1}^n \bar{Q}^k(E) \quad (1.80)$$

Учитывая, что

$$\alpha^0 \int_0^E \omega^0(E, \frac{Q}{\varepsilon}) Q dQ = \frac{\bar{Q}^0(E)}{\bar{Q}(E_0)}$$

и выделяя в $\bar{Q}^0(E)/\bar{Q}(E_0)$ и в α^k члены порядка $O(1/\ln \varepsilon)$, получим асимптотическое разложение $\hat{I}_{in}(\Phi)$:

$$\begin{aligned} \hat{I}_{in}(\Phi) = & \frac{\partial}{\partial E} \left(\frac{\Phi(E)}{E} \right) - \frac{1}{2 \ln(\varepsilon/1.166)} \cdot \left[2 \frac{\partial}{\partial E} \left(\Phi(E) \left(\frac{\ln E}{E} - \sum_{k=1}^n \gamma^k \right) \right) - \frac{\Phi(E)}{E^2} + \right. \\ & + \int_0^E \left(\frac{\Phi(E+Q)}{E+Q} - \frac{\Phi(E)}{E} - \frac{\partial}{\partial E} \left(\frac{\Phi(E)}{E} \right) Q \right) Q^{-2} dQ + \int_E^\infty \frac{\Phi(E+Q)}{(E+Q)Q^2} dQ + \\ & \left. + 2 \sum_{k=1}^n \gamma^k \left(\int_0^\infty \omega^k(E+Q, Q) \Phi(E+Q) dQ - \Phi(E) \int_0^E \omega^k(E, Q) dQ \right) \right] + O(\varepsilon), \quad \varepsilon \rightarrow 0, \end{aligned} \quad (1.81)$$

где $\gamma^k = \frac{\bar{Q}^k(E_0)E_0}{2\pi Z_0 e^4}$.

Первое приближение интеграла столкновений и в этом случае совпадает с приближением непрерывных потерь. Вклад в интеграл столкновений от взаимодействия с электронами внутренних оболочек оказывается в $\ln \varepsilon$ раз меньше вклада, обусловленного взаимодействием с внешними электронами. Как и в случае $E_0 \gg I_k$, для разложения (1.81) выполняется закон сохранения числа частиц.

1.4 Асимптотическое расщепление кинетического уравнения для электронов средних энергий в тяжелых мишенях

Как отмечено в параграфе 1.1, задача кинетики электронов средних энергий, распространяющихся в веществе, является многомасштабной. Длинами, характеризующими процесс релаксации в целом, являются транспортный свободный пробег по импульсу (длина изотропизации) $\lambda(E)$ и полный пробег $s(E)$, зависящие от энергии электрона E . Эти величины существенно превосходят длины свободного пробега по упругим $l_{in}(E)$ и неупругим $l_{el}(E)$ столкновениям. Как и в кинетической теории газов, в задачах кинетики электронов возможен переход от кинетического уравнения к уравнениям сплошной среды в области глубин $z \gg \lambda(E)$, $z \gg s(E)$. Поскольку интеграл столкновений линейного кинетического уравнения сохраняет лишь число частиц, то из пяти уравнений сплошной среды остается лишь уравнение диффузии. Диффундировать в координатном пространстве будут частицы, обладающие почти изотропным распределением по углам и потерявшие почти всю энергию.

В области глубин $l_{el}(E) \ll z \sim \lambda(E)$, $l_{in}(E) \ll z \sim s(E)$ также возможно некоторое упрощение кинетического уравнения, поскольку интеграл столкновения может быть заменен дифференциальным приближением. В итоге вся область, в которой изучается распределение электронов, разбивается на несколько слоев: собственно кинетический, в котором эволюция функции распределения описывается кинетическим уравнением; слой, где может быть использовано дифференциальное приближение; область, в которой полное описание дается уравнением диффузии. Несмотря на упрощение, уравнение во втором слое остается достаточно сложным. Даже в том случае, когда не учитываются интегральные члены, описывающие немалые потери энергии и рассеяние на большие углы, оно представляет собой уравнение в частных производных по шести переменным, не относящееся ни к какому классическому типу. Однако для тяжелых мишеней, когда $\lambda(E) \ll s(E)$, возможно существенное упрощение задачи. Процесс релаксации электронов почти на всей глубине, кроме узкого приповерхностного слоя, может быть описан как диффузия в координатном пространстве, сопровождающаяся потерей энергии, а в приповерхностном слое можно воспользоваться приближением, в котором энергия считается почти постоянной, т.е. в этом случае возможно разделение процессов угловой и энергетической релаксации.

При переходе к безразмерным переменным с использованием в качестве масштаба длины величины $\sqrt{\lambda(E) \cdot s(E)}$ в кинетическом уравнении при производных по пространственным переменным появляется малый параметр, что позволяет отнести задачу переноса электронов к классу сингулярно возмущенных задач. Для корректного перехода от

полной модели к сокращенному описанию с помощью уравнений меньшей размерности необходимо воспользоваться общей схемой асимптотического расщепления многомасштабных задач, изложенной в [54]. Согласно этой схеме процесс отыскания асимптотического разложения решения многомасштабных задач может быть разбит на два итерационных процесса – основной итерационный процесс и нахождение погранслойных функций. В ходе основного итерационного процесса формулируются уравнения меньшей размерности, являющиеся условием разрешимости задач для коэффициентов асимптотического разложения решения по параметру малости задачи. Отыскание решений уравнений меньшей размерности позволяет найти и коэффициенты асимптотического разложения. Полученное в результате проведения основного итерационного процесса решение, вообще говоря, не удовлетворяет граничным условиям. В связи с этим оно должно быть дополнено погранслойными функциями, которые находятся во втором итерационном процессе. Сращивание внешнего и внутреннего разложений определяет граничные условия, необходимые для решения уравнений меньшей размерности. В настоящем параграфе проводится основной итерационный процесс по указанной схеме для кинетического уравнения, описывающего релаксацию электронов в тяжелых мишенях.

Процесс распространения электронов в веществе в отсутствии внутренних источников описывается кинетическим уравнением (1.3). Для отыскания дифференциальной плотности потока уравнение (1.3) должно быть дополнено граничным условием (1.5), задающим распределение падающих извне электронов. Как показано в параграфе 1.1, дифференциальное сечение рассеяния может быть приближенно представлено в виде суммы дифференциальных сечений упругого и неупругого рассеяния, что позволяет разбить интеграл столкновений на упругую, $\hat{I}_{el}\Phi$, и неупругую, $\hat{I}_{in}\Phi$, части, задаваемые формулами (1.43), (1.44), соответственно.

Выберем в качестве масштаба для координат величину $\sqrt{\lambda(E_0) \cdot s(E_0)}$, где E_0 – характерная энергия падающих на границу электронов. В безразмерных переменных кинетическое уравнение принимает вид

$$\delta \cdot \vec{\Omega} \cdot \nabla_{\vec{r}} \Phi = \lambda(E_0) \hat{I}_{el} \Phi + \delta^2 s(E_0) \hat{I}_{in} \Phi \quad (1.82)$$

В образцах с большим атомным номером параметр $\delta = \sqrt{\lambda(E_0)/s(E_0)}$ мал, а интегралы столкновений $\lambda(E_0) \hat{I}_{el} \Phi$, $s(E_0) \hat{I}_{in} \Phi$ являются величинами порядка единицы. Это позволяет искать решение в виде ряда

$$\Phi = \sum_{k=0}^{\infty} \Phi_k(\vec{r}, \vec{\Omega}, E) \cdot \delta^k \quad (1.83)$$

Подставляя ряд (1.83) в уравнение (1.82), получим цепочку уравнений для коэффициентов разложения $\Phi_k(\vec{r}, \vec{\Omega}, E)$:

$$\begin{aligned}\lambda(E_0)\hat{I}_{el}\Phi_0 &= 0 \\ \lambda(E_0)\hat{I}_{el}\Phi_1 &= \vec{\Omega} \cdot \nabla_{\vec{r}}\Phi_0 \\ \lambda(E_0)\hat{I}_{el}\Phi_2 &= \vec{\Omega} \cdot \nabla_{\vec{r}}\Phi_1 - s(E_0)\hat{I}_{in}\Phi_0 \\ &\dots\dots\dots\end{aligned}\tag{1.84}$$

Будем считать, что дифференциальное сечение упругого рассеяния сферически симметрично (зависит лишь от угла рассеяния). В этом случае, как показано в параграфе 1.2, собственными функциями оператора $\lambda(E_0)\hat{I}_{el}$ являются сферические гармоники $Y_{l,m}^i(\vec{\Omega})$, а собственными числами – величины $\nu_l = \lambda(E_0)\chi_l$, где χ_l задаются формулами

$$\chi_l = N\Sigma_{el}(E)(a_l^{el}(E) - 1),\tag{1.85}$$

и определяются коэффициентами разложения $a_l^{el}(E)$ дифференциального сечения упругого рассеяния по полиномам Лежандра. Собственному числу $\nu_0 = 0$ соответствует единственная собственная функция $Y_{00}^0(\vec{\Omega}) = 1$, поэтому решением первого уравнения цепочки (1.84) будет

$$\Phi_0(\vec{r}, \vec{\Omega}, E) = U_0(\vec{r}, E)\tag{1.86}$$

Вычисляя правую часть второго уравнения цепочки, найдем, что она является линейной комбинацией собственных функций, относящихся к собственному числу $\nu_1(E)$:

$$\vec{\Omega} \cdot \nabla_{\vec{r}}\Phi_0 = \vec{\Omega} \cdot \nabla_{\vec{r}}U_0 = Y_{1,1}^0(\vec{\Omega})\frac{\partial U_0}{\partial x_1} + Y_{1,1}^1(\vec{\Omega})\frac{\partial U_0}{\partial x_2} + Y_{1,0}^0(\vec{\Omega})\frac{\partial U_0}{\partial x_3}.\tag{1.87}$$

Поэтому второе уравнение цепочки (1.84) разрешимо. Его решение определено с точностью до изотропной функции $U_1(\vec{r}, E)$:

$$\begin{aligned}\Phi_1(\vec{r}, \vec{\Omega}, E) &= \frac{1}{\nu_1(E)} \left[Y_{1,1}^0(\vec{\Omega})\frac{\partial U_0}{\partial x_1} + Y_{1,1}^1(\vec{\Omega})\frac{\partial U_0}{\partial x_2} + Y_{1,0}^0(\vec{\Omega})\frac{\partial U_0}{\partial x_3} \right] + U_1(\vec{r}, E) = \\ &= \frac{1}{\nu_1(E)} \vec{\Omega} \cdot \nabla_{\vec{r}}U_0 + U_1\end{aligned}\tag{1.88}$$

Третье и последующие уравнения цепочки разрешимы не всегда. Условием их разрешимости является ортогональность правой части к собственной функции однородного сопряженного

уравнения. Поскольку $\frac{d\sigma_{el}(E, \vec{\Omega}, \vec{\Omega})}{d\vec{\Omega}}$ зависит лишь от скалярного произведения $\vec{\Omega} \cdot \vec{\Omega}'$,

оператор $\hat{I}_{el}$ является самосопряженным, и условие разрешимости уравнения для Φ_n имеет вид

$$\int_{4\pi} (\vec{\Omega} \cdot \nabla_{\vec{r}} \Phi_{n-1} - s(E_0) \hat{I}_{in} \Phi_{n-2}) d\vec{\Omega} = 0. \quad (1.89)$$

Решение Φ_n каждого уравнения цепочки определено с точностью до изотропной функции $U_n(\vec{r}, E)$. Покажем, что уравнения для $U_n(\vec{r}, E)$ следуют из условия разрешимости задач для Φ_{n+2} . Для этого, пользуясь методом математической индукции, докажем, что функции Φ_k выражаются через линейные комбинации сферических гармоник $Y_{l,m}^i(\vec{\Omega})$, $l = 0, \dots, k$, $m = 0, \dots, l$, $i = 0, 1$, и могут быть представлены в виде

$$\Phi_k(\vec{r}, \vec{\Omega}, E) = U_k + \frac{1}{v_1(E)} \vec{\Omega} \cdot \nabla_{\vec{r}} U_{k-1} + \sum_{l=1}^k \sum_{m=0}^l \sum_{i=0}^1 Y_{l,m}^i(\vec{\Omega}) F_{i,l,m}^k(U_0, \dots, U_{k-2}) \quad (1.90)$$

Пусть это утверждение верно для $k = 0, \dots, n-1$. Подставляя (1.90) в правую часть уравнения для Φ_n , найдем

$$\begin{aligned} & \vec{\Omega} \cdot \nabla_{\vec{r}} \Phi_{n-1} - s(E_0) \hat{I}_{in} \Phi_{n-2} = Y_{1,1}^0(\vec{\Omega}) \frac{\partial \Phi_{n-1}}{\partial x_1} + Y_{1,1}^1(\vec{\Omega}) \frac{\partial \Phi_{n-1}}{\partial x_2} + Y_{1,0}^0(\vec{\Omega}) \frac{\partial \Phi_{n-1}}{\partial x_3} - \\ & - s(E_0) \left[\hat{I}_{in} U_{n-2} + \frac{1}{v_1(E)} \vec{\Omega} \cdot \nabla_{\vec{r}} \hat{I}_{in} U_{n-3} + \sum_{l=1}^{n-2} \sum_{m=0}^l \sum_{i=0}^1 Y_{l,m}^i(\vec{\Omega}) \hat{I}_{in} F_{i,l,m}^{n-2}(U_0, \dots, U_{n-4}) \right] = \\ & = \vec{\Omega} \cdot \nabla_{\vec{r}} U_{n-1} + \frac{1}{v_1(E)} \vec{\Omega} \cdot \nabla_{\vec{r}} (\vec{\Omega} \cdot \nabla_{\vec{r}} U_{n-2}) + \sum_{j,k=0}^1 Y_{1,k}^j(\vec{\Omega}) \sum_{l=1}^{n-1} \sum_{m=0}^l \sum_{i=0}^1 Y_{l,m}^i(\vec{\Omega}) B_{i,l,m}^{n-1,j,k}(U_0, \dots, U_{n-3}) - \\ & - s(E_0) \left[\hat{I}_{in} U_{n-2} + \frac{1}{v_1(E)} \vec{\Omega} \cdot \nabla_{\vec{r}} \hat{I}_{in} U_{n-3} + \sum_{l=1}^{n-2} \sum_{m=0}^l \sum_{i=0}^1 Y_{l,m}^i(\vec{\Omega}) \hat{I}_{in} F_{i,l,m}^{n-2}(U_0, \dots, U_{n-4}) \right] \quad (1.91) \end{aligned}$$

Здесь коэффициенты $B_{i,l,m}^{n-1,j,k}(U_0, \dots, U_{n-3})$ выражаются через $F_{i,l,m}^{n-1}(U_0, \dots, U_{n-3})$. Для сферических гармоник имеет место формула (см., например, [75])

$$Y_{l,m}^i(\vec{\Omega}) Y_{l,k}^j(\vec{\Omega}) = \sum_{\substack{t=l-1, l+1 \\ h=m-1, m+1 \\ g=0,1}} Y_{t,h}^g(\vec{\Omega}) A_{t,h,g}^{i,l,m,j,k}, \quad (1.92)$$

$$m = 0, \dots, l, \quad i = 0, 1, \quad j = 0, 1, \quad k = 0, 1$$

использование которой позволяет записать правую часть $n+1$ -го уравнения цепочки (1.84) в виде линейной комбинации $Y_{j,m}^i(\vec{\Omega})$, $m = 0, \dots, j$, $j = 0, \dots, n$, $i = 0, 1$:

$$\vec{\Omega} \cdot \nabla_{\vec{r}} \Phi_{n-1} - s(E_0) \hat{I}_{in} \Phi_{n-2} = \frac{1}{3v_1(E)} \Delta U_{n-2} - s(E_0) \hat{I}_{in} U_{n-2} + \vec{\Omega} \cdot \nabla_{\vec{r}} U_{n-1} -$$

$$\begin{aligned}
& -s(E_0) \frac{1}{v_1(E)} \vec{\Omega} \cdot \nabla_{\vec{r}} \hat{I}_{in} U_{n-3} + \sum_{k=1}^2 \sum_{m=0}^k Y_{k,m}^p(\vec{\Omega}) \sum_{i,j=1}^3 P_{i,j}^{k,m,p} \frac{\partial^2 U_{n-2}}{\partial x_i \partial x_j} + \\
& + \sum_{j=0}^n \sum_{m=0}^j \sum_{i=0}^1 Y_{j,m}^i(\vec{\Omega}) D_{j,m,i}^n(U_0, \dots, U_{n-3})
\end{aligned} \quad (1.93)$$

Считая, что условие разрешимости выполнено, и, следовательно, коэффициент при $Y_{0,0}^0(\vec{\Omega})$ равен нулю, получим

$$\Phi_n = U_n + \frac{1}{v_1(E)} \vec{\Omega} \cdot \nabla_{\vec{r}} U_{n-1} + \sum_{j=1}^n \sum_{m=0}^j \sum_{i=0}^1 Y_{j,m}^i(\vec{\Omega}) F_{j,m}^n(U_0, \dots, U_{n-2}), \quad (1.94)$$

что и завершает доказательство. Подстановка найденного в процессе доказательства выражения для правой части (1.93) в условие разрешимости (1.89) приводит к обобщенному уравнению диффузии вида

$$\frac{1}{3v_1(E)} \Delta U_{n-2} - s(E_0) \hat{I}_{in} U_{n-2} = -D_{0,0,0}^n(U_0, \dots, U_{n-3}) \quad (1.95)$$

Таким образом, задача определения функции $\Phi_n(\vec{r}, \vec{\Omega}, E)$ с помощью представления (1.90) сводится к задаче для $U_n(\vec{r}, E)$, зависящей лишь от пространственных переменных и энергии. Функции $U_n(\vec{r}, E)$ могут определяться последовательно из уравнений (1.95), следующих из условий разрешимости задач для $\Phi_{n+2}(\vec{r}, \vec{\Omega}, E)$. Найденные функции $\Phi_n(\vec{r}, \vec{\Omega}, E)$ не удовлетворяют краевым условиям на границе области, и для компенсации возникающей невязки необходимо добавить к $\Phi_n(\vec{r}, \vec{\Omega}, E)$ функции типа пограничного слоя. Сращивание решений в пограничном слое и в основной области дадут необходимые граничные условия для функций $U_n(\vec{r}, E)$. Вопрос об их нахождении будет подробно рассмотрен в параграфе 2.2.

Интересно сравнить полученные результаты с широко используемым P_N -приближением, основанным на разложении дифференциальной плотности потока по первым N сферическим гармоникам (или полиномам Лежандра), в частности, с диффузионным (P_1) приближением. Для простоты ограничимся рассмотрением задачи в плоской геометрии. Пусть $\Phi(\vec{r}, \vec{\Omega}, E) \equiv \Phi(z, \mu, E)$, где $\mu = \vec{\Omega} \cdot \vec{e}_z$, $\vec{e}_z$ - орт оси z . Представим $\Phi(z, \mu, E)$ в виде ряда по полиномам Лежандра

$$\Phi(z, \mu, E) = \sum_{k=0}^{\infty} \Psi_k(z, E) \frac{2k+1}{2} P_k(\mu) \quad (1.96)$$

и подставим его в (1.82). Простые выкладки (см., например, [18]) дают следующую цепочку уравнений для Ψ_k :

$$\delta \frac{\partial \Psi_1}{\partial z} = \delta^2 s(E_0) \hat{I}_{in} \Psi_0$$

$$\delta \frac{1}{3} \left(2 \frac{\partial \Psi_2}{\partial z} + \frac{\partial \Psi_0}{\partial z} \right) = \nu_1(E) \Psi_1 + \delta^2 s(E_0) \hat{I}_{in} \Psi_1 \quad (1.97)$$

$$\dots\dots\dots$$

$$\delta \frac{1}{2k+1} \left((k+1) \frac{\partial \Psi_{k+1}}{\partial z} + k \frac{\partial \Psi_{k-1}}{\partial z} \right) = \nu_k(E) \Psi_k + \delta^2 s(E_0) \hat{I}_{in} \Psi_k$$

$$\dots\dots\dots$$

Как легко видеть, изотропные части разложений (1.83), (1.96) связаны соотношением

$$\Psi_0(z, E) = \sum_{k=0}^{\infty} U_k(z, E) \cdot \delta^k \quad (1.98)$$

Для получения диффузионного приближения коэффициенты Ψ_k для $k = 2, 3, \dots$ полагаются равными нулю, а из оставшихся двух уравнений исключается Ψ_1 . При этом изотропная часть разложения (1.96) в диффузионном приближении Ψ_0^1 удовлетворяет уравнению

$$\frac{1}{3} \frac{\partial^2 \Psi_0^1}{\partial z^2} - \nu_1(E) s(E_0) \hat{I}_{in} \Psi_0^1 = \delta^2 s^2(E_0) \hat{I}_{in} (\hat{I}_{in} \Psi_0^1) \quad (1.99)$$

Решение этого уравнения может быть представлено в виде разложения по параметру δ . Сравнение уравнения для коэффициентов этого разложения с уравнениями для U_k позволяет утверждать, что диффузионное приближение эквивалентно асимптотическому разложению с точностью до членов порядка δ включительно. Увеличение номера P_N приближения приводит к появлению дополнительных членов в правой части уравнения (1.99), причем полученное решение оказывается эквивалентным асимптотическому разложению до членов порядка δ^N .

Займемся теперь второй частью итерационного процесса – построением погранслоевых функций. Как уже отмечалось выше, разложение (1.83) не является равномерно пригодным, а аппроксимирует решение лишь вдали от границы. Для получения равномерно пригодного приближения необходимо, следуя второй части общей схемы расщепления многомасштабных задач, рассмотреть погранслоевые функции, удовлетворяющие граничным условиям и выходящие на решение в основной области при удалении от границы.

Будем рассматривать решение в пограничном слое, предполагая, что граница области является плоской, а граничное условие не зависит от точки поверхности. Такое предположение, сохраняя основные закономерности взаимодействия погранслоевых функций с решением в области диффузии, упрощает исследование задачи в пограничном

слое. Выберем в качестве масштаба глубины, измеряемой по нормали к плоскости границы, величину $\lambda(E_0)$ и перейдем к безразмерным длинам в уравнении (1.3). С учетом сделанного предположения дифференциальная плотность потока будет удовлетворять уравнению

$$\mu \frac{\partial \Phi(\xi, \mu, \varphi, E)}{\partial \xi} = \lambda(E_0) \hat{I}_{el} \Phi + \delta^2 s(E_0) \hat{I}_{in} \Phi, \quad (1.100)$$

где ξ - безразмерная глубина в пограничном слое, связанная с глубиной в области диффузии z соотношением $\xi = z/\delta$, $\mu = \cos \vartheta$, а ϑ , φ - сферические координаты вектора $\vec{\Omega}$ в системе координат с осью ξ . Граничное условие (1.5) запишется в виде

$$\Phi(\xi, \mu, \varphi, E) \Big|_{\xi=0}^{\mu>0} = \Phi_{\Gamma}(\mu, \varphi, E) \quad (1.101)$$

Решение задачи (1.100), (1.101) будем искать в виде ряда по степеням малого параметра δ :

$$\Phi(\xi, \mu, \varphi, E) = \sum_{k=0}^{\infty} \delta^k v_k(\xi, \mu, \varphi, E) \quad (1.102)$$

Подставляя (1.102) в (1.100), получим цепочку уравнений для коэффициентов разложения v_k . Функции v_0 , v_1 удовлетворяют однородному уравнению

$$\mu \frac{\partial v(\xi, \mu, \varphi, E)}{\partial \xi} = \lambda(E_0) \hat{I}_{el} v, \quad (1.103)$$

а функции v_k при $k=2,3,\dots$ являются решениями неоднородных уравнений с источниками членами, зависящими от v_{k-2} :

$$\begin{aligned} \mu \frac{\partial v_2(\xi, \mu, \varphi, E)}{\partial \xi} &= \lambda(E_0) \hat{I}_{el} v_2 + s(E_0) \hat{I}_{in} v_0 \\ &\dots\dots\dots \\ \mu \frac{\partial v_k(\xi, \mu, \varphi, E)}{\partial \xi} &= \lambda(E_0) \hat{I}_{el} v_k + s(E_0) \hat{I}_{in} v_{k-2} \\ &\dots\dots\dots \end{aligned} \quad (1.104)$$

Граничные условия для функций v_k следуют из (1.101):

$$v_k(\xi, \mu, \varphi, E) \Big|_{\xi=0}^{\mu>0} = \delta_{k,0} \Phi_{\Gamma}(\mu, \varphi, E), \quad k=0,1,\dots, \quad (1.105)$$

где $\delta_{k,0}$ - символ Кронекера.

Погранслоиная функция наряду с граничным условием (1.101) должна удовлетворять еще одному требованию. Это требование заключается в согласовании внутреннего и внешнего разложений в некоторой области перекрытия, в которой пригодны оба разложения. С математической точки зрения такое согласование (принцип сращивания) сводится к совпадению разложений в промежуточном пределе. При сделанных предположениях о

плоской границе области, в которой изучается распространение электронов, и о независимости граничного условия от точки границы решение в области диффузии зависит лишь от одной координаты z . Эта координата совпадает по направлению с ξ , и связана с ней соотношением $z = \delta \xi$. В этом случае условие срачивания запишется в виде

$$\sum_{k=0}^{\infty} \delta^k v_k \left(\frac{z_{\kappa} \cdot \kappa(\delta)}{\delta}, \mu, \varphi, E \right) \rightarrow \sum_{k=0}^{\infty} \delta^k \Phi_k(z_{\kappa} \cdot \kappa(\delta), \mu, E) \quad (1.106)$$

$$\delta \rightarrow 0$$

$z_{\kappa} = const$	$\kappa(\delta) \rightarrow 0$	$\kappa(\delta)/\delta \rightarrow \infty$
$\delta \rightarrow 0$	$\delta \rightarrow 0$	$\delta \rightarrow 0$

Условие срачивания позволяет сформулировать граничные условия для функций U_k в области диффузии и условия на бесконечности для погранслойных функций v_k . Однако для записи этих условий в явной форме необходимо исследовать координатную асимптотику решения в пограничном слое на бесконечности.

Заметим, что решение задачи в пограничном слое может быть проведено и в более общем случае для областей с неплоскими гладкими граничными поверхностями, радиус кривизны которых велик по сравнению с длиной изотропизации $\lambda(E_0)$, и граничных условий, медленно меняющихся вдоль границы. При этих условиях задача в пограничном слое также может быть приведена к одномерной и отличается от рассмотренного выше случая лишь правыми частями в уравнениях (1.103), (1.104) для коэффициентов разложения v_k . Чтобы показать это, введем в окрестности границы систему криволинейных координат. Две координаты, t_1 и t_2 , выберем на поверхности Γ , ограничивающей изучаемую область, и через каждую точку $\vec{r}$ в окрестности границы проведем по нормали к ней прямую до пересечения с Γ в точке $\vec{r}_0$. Тогда в качестве координат точки $\vec{r}$ может быть выбрано расстояние z по нормали до $\vec{r}_0$ и координаты t_1, t_2 точки $\vec{r}_0$. Декартовы координаты точки $\vec{r}$ тогда можно записать:

$$x_j = x_{0j}(t_1, t_2) + zn_j, \quad j=1,2,3 \quad (1.107)$$

Здесь n_j - декартовы координаты единичного вектора нормали $\vec{n}$ к поверхности Γ в точке $\vec{r}_0$, x_{0j} - декартовы координаты точки $\vec{r}_0$. Соотношения (1.107) могут быть переписаны в виде

$$x_j = x_j(t_1, t_2, z), \quad j=1,2,3. \quad (1.108)$$

Используя, как и раньше, величину $\sqrt{\lambda(E_0)s(E_0)}$ в качестве масштаба координат и вводя погранслойную переменную $\xi = z/\delta$, запишем уравнение (1.3) в переменных ξ, t_1, t_2 :

$$\vec{\Omega} \cdot \vec{n} \frac{\partial \Phi}{\partial \xi} = \lambda(E_0) \hat{I}_{el} \Phi - \delta \left(\sum_{k=1}^2 \sum_{i=1}^3 \Omega_{x_i} \frac{\partial t_k}{\partial x_i} \cdot \frac{\partial \Phi}{\partial t_k} \right) + \delta^2 s(E_0) \hat{I}_{in} \Phi \quad (1.109)$$

Граничное условие (1.5) приобретает вид

$$\Phi(\xi, t_1, t_2, \vec{\Omega}, E) \Big|_{\substack{\xi=0 \\ \vec{n} \cdot \vec{\Omega} > 0}} = \Phi_{\Gamma}(t_1, t_2, \vec{\Omega}, E) \quad (1.110)$$

Таким образом, задача и в этом случае оказывается одномерной, а граничное условие и само решение параметрически зависят от криволинейных координат границы. Представляя решение в виде ряда по степеням параметра δ и подставляя его в (1.109), найдем, что уравнения для v_k отличаются от уравнений (1.103), (1.104) лишь наличием членов вида

$$\sum_{k=1}^2 \sum_{i=1}^3 \Omega_{x_i} \frac{\partial t_k}{\partial x_i} \cdot \frac{\partial \Phi}{\partial t_k} \text{ в правой части.}$$

Глава 2.

Пограничные слои в задачах кинетики электронов средних энергий

2.1 Координатная асимптотика пограничного слоя эффективной изотропизации

Уравнения для погранслойных функций v_k являются линейными, в силу чего решения задач (1.104) для $k = 2, 3, \dots$ могут быть представлены в виде суммы частного решения неоднородного уравнения и решения однородного уравнения (1.103). Не останавливаясь пока на вопросах, связанных с нахождением частных решений, рассмотрим более подробно решение однородной задачи (1.103) с произвольным граничным условием типа (1.105). Следуя [37]³, будем искать решение в виде⁴

$$v(\xi, \mu, \varphi) = e^{\alpha \xi} g(\mu, \varphi) \quad (2.1)$$

При этом функция g удовлетворяет уравнению

$$\lambda(E_0) \hat{I}_{el} g = \alpha \mu \cdot g \quad (2.2)$$

Для исследования спектра задачи (2.2) введем в рассмотрение гильбертово пространство H , элементами которого являются вещественные функции $f(\mu, \varphi)$ со скалярным

произведением $(h, f) = \int_0^{2\pi} \int_{-1}^1 h(\mu, \varphi) f(\mu, \varphi) d\mu d\varphi$, и разобьем его на два ортогональных

подпространства: H^+ , содержащее все четные функции μ , и H^- , содержащее все нечетные функции. Любую функцию $g(\mu, \varphi)$ можно представить в виде

$$g = g^+ + g^-, \quad (2.3)$$

где

$$g^+ = \frac{1}{2}(g + Pg), \quad g^- = \frac{1}{2}(g - Pg), \quad (2.4)$$

а P - оператор отражения по μ :

$$Pg(\mu, \varphi) = g(-\mu, \varphi). \quad (2.5)$$

Применим к обеим частям уравнения (2.2) оператор $\frac{1}{2}(I \pm P)$, где I - тождественный оператор. Тогда, замечая, что

$$P(\mu g) = -\mu Pg \quad (2.6)$$

$$P\lambda(E_0) \hat{I}_{el} g = \lambda(E_0) \hat{I}_{el} Pg, \quad (2.7)$$

³ В [37] найден общий вид решения стационарного одномерного линеаризованного уравнения Больцмана, которое, в отличие от рассматриваемого линейного уравнения, имеет пять инвариантов столкновений.

⁴ В (2.1) не учтена зависимость от энергии, поскольку операторы в (1.103) не действуют на энергетическую переменную и зависимость от нее является параметрической.

получим систему

$$\lambda(E_0)\hat{I}_{el}g^+ = \alpha\mu g^- \quad (2.8)$$

$$\lambda(E_0)\hat{I}_{el}g^- = \alpha\mu g^+ \quad (2.9)$$

В этих уравнениях под $\lambda(E_0)\hat{I}_{el}$ надо понимать сужение оператора $\lambda(E_0)\hat{I}_{el}$ на H^+ и H^- , соответственно. Условием разрешимости уравнений (2.8), (2.9) является ортогональность правой части к решению однородного сопряженного уравнения. Поскольку оператор $\lambda(E_0)\hat{I}_{el}$ является самосопряженным и обладает единственным инвариантом столкновений $\Psi_0 = 1 \in H^+$, то уравнение (2.9) разрешимо всегда, и справедливо равенство

$$g^- = (\lambda(E_0)\hat{I}_{el})^{-1}\alpha\mu \cdot g^+ \quad (2.10)$$

Подставляя (2.10) в (2.8), получим

$$\lambda(E_0)\hat{I}_{el}g^+ = \alpha^2\mu(\lambda(E_0)\hat{I}_{el})^{-1}\mu g^+ \quad (2.11)$$

Замена уравнения (2.2), содержащего операторы $\lambda(E_0)\hat{I}_{el}$ и μ на уравнение (2.11), включающее операторы $\mu(\lambda(E_0)\hat{I}_{el})^{-1}\mu$ и $\lambda(E_0)\hat{I}_{el}$, первый из которых намного сложнее оператора умножения, может показаться нерациональной. Выигрыш, однако, заключается в том, что оператор $\mu(\lambda(E_0)\hat{I}_{el})^{-1}\mu$ является отрицательно определенным. Это следует из того факта, что оператор $\lambda(E_0)\hat{I}_{el}$ является отрицательно определенным на всем H за исключением одномерного подпространства, натянутого на Ψ_0 . Значит, и $(\lambda(E_0)\hat{I}_{el})^{-1}$ - отрицательно определенный на подпространстве, ортогональном Ψ_0 . Поскольку μg^+ ортогональна Ψ_0 при любой $g^+ \in H^+$, имеет место соотношение

$$(g^+, \mu(\lambda(E_0)\hat{I}_{el})^{-1}\mu g^+) = (\mu g^+, (\lambda(E_0)\hat{I}_{el})^{-1}\mu g^+) < 0. \quad (2.12)$$

Как показано в [76], существует самосопряженный оператор C , такой, что

$$\mu(\lambda(E_0)\hat{I}_{el})^{-1}\mu = -C^2, \quad (2.13)$$

и уравнение (2.11) можно представить в виде

$$\lambda(E_0)\hat{I}_{el}g^+ = -\alpha^2 C^2 g^+ \quad (2.14)$$

или

$$Mh = \alpha^2 h \quad (2.15)$$

В уравнении (2.15) учтено, что оператор C имеет единственный обратный оператор⁵, $h = Cg^+$, $M = -C^{-1}\lambda(E_0)\hat{I}_{el}C^{-1}$. Оператор M является самосопряженным и неотрицательным, что легко показывается следующими цепочками равенств:

$$\begin{aligned}(h, Mf) &= -(h, C^{-1}\lambda(E_0)\hat{I}_{el}C^{-1}f) = (C^{-1}h, \lambda(E_0)\hat{I}_{el}C^{-1}f) = \\ &= -(\lambda(E_0)\hat{I}_{el}C^{-1}h, C^{-1}f) = -(C^{-1}\lambda(E_0)\hat{I}_{el}C^{-1}h, f) = (Mh, f)\end{aligned}\quad (2.16)$$

$$(h, Mh) = -(h, C^{-1}\lambda(E_0)\hat{I}_{el}C^{-1}h) = -(C^{-1}h, \lambda(E_0)\hat{I}_{el}C^{-1}h) \geq 0 \quad (2.17)$$

Равенство в (2.17) достигается тогда и только тогда, когда $C^{-1}h = \Psi_0$. Следовательно, уравнение (2.15) допускает множество собственных функций h_α с $\alpha^2 > 0$ или $\alpha^2 = 0$, причем нулевому собственному значению соответствует собственная функция $C\Psi_0$. Спектр может быть частично непрерывным, частично дискретным. Согласно общей теории [77], множество функций $h_\alpha(\mu, \varphi)$ является полным в H^+ и для любой $h \in H^+$ имеем

$$h = C\Psi_0 \cdot A_0 + \int_{\alpha_0}^{\alpha_\infty} h_\alpha(\mu, \varphi) A_\alpha^+ d\alpha, \quad (2.18)$$

где $0 \leq \alpha_0 < \infty$, $0 < \alpha_\infty \leq \infty$, а A_0 , A_α - коэффициенты разложения. Здесь подразумевается, что интеграл по дискретной части спектра, если она есть, должен быть заменен суммой. Это означает, что любая функция g^+ , такая, что $Cg^+ \in H^+$, то есть для которой выполняется неравенство

$$|(Cg^+, Cg^+)| < \infty, \quad (2.19)$$

может быть представлена в виде

$$g^+ = A_0\Psi_0 + \int_{\alpha_0}^{\alpha_\infty} g_\alpha^+(\mu, \varphi) A_\alpha^+ d\alpha \quad (2.20)$$

где $g_\alpha^+ = C^{-1}h_\alpha$. Коэффициенты разложения A_0 , A_α^+ могут быть найдены с помощью соотношений ортогональности для функций g_α^+ . Функции h_α удовлетворяют условию ортогональности

$$(h_\alpha, h_{\alpha'}) = 0, \quad \alpha \neq \alpha' \quad (2.21)$$

Переходя к g_α^+ в (2.21), получим

⁵ Существование обратного оператора C^{-1} следует из положительной определенности, которая гарантирует, что решением уравнения $C^2g = 0$ является лишь $g = 0$. Тогда и решение уравнения $Cg = 0$ есть лишь тождественный нуль, т.к. в противном случае применяя к обеим частям оператор C , получим $C^2g = 0$, и, следовательно, $g = 0$, что приводит к противоречию.

$$(g_{\alpha}^{+}, C^2 g_{\alpha'}^{+}) = (g_{\alpha}^{+}, -\mu(\lambda(E_0)\hat{I}_{el})^{-1} \mu g_{\alpha'}^{+}) = 0 \quad (2.22)$$

Коэффициенты A_0 , A_{α}^{+} тогда будут

$$A_0 = \frac{(g^{+}, -\mu(\lambda(E_0)\hat{I}_{el})^{-1} \mu \Psi_0)}{(\Psi_0, -\mu(\lambda(E_0)\hat{I}_{el})^{-1} \mu \Psi_0)}, \quad A_{\alpha}^{+} = \frac{(g_{\alpha}^{+}, -\mu(\lambda(E_0)\hat{I}_{el})^{-1} \mu g_{\alpha}^{+})}{(g_{\alpha}^{+}, -\mu(\lambda(E_0)\hat{I}_{el})^{-1} \mu g_{\alpha}^{+})} \quad (2.23)$$

Если функция g_{α}^{+} известна, то соотношение (2.10) позволяет найти g_{α}^{-} - нечетную часть собственного решения уравнения (2.2). Легко показать, что любая функция g^{-} , которую можно записать в форме $g^{-} = (\lambda(E_0)R_{el})^{-1} \mu g^{+}$, где g^{+} удовлетворяет (2.19), допускает разложение

$$\begin{aligned} g^{-} &= B_0(\lambda(E_0)\hat{I}_{el})^{-1} \mu \Psi_0 + \int_{\alpha_0}^{\alpha_{\infty}} (\lambda(E_0)\hat{I}_{el})^{-1} \mu g_{\alpha}^{+} B_{\alpha}^{+} d\alpha = \\ &= B_0(\lambda(E_0)\hat{I}_{el})^{-1} \mu \Psi_0 + \int_{\alpha_0}^{\alpha_{\infty}} g_{\alpha}^{-} A_{\alpha}^{-} d\alpha \end{aligned} \quad (2.24)$$

Здесь $A_{\alpha}^{-} = B_{\alpha}^{+} / \alpha$. Разложение (2.24) справедливо при условии

$$|(\lambda(E_0)I_{el}g^{-}, g^{-})| = |(Cg^{+}, Cg^{+})| < \infty \quad (2.25)$$

Формулы (2.20), (2.24) позволяют получить разложение для любой функции g , четная, g^{+} , и нечетная, g^{-} , части которой удовлетворяют условиям (2.19), (2.25) в виде

$$g = A_0 \Psi_0 + B_0(\lambda(E_0)\hat{I}_{el})^{-1} \mu \Psi_0 + \int_{-\alpha_{\infty}}^{-\alpha_0} g_{\alpha} A_{\alpha} d\alpha + \int_{\alpha_0}^{\alpha_{\infty}} g_{\alpha} A_{\alpha} d\alpha \quad (2.26)$$

где $g_{\alpha} = g_{\alpha}^{+} + g_{\alpha}^{-}$ - собственные решения уравнения (2.2). Функции g_{α} ортогональны с весом μ , поскольку

$$(g_{\alpha'}, \lambda(E_0)\hat{I}_{el}g_{\alpha}) = \alpha(g_{\alpha'}, \mu g_{\alpha}) = (\lambda(E_0)\hat{I}_{el}g_{\alpha'}, g_{\alpha}) = \alpha'(\mu g_{\alpha'}, g_{\alpha}), \quad (2.27)$$

и, следовательно,

$$(g_{\alpha'}, \mu g_{\alpha}) = 0, \quad \alpha \neq \alpha'. \quad (2.28)$$

Пользуясь самосопряженностью оператора $\lambda(E_0)\hat{I}_{el}$, легко показать ортогональность функций Ψ_0 и $\mu(\lambda(E_0)\hat{I}_{el})^{-1} \mu \Psi_0$ всем g_{α} при $\alpha \neq 0$

$$(\Psi_0, \mu g_{\alpha}) = 0 \quad (2.29)$$

$$(\mu(\lambda(E_0)\hat{I}_{el})^{-1} \mu \Psi_0, \mu g_{\alpha}) = 0. \quad (2.30)$$

Кроме того, имеют место соотношения

$$(\mu \Psi_0, \Psi_0) = 0 \quad (2.31)$$

$$(\mu(\lambda(E_0)\hat{I}_{el})^{-1}\mu\Psi_0, (\lambda(E_0)\hat{I}_{el})^{-1}\mu\Psi_0) = 0 \quad (2.32)$$

С учетом (2.28)-(2.32) можно найти выражения для коэффициентов разложения (2.26)

$$A_0 = \frac{(g, \mu(\lambda(E_0)\hat{I}_{el})^{-1}\mu\Psi_0)}{(\Psi_0, \mu(\lambda(E_0)\hat{I}_{el})^{-1}\mu\Psi_0)}, \quad B_0 = \frac{(g, \mu\Psi_0)}{(\Psi_0, \mu(\lambda(E_0)\hat{I}_{el})^{-1}\mu\Psi_0)}$$

$$A_\alpha = \frac{(g, \mu g_\alpha)}{(g_\alpha, \mu g_\alpha)} \quad (2.33)$$

Используя (2.26), можно показать, что решение уравнения (1.103) может быть представлено в виде разложения

$$v(\xi, \mu, \varphi) = A_0\Psi_0(\mu, \varphi) + B_0(\xi\Psi_0(\mu, \varphi) + (\lambda(E_0)\hat{I}_{el})^{-1}\mu\Psi_0(\mu, \varphi)) +$$

$$+ \int_{-\alpha_\infty}^{-\alpha_0} A_\alpha e^{\alpha\xi} g_\alpha(\mu, \varphi) d\alpha + \int_{\alpha_0}^{\alpha_\infty} A_\alpha e^{\alpha\xi} g_\alpha(\mu, \varphi) d\alpha \quad (2.34)$$

Для доказательства этого найдем зависимость скалярных произведений, входящих в выражения (2.33), от переменной ξ . Умножая (1.103) скалярно на $g_\alpha(\mu, \varphi)$, получим

$$\frac{d}{d\xi}(\mu g_\alpha, g) = (g_\alpha, \lambda(E_0)\hat{I}_{el}g) = (\lambda(E_0)\hat{I}_{el}g_\alpha, g) = \alpha(\mu g_\alpha, g) \quad (2.35)$$

что дает

$$(\mu g_\alpha, g) = A_\alpha e^{\alpha\xi} \quad (2.36)$$

где A_α - постоянная. Аналогично

$$\frac{d}{d\xi}(\mu\Psi_0, g) = (\Psi_0, \lambda(E_0)\hat{I}_{el}g) = 0 \quad (2.37)$$

и

$$(\mu\Psi_0, g) = B_0. \quad (2.38)$$

Для $(\mu(\lambda(E_0)\hat{I}_{el})^{-1}\mu\Psi_0, g)$ имеем

$$\frac{d}{d\xi}(\mu(\lambda(E_0)\hat{I}_{el})^{-1}\mu\Psi_0, g) = ((\lambda(E_0)\hat{I}_{el})^{-1}\mu\Psi_0, \lambda(E_0)\hat{I}_{el}g) = (\mu\Psi_0, g) = B_0 \quad (2.39)$$

или

$$(\mu(\lambda(E_0)\hat{I}_{el})^{-1}\mu\Psi_0, g) = B_0\xi + A_0 \quad (2.40)$$

Подставляя (2.36), (2.38), (2.40) в (2.33) и используя (2.26), найдем зависимость разложения от ξ в виде (2.34). Константы A_0 , B_0 , A_α можно определить, фиксируя $\xi = 0$ и пользуясь формулами (2.26), (2.33). Из представления (2.34) видно, что общее решение уравнения (1.103) является суммой двух частей g_A и g_B :

$$g_A(\xi, \mu, \varphi) = A_0\Psi_0(\mu, \varphi) + B_0(\xi\Psi_0(\mu, \varphi) + (\lambda(E_0)\hat{I}_{el})^{-1}\mu\Psi_0(\mu, \varphi)) \quad (2.41)$$

$$g_B(\xi, \mu, \varphi) = \int_{-\alpha_\infty}^{-\alpha_0} A_\alpha e^{\alpha\xi} g_\alpha(\mu, \varphi) d\alpha + \int_{\alpha_0}^{\alpha_\infty} A_\alpha e^{\alpha\xi} g_\alpha(\mu, \varphi) d\alpha \quad (2.42)$$

Поскольку $\Psi_0(\mu, \varphi) = 1$, а μ является собственной функцией оператора $\lambda(E_0)\hat{I}_{el}$, выражение для g_A можно переписать

$$g_A = A_0 + B_0(\xi + \mu/\nu_1). \quad (2.43)$$

Функция g_A описывает асимптотическое поведение решения однородной задачи в пограничном слое эффективной изотропизации с произвольным граничным условием, а функция g_B описывает пространственную зависимость, которая существенна вблизи границ и исчезает при $\xi \rightarrow \infty$.

Сделаем несколько замечаний относительно полученных результатов. Как видно из (2.26), система собственных функций $\{\Psi_0, g_\alpha\}$ задачи (2.2) оказывается неполной для разложения произвольной функции в ряд. К этой системе необходимо добавить еще функцию $(\lambda(E_0)\hat{I}_{el})^{-1}\mu\Psi_0$. Этот факт становится достаточно очевидным, если учесть, что уравнение (2.2) сводится к линейной относительно α^2 спектральной задаче (2.15). Это означает, что точка спектра $\alpha = 0$ двукратно вырождена. Однако, вследствие наличия лишь одного инварианта столкновений, ей соответствует лишь одна собственная функция Ψ_0 , и к системе собственных функций для полноты системы должна быть добавлена присоединенная функция Ψ_0^1 , удовлетворяющая уравнению

$$\lambda(E_0)\hat{I}_{el}\Psi_0^1 = \mu\Psi_0. \quad (2.44)$$

Полученные в этом параграфе результаты совпадают с выводами о виде решения уравнения (1.103), приведенными в [78] для случая, когда дифференциальное сечение упругого рассеяния представляется конечной суммой полиномов Лежандра.

2.2 Сращивание решений в пограничном слое эффективной изотропизации и в области диффузии

Полученный в предыдущем параграфе вид координатной асимптотики решения задачи в пограничном слое эффективной изотропизации позволяет, используя принцип сращивания (1.106), найти взаимосвязь между функциями ν_k и Φ_k и определить недостающие граничные условия для функций U_k в области диффузии. Для упрощения выкладок рассмотрим осесимметричную задачу в плоской геометрии. Пусть на полубесконечную мишень нормально к поверхности (вдоль оси z) падает широкий пучок

электронов с энергией E_0 . Дифференциальная плотность потока Φ зависит при этом лишь от z , μ и энергии E и удовлетворяет кинетическому уравнению

$$\mu \frac{\partial \Phi}{\partial z} = \hat{I}_{el} \Phi + \hat{I}_{in} \Phi \quad (2.45)$$

и граничному условию

$$\Phi(z, \mu, E) \Big|_{\substack{z=0 \\ \mu>0}} = \frac{1}{2\pi} \delta(\mu-1) \delta(E-E_0) \quad (2.46)$$

Выбирая, как и в параграфе 1.4, в качестве масштабов длины и энергии величины $\sqrt{\lambda(E_0)s(E_0)}$ и E_0 , соответственно, и переходя к безразмерным переменным, получим одномерное уравнение, аналогичное (1.82). Разложение решения в ряд по малому параметру δ приводит к одномерному аналогу цепочки (1.84). Как уже отмечалось, первые два уравнения цепочки разрешимы всегда, а условие разрешимости задач для последующих Φ_k приводит к уравнениям для изотропных функций U_{k-2} . Полученное таким образом решение $\Phi = \sum_{k=0}^{\infty} \Phi_k \cdot \delta^k$ не может удовлетворить граничному условию (2.46), что заставляет рассмотреть пограничный слой вблизи $z=0$. В пограничном слое кинетическое уравнение имеет вид (1.100), а коэффициенты разложения решения по степеням малого параметра удовлетворяют цепочке уравнений (1.103), (1.104). Правые части уравнений для v_k при $k \geq 2$ зависят от найденных ранее функций v_{k-2} .

Условие сращивания внешнего и внутреннего разложений (1.106) можно преобразовать, раскладывая функцию Φ_k в ряд в окрестности $z=0$. При этом (1.106) перейдет в соотношение вида

$$\sum_{k=0}^{\infty} \delta^k v_k \left(\frac{z_\kappa \cdot \kappa(\delta)}{\delta}, \mu, E \right) \rightarrow \sum_{k=0}^{\infty} \delta^k \sum_{p=0}^k \frac{\Phi_p^{(k-p)}(0, \mu, E)}{(k-p)!} \left(\frac{z_\kappa \cdot \kappa(\delta)}{\delta} \right)^{k-p} \quad (2.47)$$

$$\xi \rightarrow \infty$$

или, в k -ом порядке по δ ,

$$v_k(\xi, \mu, E) \rightarrow \sum_{p=0}^k \frac{\Phi_p^{(k-p)}(0, \mu, E)}{(k-p)!} \xi^{k-p}, \quad (2.48)$$

$$\xi \rightarrow \infty$$

$$\text{где } \Phi_p^{(l)}(0, \mu, E) = \frac{\partial^l \Phi_p(z, \mu, E)}{\partial z^l} \Big|_{z=0}.$$

Поскольку уравнения для нулевого и первого приближения однородны, координатная асимптотика v_0, v_1 имеет вид

$$v_k(\xi, \mu, E) = C_k(E) + B_k(E) \left(\xi + \frac{\mu}{v_1(E)} \right) + O(e^{-\alpha \xi}), \quad k = 0, 1 \quad (2.49)$$

Из условий сращивания (2.48) при $k = 0, 1$ имеем

$$C_0(E) = U_0(0, E), \quad B_0(E) = 0 \quad (2.50)$$

$$C_1(E) = U_1(0, E), \quad B_1(E) = \frac{\partial U_0(z, E)}{\partial z} \Big|_{z=0} \quad (2.51)$$

Задание $B_0(E)$ однозначно определяет (совместно с граничным условием (1.105) при $k = 0$) решение уравнения для v_0 , что, в свою очередь, дает возможность найти $C_0(E)$, и, тем самым, поставить граничное условие для $U_0(z, E)$. Отметим, что в силу граничного условия (2.46) и отсутствия перераспределения по энергии в (1.103) зависимость $C_0(E)$ имеет δ -образный характер,

$$C_0(E) = C_0^* \cdot \delta(E - E_0) \quad (2.52)$$

Решение задачи для U_0 позволяет определить B_1 и отыскать следующее приближение v_1, U_1, Φ_1 . Для продолжения процесса отыскания приближений необходимо найти асимптотику решений неоднородных уравнений (1.104) при $k \geq 2$. В силу линейности задачи решение (1.104) представляется в виде

$$v_k(\xi, \mu, E) = v_k^*(\xi, \mu, E) + \tilde{v}_k(\xi, \mu, E), \quad (2.53)$$

где $v_k^*(\xi, \mu, E)$ есть частное решение (1.104), а $\tilde{v}_k(\xi, \mu, E)$ - решение однородной задачи, отличающейся от задачи (1.103), (1.105) при $k = 0$ лишь граничным условием при $\xi = 0$.

Для отыскания частного решения заметим, что главные члены асимптотики правых частей уравнений (1.104) согласно условию сращивания (2.48) имеют вид

$$F_k(\xi, \mu, E) \rightarrow s(E_0) \hat{I}_{in} \sum_{l=0}^{k-2} \frac{\Phi_{k-2-l}^{(l)}(0, \mu, E)}{l!} \xi^l = \tilde{F}_k(\xi, \mu, E) \quad (2.54)$$

$$\xi \rightarrow \infty$$

Частным решением уравнения (1.104) с правой частью $\tilde{F}_k(\xi, \mu, E)$ является функция

$$\begin{aligned} \tilde{Q}_k(\xi, \mu, E) = & \sum_{l=2}^k \frac{\Phi_{k-l}^{(l)}(0, \mu, E)}{l!} + \xi \left(\Phi_{k-1}^{(1)}(0, \mu, E) - U_{k-1}^{(1)}(0, E) \right) + \\ & + \Phi_{k-1}(0, \mu, E) - U_{k-1}(0, E) - \frac{\mu}{v_1(E)} U_{k-1}^{(1)}(0, E), \end{aligned} \quad (2.55)$$

зависящая от $U_0, U_1, \dots, U_{k-1}$. Действительно, после подстановки (2.55) в (1.104) коэффициенты при ξ^l в левой части будут равны

$$\begin{aligned} & (\mu \Phi_{k-l-1}^{(l+1)}(0, \mu, E) - \lambda(E_0) R_{el} \Phi_{k-l}^{(l)}(0, \mu, E)) \frac{1}{l!}, \quad l = 0, 1, \dots, k-1 \\ & - \lambda(E_0) R_{el} \Phi_0^{(k)}(0, \mu, E), \quad l = k \end{aligned} \quad (2.56)$$

Дифференцируя уравнения (1.84) для коэффициентов Φ_k и полагая $\xi = 0$, найдем, что коэффициенты при ξ^l , $l = 0, 1, \dots, k$, в правой и левой частях уравнения (1.104) совпадают.

Как легко показать по индукции, разность между F_k и $\tilde{F}_k$ содержит члены вида

$$T_m = \int_{\alpha_0}^{\alpha_\infty} A_\alpha(E) g_\alpha(\mu, \varphi) e^{-\alpha \xi} \xi^m d\alpha, \quad m \leq k-2, \quad (2.57)$$

откуда следует, что частное решение Q_k уравнения (1.104) с правой частью F_k совпадает с $\tilde{Q}_k$ с точностью до членов T_m , $m \leq k-1$. Решение $\tilde{v}_k$ однородной задачи (1.103) с граничным условием

$$\tilde{v}_k(\xi, \mu, E) \Big|_{\substack{\xi=0 \\ \mu>0}} = -Q_k(\xi, \mu, E) \Big|_{\substack{\xi=0 \\ \mu>0}} \quad (2.58)$$

имеет асимптотику (2.49), и, следовательно, решение v_k при $\xi \rightarrow \infty$ ведет себя как

$$\begin{aligned} v_k(\xi, \mu, E) = & \sum_{l=0}^k \Phi_{k-l}^{(l)}(0, \mu, E) \frac{\xi^l}{l!} + C_k(E) - U_k(0, E) + \\ & + \left(B_k(E) - U_{k-1}^{(1)}(0, E) \right) \left(\xi + \frac{\mu}{v_1(E)} \right) + O(e^{-\alpha \xi}), \end{aligned} \quad (2.59)$$

Подставляя (2.59) в условие сращивания (2.48), находим

$$B_k(E) = \frac{\partial U_{k-1}(z, E)}{\partial z} \Big|_{z=0}, \quad k = 2, 3, \dots \quad (2.60)$$

$$C_k(E) = U_k(0, E), \quad k = 2, 3, \dots \quad (2.61)$$

Условия (2.58), (2.60) дают возможность однозначно определить $\tilde{v}_k$ в пограничном слое и найти C_k . Граничное условие (2.61) позволяет отыскать функцию U_k и итерационный процесс может быть продолжен.

Остановимся несколько подробнее на решении задач в пограничном слое. Пользуясь известным значением B_k , перейдем от функции $\tilde{v}_k$ к функции $\bar{v}_k = \tilde{v}_k - B_k(E)(\xi + \mu/v_1(E))^6$, для которой асимптотика имеет вид

⁶ Функция $\bar{v}_k$ удовлетворяет уравнению (1.103), поскольку $\mu \frac{\partial}{\partial \xi} (\xi + \mu/v_1(E)) = \lambda(E_0) \hat{I}_{el} (\xi + \mu/v_1(E))$

$$\bar{v}_k(\xi, \mu, E) = C_k(E) + O(e^{-\alpha\xi}), \quad \xi \rightarrow \infty \quad (2.62)$$

а граничное условие (2.58) заменяется условием

$$\bar{v}_k(\xi, \mu, E)\Big|_{\xi=0}^{\mu>0} = -Q_k(\xi, \mu, E)\Big|_{\xi=0}^{\mu>0} - B_k(E)\mu/\nu_1(E) \quad (2.63)$$

Если интересоваться лишь получением граничных условий для области диффузии, т.е. отысканием величин C_k , то задача сводится к отысканию функционала, выражающего C_k через граничные условия (2.63). Для решения задач подобного типа оказывается полезной формула Грина. Выведем ее для данного случая.

Обозначим оператор, действующий на функцию v_k в уравнении (1.103), через L :

$$L = \mu \frac{\partial}{\partial \xi} - \lambda(E_0)\hat{I}_{el}. \quad (2.64)$$

Найдем оператор, сопряженный к нему в гильбертовом пространстве со скалярным произведением

$$[v, u] = \int_0^\infty \int_{-1}^1 v(\xi, \mu) u(\xi, \mu) d\mu d\xi \quad (2.65)$$

Учитывая, что $\lambda(E_0)\hat{I}_{el}$ является самосопряженным оператором в гильбертовом пространстве функций, зависящих от угловых переменных, и выполняя интегрирование по частям в первом слагаемом $[Lv, u]$, найдем

$$[Lv, u] = \left(\int_{-1}^1 v(\xi, \mu) u(\xi, \mu) \mu d\mu \right) \Big|_{\xi=0}^\infty + [v, L^*u] \quad (2.66)$$

$$L^* = -\mu \frac{\partial}{\partial \xi} - \lambda(E_0)\hat{I}_{el}. \quad (2.67)$$

Рассмотрим уравнения

$$Lw_1 = W_1 \quad (2.68)$$

$$L^*w_2 = W_2 \quad (2.69)$$

Умножим скалярно первое из них на w_2 , второе – на w_1 , и найдем разность

$$[w_2, Lw_1] - [w_1, L^*w_2] = [w_2, W_1] - [w_1, W_2] \quad (2.70)$$

Учитывая (2.66), получим формулу Грина для рассматриваемой задачи

$$\left(\int_{-1}^1 w_1(\xi, \mu) w_2(\xi, \mu) \mu d\mu \right) \Big|_{\xi=0}^\infty = [w_2, W_1] - [w_1, W_2] \quad (2.71)$$

Формулу (2.71) удобно использовать для функции с граничным условием $w_1|_{\xi=0} = 0$. Чтобы добиться этого, выделим в решении $\bar{v}_k$ рассеянную, $\bar{v}_k^s$, и нерассеянную, $\bar{v}_k^u$, части

$$\bar{v}_k^u(\xi, \mu, E) = \begin{cases} \bar{v}_k(0, \mu, E) \cdot \exp(-\lambda(E_0)\xi/l_{el}(E)\mu), & \mu > 0 \\ 0, & \mu \leq 0 \end{cases} \quad (2.72)$$

$$\bar{v}_k = \bar{v}_k^u + \bar{v}_k^s \quad (2.73)$$

Подставляя (2.73) в уравнение (1.103) и граничное условие (2.63), для рассеянной части $\bar{v}_k^s$ найдем

$$L\bar{v}_k^s = \lambda(E_0)\hat{I}_{el}\bar{v}_k^u + \frac{\lambda(E_0)}{l_{el}(E)}\bar{v}_k^u = \bar{W}_k \quad (2.74)$$

$$\bar{v}_k^s \Big|_{\substack{\xi=0 \\ \mu>0}} = 0 \quad (2.75)$$

Выберем решение $u(\xi, \mu, E)$ сопряженной задачи (2.69) с правой частью $W_2 = 0$, удовлетворяющее условиям

$$u(\xi, \mu, E) \Big|_{\substack{\xi=0 \\ \mu<0}} = 0 \quad (2.76)$$

$$u(\xi, \mu, E) \rightarrow D(E) + (\xi + \mu/\nu_1(E)) \quad (2.77)$$

$$\xi \rightarrow \infty$$

Подставляя (2.74)-(2.77) в формулу (2.71) и учитывая, что асимптотика $\bar{v}_k^s$ в силу экспоненциального убывания $\bar{v}_k^u$ совпадает с асимптотикой $\bar{v}_k$ (2.62), получим

$$\int_{-1}^1 C_k(E)(D(E) + \xi + \mu/\nu_1(E))\mu d\mu \Big|_{\xi=\infty} = \frac{2C_k(E)}{3\nu_1(E)} = [u, \bar{W}_k] \quad (2.78)$$

Таким образом, для отыскания C_k необходимо решить лишь одно однородное сопряженное уравнение $L^*u = 0$ с условиями (2.76), (2.77). Формула (2.78) позволяет вычислять C_k , интегрируя найденное решение с правой частью $\bar{W}_k$, выражающейся через граничные условия (2.63).

Итак, в рассмотренных задачах кинетики электронов использована общая схема асимптотического разложения многомасштабных задач, описанная в [54]. Согласно этой схеме процедура решения разбивается на два итерационных процесса – основной итерационный процесс (нахождение внешнего разложения) и процесс отыскания погранслойных функций. Если предельный оператор в основном итерационном процессе действует не на все переменные рассматриваемой задачи, то возможно сведение ее к задачам меньшей размерности. Граничные условия для определяемых в основном итерационном процессе функций находятся из условия сращивания решения в пограничном слое с внешним разложением, что позволяет замкнуть алгоритм отыскания последовательных приближений.

Асимптотический подход в кинетических задачах применялся еще в работах Д.Гильберта [34, 39], С.Чепмена [79, 80], Г.Грэда [35, 36], где по существу использовалась та же схема. Разложение Гильберта, аналогично рассмотренному в параграфе 1.4 внешнему разложению, приводит к цепочке уравнений, условия разрешимости которых (ортогональность правых частей пяти инвариантам столкновений) представляет собой пять уравнений гидродинамики идеальной жидкости. Однако, в отличие от линейного кинетического уравнения, интеграл столкновений уравнения Больцмана не имеет присоединенных функций, вследствие чего уравнения меньшей размерности (условия разрешимости) являются уравнениями первого порядка. Разложение Гильберта не дает равномерно пригодного решения, поскольку параметр малости входит в уравнение Больцмана сингулярным образом. Для постановки граничных и начальных условий во внешней области и получения равномерно пригодных решений рассматриваются начальные [35] и пограничные слои. Как указано в [37], решение погранслоевых уравнений и нахождение их асимптотики для задач газовой кинетики весьма затруднительно. Количественные результаты нелегко получить даже для случая максвелловских молекул. При рассмотрении задач, описывающихся линейным уравнением Больцмана, трудности реализации изложенной схемы могут быть преодолены, и равномерно пригодное асимптотическое разложение может быть построено. Примером использования изложенного подхода в линейных кинетических задачах является работа [81].

2.3 Пограничные слои в задаче релаксации узкого по углам и энергиям пучка электронов в полубесконечной тяжелой мишени.

При рассмотрении процесса релаксации электронов в веществе в параграфах 1.4, 2.2 предполагалось, что интегралы столкновений $\hat{I}_{el}\Phi$, $\hat{I}_{in}\Phi$ являются величинами порядка $1/\lambda(E)$, $1/s(E)$, соответственно. В действительности интегралы столкновений имеют указанный порядок в случае, когда характерный масштаб дифференциальной плотности потока $\Phi(\vec{r}, \vec{\Omega}, E)$ по углам и энергиям существенно превосходит ширину пиков дифференциальных сечений упругого и неупругого рассеяния, характерная величина которых описывается параметром β (см. параграф 1.1) и средним потенциалом ионизации J . При этом для построения равномерно асимптотического разложения решения кинетического уравнения можно ограничиться методом погранслоевых поправок. Нарушение условия гладкости дифференциальной плотности потока на масштабах β (по углам) и J (по энергии) приводит к изменению порядков величин интегралов столкновений и, следовательно, к неприменимости изложенных в параграфах 1.4, 2.2 результатов. Для

корректного построения асимптотического разложения дифференциальной плотности потока электронов в этом случае необходимо воспользоваться методом сращиваемых асимптотических разложений.

Для корректного описания процесса релаксации узкого по углам и энергиям пучка электронов необходимо рассмотреть слои, в которых происходит изменение характерных масштабов дифференциальной плотности потока по углам и энергиям от начально заданных (меньше или порядка β , J) до величин, существенно превосходящих β, J . Вид используемых при этом приближений будет определяться соотношением между рассматриваемыми масштабами углов, глубин и энергий и характерными масштабами процессов, происходящих при распространении электронов в веществе. Те или иные приближенные формы кинетического уравнения, описывающие различные этапы релаксации электронного пучка, обычно рассматриваются в физической литературе изолированно друг от друга, что не всегда дает возможность проследить за областью их применимости и связями между ними. Получение уравнений для приближений в различных масштабах длин, углов и энергий формализуется при асимптотическом разложении кинетического уравнения по малым параметрам, выделяющимся при переходе к безразмерным переменным. Использование принципа сращивания асимптотических разложений позволяет объединить различные приближенные модели в единую схему и описать взаимодействие между ними с помощью передаваемых друг другу граничных условий. Такой подход последовательно проведен в работе [82].

Рассмотрим задачу об отыскании распределения электронов в мононаправленном моноэнергетическом пучке, падающем на полубесконечную мишень по нормали к ее поверхности. Дифференциальная плотность потока электронов, зависящая в этом случае только от глубины z , угла между направлением движения электрона и осью z и энергии электрона E , удовлетворяет кинетическому уравнению (2.45) и граничному условию (2.46). Как отмечалось в параграфе 1.1, вследствие преимущественного рассеяния электронов вперед с малыми потерями энергии, длины свободного пробега по упругим l_{el} и неупругим l_{in} столкновениям много меньше характерных длин соответствующих релаксационных процессов, т.е. $l_{el} \ll \lambda$, $l_{in} \ll s$. Полные сечения рассеяния Σ_{el} , Σ_{in} ведут себя по разному с ростом атомного номера рассеивателей Z , так что $l_{el}/l_{in} \propto Z^{-4/3}$. Это приводит к тому, что для мишеней с большими атомными номерами выполняются неравенства $l_{el} \ll l_{in}$, $\lambda \ll s$. Кроме того, в диапазоне энергий электронов $10keV < E_0 < 100keV$ выполняется неравенство $l_{in} \ll \lambda$. Объединяя все указанные неравенства, найдем, что для электронов с энергиями в

указанном диапазоне, распространяющихся в тяжелых мишенях, характерные длины выстраиваются в цепочку

$$l_{el} \ll l_{in} \ll \lambda \ll s \quad (2.79)$$

Рассмотрим приближенные формы кинетического уравнения в различных масштабах длин, углов и энергий.

I. Малоугловой упругий пограничный слой.

Выберем в качестве масштаба глубин величину $z_I = l_{el}$. Поскольку в акте столкновения происходит изменение угла на величину порядка ширины пика дифференциального сечения рассеяния $\beta \ll \pi$, то величину β удобно выбрать в качестве масштаба углов: $\theta_I = \beta$. По тем же соображениям масштабом энергии в этом слое служит характерная энергия ионизации $J \ll E_0$. При переходе к безразмерным величинам в уравнении (2.45) неупругая часть интеграла столкновений будет величиной порядка $l_{el}/l_{in} = \delta_I$, и решение можно искать в виде ряда по δ_I . В уравнении для нулевого приближения интеграл столкновений заменяется своей упругой частью. Используя малость масштаба углов, можно провести дальнейшее упрощение кинетического уравнения. Обозначая $(\theta_I, \vartheta, \varphi)$, $(\theta_I, \vartheta', \varphi')$ сферические координаты векторов $\vec{\Omega}$ и $\vec{\Omega}'$ и вводя векторы $\vec{\theta}$, $\vec{\theta}'$ с декартовыми координатами $(\vartheta \cos \varphi, \vartheta \sin \varphi)$, $(\vartheta' \cos \varphi', \vartheta' \sin \varphi')$, запишем скалярное произведение $\vec{\Omega} \cdot \vec{\Omega}'$ в виде

$$\vec{\Omega} \cdot \vec{\Omega}' = 1 - \left| \vec{\theta} - \vec{\theta}' \right|^2 \frac{\theta_I^2}{2} + O(\theta_I^4), \quad \theta_I \rightarrow 0 \quad (2.80)$$

Уравнение для нулевого приближения с точностью до членов порядка $O(\theta_I)$ будет иметь вид

$$\frac{\partial \Phi}{\partial z} = \iint H(E, |\vec{\theta} - \vec{\theta}'|) \left(\Phi(z, |\vec{\theta}'|, E) - \Phi(z, |\vec{\theta}|, E) \right) d\theta'_x d\theta'_y \quad (2.81)$$

Интегрирование здесь распространено на всю плоскость, а ядро есть

$$H(E, |\vec{\theta} - \vec{\theta}'|) = \frac{\theta_I^2}{\Sigma_{el}(E_0)} \cdot \frac{d\sigma_{el}(E, 1 - \theta_I^2 |\vec{\theta} - \vec{\theta}'|^2 / 2)}{d\Omega} \quad (2.82)$$

Граничное условие (2.46) в безразмерных переменных запишется⁷

$$\Phi(z, \vartheta, E) \Big|_{z=0} = \frac{1}{2\pi} \frac{1}{\vartheta} \delta(\vartheta) \delta(E) \quad (2.83)$$

⁷Безразмерная энергия в рассматриваемом пограничном слое есть $(E_0 - \tilde{E})/J$, где $\tilde{E}$ - размерная энергия.

Как известно [18], для интегрального оператора с ядром, зависящим лишь от расстояния между точками плоскости, собственными функциями являются функции Бесселя $J_0(l\vartheta)$, а собственными числами h_l - коэффициенты разложения ядра по функциям Бесселя:

$$h_l(E) = \int_0^\infty H(E, \vartheta) J_0(l\vartheta) \vartheta d\vartheta \quad (2.84)$$

Это свойство легко доказать, воспользовавшись теоремой сложения для цилиндрических функций. Используя преобразование Ханкеля и учитывая, что оператор в правой части (2.81) не действует на энергетическую зависимость, найдем решение задачи (2.81) – (2.83) в виде

$$\Phi(z, \vartheta, E) = \frac{1}{2\pi} \int_0^\infty l \exp(-z(1 - h_l)) J_0(l\vartheta) dl \cdot \delta(E) \quad (2.85)$$

Полученное решение является хорошо известным малоугловым приближением, впервые полученным Компанейцем в работах [19, 20], а затем Мольер [21]. Свойства этого распределения изучены и само оно протабулировано для некоторых конкретных видов дифференциального сечения упругого рассеяния в работах [83, 84].

II. Неупругий столкновительный пограничный слой

Рассмотрим второй слой с масштабом глубин $z_{II} = l_{in}$ (см. рисунок 2.1). Масштабом энергии E_{II} в этом слое по-прежнему можно выбрать характерную величину энергии ионизации J . В качестве масштаба углов удобно выбрать величину $\theta_{II} = \sqrt{\langle \theta^2 \rangle l_{in}} \ll \pi$, характеризующую средний угол отклонения электронов на глубине l_{in} . Учитывая, что

$$\langle \theta^2 \rangle l_{el} \approx \frac{1}{\Sigma_{el}(E_0)} \int_{4\pi} \frac{d\sigma_{el}(E_0, \vec{\Omega} \cdot \vec{\Omega}')}{d\Omega} \left(1 - (\vec{\Omega} \cdot \vec{\Omega}')^2 \right) d\vec{\Omega}' \approx \beta^2, \quad (2.86)$$

можно оценить отношение угловых масштабов $\theta_{II} / \theta_I \cong \sqrt{1/\delta_I}$. При этом упругая часть интеграла столкновений может быть заменена дифференциальным приближением, получающимся путем асимптотического разложения оператора $\hat{I}_{el}$ по малому параметру β [31].

Зависимость дифференциального сечения неупругого рассеяния $\frac{d\sigma_{in}(E', E' - E)}{dQ}$ от потери энергии $Q = E' - E$ имеет пикообразный характер, зависимость же от энергии налетающего электрона E' в масштабе E_{II} является гладкой. Поэтому с точностью до членов порядка $O(E_{II}/E_0)$ энергию E' можно считать равной E_0 . Переходя в (2.45) к безразмерным переменным и используя дифференциальное приближение для $\hat{I}_{el}$, можно

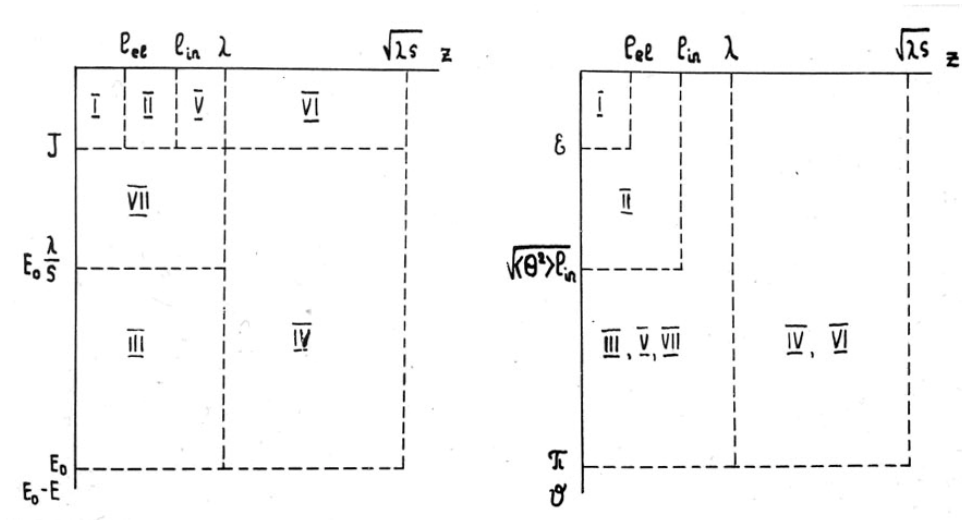


Рисунок 2.1 Схема пограничных слоев, возникающих при распространении мононаправленного моноэнергетического пучка электронов в тяжелых мишенях: I – малоугловой упругий пограничный слой; II – малоугловой неупругий пограничный слой; III – пограничный слой эффективной изотропизации; IV – область диффузии; V–VI – неупругий столкновительный пограничный слой; VII – пограничный слой угловой и энергетической релаксации.

записать кинетическое уравнение в слое II с точностью до членов порядка $O(E_{II}/E_0)$, $O(\theta_{II}^2)$, $E_{II}/E_0 \rightarrow 0$, $\theta_{II} \rightarrow 0$ в виде

$$\frac{\partial \Phi}{\partial z} = \frac{1}{4(1+1/\ln \beta)} \left[\frac{1}{g} \frac{\partial}{\partial g} g \frac{\partial \Phi}{\partial g} - \frac{1}{\ln \beta} \hat{J}_{el}^{II} \Phi \right] + \int_E^{E_0/E_{II}} R(E' - E) \Phi(E') dE' - \Phi(z, g, E) \quad (2.87)$$

где

$$\hat{J}_{el}^{II} \Phi = \frac{2}{\pi} \iint \left[\Phi(g') - \Phi(g) - (\theta'_x - \theta_x) \frac{\partial \Phi(g)}{\partial \theta_x} - (\theta'_y - \theta_y) \frac{\partial \Phi(g)}{\partial \theta_y} - \frac{(\theta'_x - \theta_x)^2}{2} \frac{\partial^2 \Phi(g)}{\partial \theta_x^2} - \right. \\ \left. (\theta'_x - \theta_x)(\theta'_y - \theta_y) \frac{\partial^2 \Phi(g)}{\partial \theta_x \partial \theta_y} - \frac{(\theta'_y - \theta_y)^2}{2} \frac{\partial^2 \Phi(g)}{\partial \theta_y^2} \right] \frac{d\theta'_x d\theta'_y}{|\vec{\theta} - \vec{\theta}'|^4} - \frac{1}{2g} \frac{\partial}{\partial g} g \frac{\partial \Phi}{\partial g} \quad (2.88)$$

$$R(E' - E) = \frac{J}{\Sigma_{in}(E_0)} \frac{d\sigma_{in}(E_0, E_{II}(E' - E))}{dQ} \theta(E' - E) \quad (2.89)$$

Для получения граничных условий в слое II необходимо воспользоваться принципом сращивания асимптотических разложений [85, 86], согласно которому внутреннее и внешнее разложения согласуются в промежуточном пределе. Записывая переменные слоя I в переменных слоя II и рассматривая промежуточные пределы по переменным z , g , получим

$$\Phi_I \left(\frac{z_\eta \cdot \eta(\delta_I)}{\delta_I}, \frac{\mathcal{G}_v \cdot \nu(\delta_I)}{\sqrt{\delta_I}}, E \right) \frac{1}{\delta_I} \rightarrow \Phi_{II} (z_\eta \cdot \eta(\delta_I), \mathcal{G}_v \cdot \nu(\delta_I), E), \quad (2.90)$$

$$\delta_I \rightarrow 0$$

$$z_\eta = \text{Const}, \quad \eta(\delta_I) \rightarrow 0, \quad \frac{\eta(\delta_I)}{\delta_I} \rightarrow \infty \quad \text{при } \delta_I \rightarrow 0$$

$$\mathcal{G}_v = \text{Const}, \quad \nu(\delta_I) \rightarrow 0, \quad \frac{\nu(\delta_I)}{\sqrt{\delta_I}} \rightarrow \infty \quad \text{при } \delta_I \rightarrow 0$$

Из (2.90) видно, что Φ_{II} имеет особенность при $z = 0$, $\mathcal{G} = 0$. Умножим соотношение (2.90) на $\mathcal{G}d\mathcal{G}$ и проинтегрируем по промежутку $[0, \mathcal{G}_v^* \nu]$. Интеграл в левой части стремится к $1/2\pi$ вследствие сохранения полного потока (согласно уравнению (2.81)), а интеграл справа преобразуется к виду $\int \Phi_{II}(z_\eta \cdot \eta, \mathcal{G}', E) \mathcal{G}' d\mathcal{G}'$, откуда следует граничное условие

$$\Phi_{II}(z, \mathcal{G}, E)|_{z=0} = \frac{1}{2\pi} \frac{\delta(\mathcal{G})}{\mathcal{G}} \delta(E) + O(\delta_I), \quad \delta_I \rightarrow 0 \quad (2.91)$$

Поскольку собственными функциями упругой части интеграла столкновений в малоугловом приближении и оператора $\frac{1}{\mathcal{G}} \frac{\partial}{\partial \mathcal{G}} \mathcal{G} \frac{\partial}{\partial \mathcal{G}}$ являются функции Бесселя, то это же верно и для $\hat{J}_{el}^{II}$. Собственные числа этого оператора можно получить, раскладывая собственные числа полного оператора $\hat{I}_{el}$ по параметру малости β . Используя в качестве дифференциального сечения упругого рассеяния Резерфордское сечение (1.6), найдем собственные числа полного оператора $\hat{I}_{el}$ в малоугловом приближении:

$$t_l = \frac{1}{8(1 + \ln \beta)} \frac{\theta_{II}^2}{\beta^2} \left[1 - \frac{2l\beta}{\theta_{II}} K_1 \left(\frac{2l\beta}{\theta_{II}} \right) \right]. \quad (2.92)$$

Здесь $K_1(x)$ - функция Макдональда. Разложение t_l по β дает

$$t_l = \frac{1}{4(1 + 1/\ln \beta)} \left\{ -l^2 - \frac{1}{\ln \beta} \left[l^2 \left(\ln \frac{l}{\theta_{II}} - \frac{1}{2} + C \right) \right] \right\} + O(\beta^2), \quad \beta \rightarrow 0 \quad (2.93)$$

где C - постоянная Эйлера. Сопоставляя этот результат с разложением $\hat{I}_{el}$ по β , использованному в (2.87), находим собственные числа оператора $\hat{J}_{el}^{II}$, которые оказываются равными $l^2 (\ln l / \theta_{II} - 1/2 + C)$. Отметим, что найденный спектр оператора $\hat{I}_{el}$ в малоугловом приближении является непрерывным аналогом дискретного спектра, полученного в параграфе 1.2.

Как видно из (2.87), в малоугловом приближении переменные разделяются и решение может быть получено применением преобразования Ханкеля по угловой переменной и преобразования Лапласа по энергии. С точностью до членов порядка $O(\beta^2)$, $\beta \rightarrow 0$ можно представить решение в виде

$$\Phi(z, \vartheta, E) = \frac{1}{2\pi} \int_0^\infty l J_0(l\vartheta) \exp\left(\frac{1}{4(1+1/\ln\beta)} \left(-l^2 - \frac{l^2}{\ln\beta} (\ln l/\theta_{II} - 1/2 + C)\right) z\right) dl \cdot \frac{1}{2\pi i} \int_{a-i\infty}^{a+i\infty} \exp(pE - W(p)z) dp \quad (2.94)$$

$$W(p) = \int_0^\infty R(E)(1 - \exp(-pE)) dE \quad (2.95)$$

Вследствие того, что масштаб особенности энергетического спектра электронов на глубинах порядка l_{in} совпадает с характерной шириной пика дифференциального сечения неупругого рассеяния, оказывается неприменимым разложение, использованное Ландау в работе [87] для приближенного вычисления $W(p)$ и расчета энергетической зависимости $\Phi(z, \vartheta, E)$, и дальнейшее упрощение выражения (2.94) невозможно.

После прохождения слоев I и II характерные масштабы дифференциальной плотности потока по углам и энергиям существенно превосходят ширину пиков дифференциальных сечений упругого и неупругого рассеяния. В этой ситуации становятся справедливы рассуждения, проведенные в параграфах 1.4, 2.2.

III Пограничный слой эффективной изотропизации.

В этом слое в качестве масштаба глубин выберем характерную длину угловой релаксации $z_{III} = \lambda(E_0)$. Поскольку на этой глубине происходит изотропизация углового распределения электронов, в качестве масштаба углов нужно выбрать $\theta_{III} = \pi$. Масштабом энергии в этом слое служит начальная энергия электронов пучка $E_{III} = E_0$. Обозначим отношение масштабов глубин во втором и третьем слоях $z_{II} / z_{III} = \delta_{II}$ и оценим отношение угловых и энергетических масштабов. Среднеквадратичный угол рассеяния $\langle \theta^2 \rangle$ обратно пропорционален $\lambda(E_0)$, следовательно,

$$\theta_{II} / \theta_{III} = \sqrt{\delta_{II}}. \quad (2.96)$$

Учитывая, что $E_0 = s(E_0) \cdot \bar{Q}(E_0)$, $l_{in} \cdot \bar{Q}(E_0) \cong J$, найдем

$$E_{II} / E_{III} = \delta_{II} \lambda(E_0) / s(E_0) \quad (2.97)$$

Записывая решение в слое II в переменных слоя III и рассматривая промежуточные пределы по переменным z , $\mathcal{G}$, E , согласно принципу сращивания получим

$$\Phi_{II} \left(\frac{z_{\eta} \cdot \eta(\delta_{II})}{\delta_{II}}, \frac{\mathcal{G}_{\kappa} \cdot \kappa(\delta_{II})}{\sqrt{\delta_{II}}}, \frac{E_{\nu} \cdot \nu(\delta_{II})}{\delta_{II}} \frac{s(E_0)}{\lambda(E_0)} \right) \frac{1}{\delta_{II}} \frac{s(E_0)}{\lambda(E_0)} \rightarrow \Phi_{III} (z_{\eta} \cdot \eta(\delta_{II}), \mathcal{G}_{\kappa} \cdot \kappa(\delta_{II}), E_{\nu} \cdot \nu(\delta_{II})) \quad (2.98)$$

$$z_{\eta} = Const, \quad \eta(\delta_{II}) \rightarrow 0, \quad \frac{\eta(\delta_{II})}{\delta_{II}} \rightarrow \infty \quad \text{при } \delta_{II} \rightarrow 0$$

$$\mathcal{G}_{\kappa} = Const, \quad \kappa(\delta_{II}) \rightarrow 0, \quad \frac{\kappa(\delta_{II})}{\sqrt{\delta_{II}}} \rightarrow \infty \quad \text{при } \delta_{II} \rightarrow 0$$

$$E_{\nu} = Const, \quad \nu(\delta_{II}) \rightarrow 0, \quad \frac{\nu(\delta_{II})}{\delta_{II}} \rightarrow \infty \quad \text{при } \delta_{II} \rightarrow 0$$

Как и при сращивании решений в слоях I и II, функция $\Phi_{III}(z, \mathcal{G}, E)|_{z=0}$ равна нулю при $\mathcal{G} \neq 0$, $E \neq 0$, а в точке $\mathcal{G} = 0$, $E = 0$ имеет особенность. Умножая соотношение (2.98) на $\mathcal{G} d\mathcal{G} dE$ и интегрируя его по углам в промежутке $[0, \mathcal{G}_{\kappa}^* \cdot \kappa]$ и по энергии в $[0, E_{\nu}^* \cdot \nu]$, найдем, что интеграл слева стремится к $1/2\pi$ вследствие сохранения полного потока⁸, а интеграл справа есть интеграл по бесконечно малой окрестности точки $\mathcal{G} = 0$, $E = 0$. Отсюда имеем⁹

$$\Phi_{III}(z, \mathcal{G}, E)|_{z=0} = \frac{1}{2\pi} \frac{\delta(\mathcal{G})}{\sin \mathcal{G}} \delta(E - 1) + O(\delta_{II}), \quad \delta_{II} \rightarrow 0 \quad (2.99)$$

Дифференциальная плотность потока удовлетворяет в рассматриваемом пограничном слое уравнению (1.100), причем как для $\hat{I}_{el}$, так и для $\hat{I}_{in}$, могут быть использованы дифференциальные приближения, полученные в [72, 74] и описанные в параграфах 1.2, 1.3. Это уравнение описывает процесс диффузии электронов в угловом пространстве с почти постоянной (в масштабе начальной энергии электрона E_0) энергией, сопровождающейся формированием изотропного распределения в глубине образца и спектра обратно рассеянных электронов.

⁸ Сохранение $\int_0^{\infty} dE \int_0^{\infty} \mathcal{G} d\mathcal{G} \Phi$ по z следует из уравнения (2.87).

⁹ Вследствие использования в слоях I и II малоуглового приближения, не описывающего обратного рассеяния, рассмотрение велось лишь для проходящих в прямом направлении электронов, поэтому и условие (2.99) поставлено лишь для $\mu > 0$.

IV Область диффузии

При выборе в качестве масштабов глубин, углов и энергий величин $z_{IV} = \sqrt{\lambda(E_0)s(E_0)}$, $\mathcal{G}_{IV} = \pi$, $E_{IV} = E_0$ и переходе к безразмерным переменным кинетическое уравнение принимает вид (1.82). Процедура построения решения этого уравнения и постановки граничных условий для функций U_k и условий на координатную асимптотику решений в пограничном слое эффективной изотропизации подробно рассмотрена в параграфах 1.4, 2.1. Уравнение в этой области описывает диффузию в координатном пространстве почти изотропно распределенных электронов, сопровождающуюся непрерывной потерей энергии.

Граничные условия для функций U_k , полученные при использовании принципа сращивания решений в областях III, IV совместно с условием ограниченности U_k при $z \rightarrow \infty$ достаточны для однозначного определения решений одномерных аналогов уравнений (1.95). При использовании дифференциального приближения для неупругой части интеграла столкновений $\hat{I}_{in}$ уравнения для U_k становятся дифференциальными и по энергии, и для их решения требуются дополнительные условия. Эти условия могут быть получены при рассмотрении неупругого столкновительного пограничного слоя.

V-VI. Неупругий столкновительный пограничный слой.

Применимость дифференциального приближения для оператора $\hat{I}_{in}$ обеспечивается не только гладкостью дифференциальной плотности потока Φ на масштабе порядка ширины пика дифференциального сечения неупругого рассеяния J , но и тем, что величина интервала интегрирования в “приходном” члене неупругой части интеграла столкновений существенно превосходит J . В связи с этим, для описания релаксации электронов с энергиями, близкими к начальной энергии падающего пучка, необходимо использовать интегральное выражение для $\hat{I}_{in}$ даже на глубинах, превосходящих l_{in} .

Перейдем к безразмерным переменным в кинетическом уравнении (2.45), используя в качестве масштабов величины $z_V = \lambda(E_0)$, $\mathcal{G}_V = \pi$, $E_V = J$. С точностью до членов порядка $O(J/E_0)$, $O(\beta)$, $J/E_0 \rightarrow 0$, $\beta \rightarrow 0$ уравнение примет вид

$$\mu \frac{\partial \Phi}{\partial z} = \frac{\lambda(E_0)}{l_{in}(E_0)} \left(\int_0^E R(E-E') \Phi(E') dE' - \Phi(z, \mathcal{G}, E) \right) + \lambda(E_0) \hat{I}_{el} \Phi \quad (2.100)$$

где $R(E)$ задается формулой (2.89), а $\hat{I}_{el}$ может быть заменено дифференциальным приближением. Для получения граничного условия опять воспользуемся принципом

срачивания. Рассматривая промежуточный предел для слоев II, V по переменным z , $\mathcal{G}$, имеем

$$\Phi_{II} \left(\frac{z_\eta \cdot \eta(\delta_{II})}{\delta_{II}}, \frac{\mathcal{G}_v \cdot \nu(\delta_{II})}{\sqrt{\delta_{II}}}, E \right) \frac{1}{\delta_{II}} \rightarrow \Phi_V(z_\eta \cdot \eta(\delta_{II}), \mathcal{G}_v \cdot \nu(\delta_{II}), E) \quad (2.101)$$

$$z_\eta = \text{Const}, \quad \eta(\delta_{II}) \rightarrow 0, \quad \frac{\eta(\delta_{II})}{\delta_{II}} \rightarrow \infty \quad \text{при } \delta_{II} \rightarrow 0$$

$$\mathcal{G}_v = \text{Const}, \quad \nu(\delta_{II}) \rightarrow 0, \quad \frac{\nu(\delta_{II})}{\sqrt{\delta_{II}}} \rightarrow \infty \quad \text{при } \delta_{II} \rightarrow 0$$

Умножим соотношение (2.101) на $\mathcal{G}d\mathcal{G}$ и проинтегрируем его по промежутку $[0, \mathcal{G}_v^* \cdot \nu]$.

Учитывая (2.94) и известное представление дельта-функции $\frac{1}{l} \delta(l) = \int_0^\infty J_0(l\mathcal{G}) \mathcal{G}d\mathcal{G}$, найдем

$$\frac{1}{4\pi^2 i} \int_{a-i\infty}^{a+i\infty} \exp \left(pE - W(p) \frac{z_\eta \cdot \eta(\delta_{II})}{\delta_{II}} \right) dp \rightarrow \int_0^{\mathcal{G}_v^* \cdot \nu} \Phi_V(z_\eta \cdot \eta(\delta_{II}), \mathcal{G}, E) \mathcal{G}d\mathcal{G} \quad (2.102)$$

что позволяет записать граничное условие для Φ в слое V в виде

$$\Phi_V(z, \mathcal{G}, E) \Big|_{z=0}^{\mu>0} = 0 \quad (2.103)$$

Решение уравнения (2.100) можно искать в виде ряда $\Phi = \sum_{k=0}^\infty \Phi_k \delta_{II}^k$. Цепочка уравнений

для коэффициентов имеет вид

$$\begin{aligned} \tilde{I}_{in} \Phi_0 &= 0 \\ \tilde{I}_{in} \Phi_0 &= \mu \frac{\partial \Phi_{i-1}}{\partial z} - \lambda(E_0) \hat{I}_{el} \Phi_{i-1}, \quad i = 1, 2, \dots, \end{aligned} \quad (2.104)$$

где введено обозначение

$$\tilde{I}_{in} \Phi = \int_0^E R(E - E') \Phi(E') dE' - \Phi(E) \quad (2.105)$$

Как легко показать, решением первого уравнения цепочки будет $\Phi_0 = 0$, и, следовательно, $\Phi_i = 0$, что согласуется с граничным условием (2.103). Этот вывод позволяет поставить дополнительное условие, необходимое для решения уравнения в пограничном слое эффективной изотропизации при использовании в нем дифференциального приближения для неупругой части интеграла столкновений, в виде

$$\Phi_{III}(z, \mathcal{G}, E) \Big|_{E=1} = 0 \quad (2.106)$$

Аналогичное рассмотрение, проведенное на масштабах $z_{VI} = \sqrt{\lambda(E_0)s(E_0)}$, $\vartheta_{VI} = \pi$, $E_{VI} = J$ показывает, что решением уравнения в этом пограничном слое также будет $\Phi = 0$. Сращивание решений в областях VI и IV приводит к условию

$$\Phi_{IV}(z, \vartheta, E)|_{E=1} = 0 \quad (2.107)$$

VII Пограничный слой угловой и энергетической релаксации.

Полученное при использовании граничных и “начальных” условий (2.50), (2.107) решение одномерного аналога уравнения (1.95) для U_0 в области диффузии будет обладать особенностью в окрестности точки $z = 0$, $E = 1$, что приводит к появлению особенности и в спектре обратно рассеянных электронов. Для ее разрешения необходимо рассмотреть еще один характерный предел кинетического уравнения. Рассмотрим уравнение на масштабах глубин $z_{VII} = \lambda(E_0)$. В качестве масштаба энергии используем величину $E_{VII} = \lambda(E_0) \cdot \bar{Q}(E_0)$, описывающую изменение энергии электронов на длине $\lambda(E_0)$. Поскольку на длинах порядка $\lambda(E_0)$ происходит изотропизация пучка, масштаб углов в этом слое удобно выбрать равным π : $\theta_{VII} = \pi$. Переходя к безразмерным переменным и замечая, что на масштабах энергии E_{VII} допустимо использование дифференциального приближения для $\hat{I}_{in}$, запишем кинетическое уравнение с точностью до членов порядка $O(J/E_0)$, $O(\beta^2)$, $J/E_0 \rightarrow 0$, $\beta \rightarrow 0$ в виде

$$\mu \frac{\partial \Phi}{\partial z} = \frac{1}{2} \left(\frac{1}{\sin \vartheta} \frac{\partial}{\partial \vartheta} \sin \vartheta \frac{\partial \Phi}{\partial \vartheta} + \frac{2}{\ln((1+\beta^2)/\beta^2)} \hat{J}_{el}^1 \Phi \right) + \frac{\partial \Phi}{\partial E} + \frac{1}{2 \ln(J/E_0)} L \Phi \quad (2.108)$$

где L - интегральный оператор, описывающий рассеяние с большой потерей энергии. Как видно из (2.108), сделанный выбор масштаба энергии E_{VII} обеспечил выравнивание порядков упругой и неупругой частей интеграла столкновений. Сращивая решения в областях II, VII и V, VII, найдем граничные и “начальные” условия в виде

$$\Phi_{VII}(z, \vartheta, E)|_{\substack{z=0 \\ \mu>0}} = \frac{1}{2\pi} \frac{\delta(\vartheta)}{\sin \vartheta} \delta(E) + O(\delta_{II}), \quad \delta_{II} \rightarrow 0 \quad (2.109)$$

$$\Phi_{VII}(z, \vartheta, E)|_{E=0} = 0 \quad (2.110)$$

Уравнение (2.108) описывает диффузию электронов в угловом пространстве с непрерывной потерей энергии, сопровождающуюся формированием спектра обратно рассеянных электронов в окрестности начальной энергии пучка. Заметим, что отбрасывание членов порядка $O(1/\ln \beta)$, $O(1/\ln(J/E_0))$, $J/E_0 \rightarrow 0$, $\beta \rightarrow 0$ в (2.108) приводит к беспараметрическому уравнению и, следовательно, спектр обратно рассеянных электронов с

указанной точностью должен быть универсален. Этот вывод подтверждается видом начальных участков спектров обратного рассеяния для мишеней из меди, серебра и золота, построенных по экспериментальным данным работы [88] в масштабе $E_{VII} = E_0 \cdot \lambda(E_0)/s(E_0)$ (рисунок 2.2). Расхождение кривых на рисунке обусловлено влиянием логарифмически малых членов, не учитываемых универсальным уравнением. Беспараметрическое уравнение не относится ни к какому классическому типу, и его аналитическое решение неизвестно. Попытка численного решения этого уравнения была предпринята в работе [89].

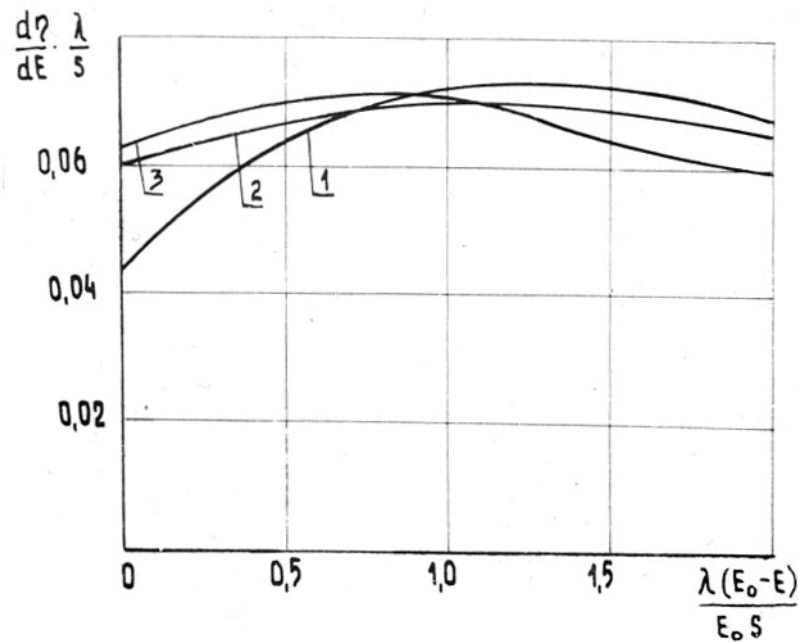


Рисунок 2.2 Начальные участки энергетических спектров обратно рассеянных электронов для мишеней из Cu (1), Ag (2), Au (3), построенные по экспериментальным данным работы [88] в масштабе $E_0 \cdot \lambda(E_0)/s(E_0)$.

Таким образом, проведенные в настоящем параграфе рассмотрения выявили структуру пограничных слоев, возникающих в задаче о релаксации моноэнергетического мононаправленного пучка электронов средних энергий в полубесконечных тяжелых мишенях. С помощью метода сращиваемых асимптотических разложений получены уравнения для главных членов разложений в различных масштабах длин, углов и энергий и найдены граничные условия, описывающие взаимодействие пограничных слоев друг с другом. Изложенный подход позволил указать области применимости и место различных приближенных форм кинетического уравнения, связав их с малостью безразмерных параметров задачи. Объединение приближенных форм кинетического уравнения в единую схему позволяет переходить от одной из них к другой при изменении рассматриваемых масштабов.

Глава 3.

Аналитическое решение некоторых задач кинетики электронов в диффузионном приближении

В этой главе рассмотрены аналитические результаты, полученные при решении некоторых задач теории переноса в диффузионном приближении.

Параграф 3.1 посвящен расчету распределения электронов в мишени, облучаемой моноэнергетическим пучком по нормали к поверхности. На основе разработанной в главе 1 схемы асимптотического расщепления кинетического уравнения отыскание функции распределения электронов сводится к решению уравнения меньшей размерности в области диффузии. При этом функция распределения в первом приближении выражается через решения одномерного обобщенного однородного уравнения диффузии. Для приближенного аналитического решения этого уравнения используется дифференциальное приближение для неупругой части интеграла столкновений. Граничные условия для решения уравнения диффузии при $z = 0$ представляют собой условия первого рода. Решение при этом имеет особенность в окрестности $z = 0$. Устранить ее можно, если провести сращивание полученного решения с решением в пограничном слое.

В параграфе 3.2 проведен расчет функции выхода электронов $q(z, E)$ с энергиями в диапазоне 0.5-30keV из полубесконечной однородной мишени в диффузионном приближении. Эта задача оказывается актуальной для теоретического описания процесса эмиссии электронов из образцов, облучаемых рентгеновским излучением.

Следующий параграф посвящен расчету функции выхода электронов из образцов типа слой на подложке. Кинетическое уравнение в диффузионном приближении в такой задаче сводится к уравнению с кусочно-непрерывными коэффициентами. Слабая зависимость отношения средних потерь энергии в слое к средним потерям в подложке от энергии электрона позволяет свести рассматриваемое уравнение к уравнению теплопроводности с кусочно-постоянными коэффициентами.

3.1 Аналитическое решение кинетического уравнения в области диффузии в задаче о взаимодействии электронного пучка с мишенью

Изложенная в главе 1 схема асимптотического расщепления кинетического уравнения позволяет понизить число независимых переменных в рассматриваемой задаче. В простейшем случае, когда на полубесконечную мишень падает широкий пучок электронов

по нормали к поверхности, уравнение в области диффузии зависит лишь от двух переменных. Это дает возможность получить приближенную формулу, описывающую распределение быстрых электронов в тяжелых мишенях вдали от границы.

Итак, рассмотрим кинетическое уравнение для моноэнергетического пучка электронов, падающего нормально к поверхности полубесконечной мишени (вдоль оси z). При этом дифференциальная плотность потока электронов Φ не зависит от координат x и y , а также от азимутального угла φ , и определяется только глубиной z , углом отклонения θ от направления первоначального движения электрона и его энергией E . Кинетическое уравнение при этом приобретает вид

$$\mu \frac{\partial \Phi(z, \mu, E)}{\partial z} = \hat{I}_{el} \Phi + \hat{I}_{in} \Phi \quad (3.1)$$

$$\Phi(z, \mu, E) \Big|_{\substack{z=0 \\ \mu>0}} = \frac{1}{2\pi} \delta(E - E_0) \delta(\mu - 1) \quad (3.2)$$

Здесь $\mu = \cos \theta$. На основании результатов главы 1 можно заключить, что для n -го члена разложения дифференциальной плотности потока электронов по параметру малости $\delta = \sqrt{\lambda(E_0)/s(E_0)}$, Φ_n , справедливо представление

$$\Phi_n(z, \mu, E) = U_n(z, E) + \frac{1}{v_1(E)} \mu \frac{\partial U_{n-1}(z, E)}{\partial z} + \sum_{j=1}^n P_j(\mu) F_{j,0}^n(U_0, \dots, U_{n-2}) \quad (3.3)$$

Приближенная формула, описывающая распределение быстрых электронов в полубесконечных тяжелых мишенях может быть записана в виде

$$\Phi(z, \mu, E) = U_0(z, E) + \delta \left(U_1(z, E) + \frac{\mu}{v_1(E)} \frac{\partial U_0(z, E)}{\partial z} \right) + O(\delta^2), \quad \delta \rightarrow 0 \quad (3.4)$$

где U_0, U_1 являются решениями одномерного обобщенного уравнения диффузии

$$\frac{1}{3v_1(E)} \frac{\partial^2 U}{\partial z^2} - s(E_0) \hat{I}_{in} U = 0 \quad (3.5)$$

Отметим, что (3.4) совпадает с решением, получаемым в P_1 приближении.

Для получения приближенного аналитического решения уравнения (3.5) воспользуемся дифференциальным приближением для неупругой части интеграла столкновений, найденным в параграфе 1.3. Отбрасывание в $s(E_0) \hat{I}_{in} U$ интегральных членов порядка $O(1/\ln \varepsilon)$ приводит (3.5) к виду

$$\frac{1}{3v_1(E \cdot E_0)} \frac{\partial^2 U}{\partial z^2} - \frac{\partial}{\partial E} \left(U(E) \frac{\bar{Q}(E \cdot E_0)}{\bar{Q}(E_0)} \right) = 0 \quad (3.6)$$

Энергия E здесь измеряется в единицах E_0 . Средняя потеря энергии на единице длины $\bar{Q}$ может быть рассчитана по формуле Бете (1.17). Переходя от U к W по формуле

$$W(z, E) = U(z, E) \frac{\bar{Q}(E \cdot E_0)}{\bar{Q}(E_0)} \quad (3.7)$$

и производя замену переменных

$$\tau = \int_1^E \frac{\bar{Q}(E_0) dE}{3\bar{Q}(E \cdot E_0) \cdot \nu_1(E \cdot E_0)}, \quad (3.8)$$

найдем, что W удовлетворяет уравнению теплопроводности

$$\frac{\partial^2 W}{\partial z^2} - \frac{\partial W}{\partial \tau} = 0 \quad (3.9)$$

Как отмечалось в параграфе 2.2, граничные условия, которым подчинены функции U_0 , U_1 могут быть получены при сращивании решений в пограничном слое и в области диффузии. Для W_0 это дает

$$W_0(z, \tau)|_{z=0} = C_0(E_0) \frac{1}{3|\nu_1(E(\tau) \cdot E_0)|} \delta(\tau) \quad (3.10)$$

Величина $C_0(E_0)$ здесь определяется решением уравнения в пограничном слое. “Начальное” условие для функции W_0 следует из (2.107):

$$W_0(z, \tau)|_{\tau=0} = 0, \quad (3.11)$$

что физически означает отсутствие частиц с энергией E_0 в области диффузии на глубинах $z \neq 0$. Для однозначного определения W_0 наряду с условиями (3.10), (3.11) необходимо учесть ограниченность решения при $z \rightarrow \infty$. Уравнение (3.9) с граничными и начальными условиями (3.10), (3.11) легко решается с помощью преобразования Лапласа, что приводит к

$$W_0(z, \tau) = \frac{C_0(E_0)}{3|\nu_1(E_0)|} \cdot \frac{z}{2\sqrt{\pi\tau}^{3/2}} \exp\left(-\frac{z^2}{4\tau}\right) \quad (3.12)$$

Граничные условия для функции U_1 также следуют из результатов параграфа 2.2. В соответствии с (2.51) имеем

$$U_1(z, E)|_{z=0} = C_1(E), \quad (3.13)$$

Постоянная составляющая координатной асимптотики решения в пограничном слое эффективной изотропизации $C_1(E)$ может быть определена из решения погранслоного уравнения с граничным условием $\nu_1(\xi, \mu, E)|_{\xi=0}^{\mu>0} = -\mu B_1(E) / \nu_1(E \cdot E_0)$. Обозначим через $\bar{C}_1(E)$

постоянную составляющую координатной асимптотики решения погранслоного уравнения

с граничным условием $\nu_1(\xi, \mu, E)|_{\xi=0} = \mu$. Тогда, принимая во внимание соотношение $\mu > 0$

$$B_1(E) = \frac{\partial U_0(z, E)}{\partial z} \Big|_{z=0}, \text{ найдем}$$

$$U_1(z, E)|_{z=0} = -\frac{\bar{C}_1(E)}{\nu_1(E \cdot E_0)} \frac{\partial U_0(z, E)}{\partial z} \Big|_{z=0} \quad (3.14)$$

При замене функции U_1 на W_1 по аналогии с (3.7) и переменной E на τ в соответствии с (3.8) уравнение для U_1 перейдет в уравнение теплопроводности, а граничное условие (3.14) приобретает вид

$$W_1(z, \tau)|_{z=0} = -\frac{\bar{C}_1(E(\tau))}{\nu_1(E(\tau) \cdot E_0)} \frac{\partial U_0(z, E(\tau))}{\partial z} \Big|_{z=0} \cdot \frac{\bar{Q}(E(\tau) \cdot E_0)}{\bar{Q}(E_0)} \quad (3.15)$$

“Начальное” условие для функции W_1 совпадает с условием для функции W_0 . Уравнение (3.9) с условиями (3.15), (3.11) также может быть решено с помощью преобразования Лапласа. При переходе от трансформанты к оригиналу необходимо вычислить квадратуру

$$W_1(z, \tau) = \frac{1}{2\pi i} \int_{a-i\infty}^{a+i\infty} D(p) \exp(-\sqrt{p}z) e^{p\tau} dp, \quad (3.16)$$

где

$$D(p) = \int_0^\infty \left(-\frac{\bar{C}_1(E(\tau))}{\nu_1(E(\tau) \cdot E_0)} \frac{\partial U_0(z, E(\tau))}{\partial z} \Big|_{z=0} \cdot \frac{\bar{Q}(E(\tau) \cdot E_0)}{\bar{Q}(E_0)} \right) \exp(-p\tau) d\tau \quad (3.17)$$

и $D(p)$ является аналитической в полуплоскости $\text{Re } p \geq a$.

Полученные выражения (3.12), (3.16) для W_0 , W_1 дают возможность определить U_0, U_1 и, подставив их в (3.4), найти приближенное распределение электронов в диффузионной области. Отметим, что в соответствии с проведенным в параграфе 2.3 анализом полученное решение несправедливо в окрестности $z = 0$, $E = E_0$, где оно должно быть заменено решением в пограничном слое VII. Вследствие того, что аналитическое решение кинетического уравнения в слое VII неизвестно, провести сращивание аналитически не удастся. Тем не менее, можно сконструировать «комбинированное» решение, заменяя диффузионное решение на глубинах порядка $\lambda(E_0)$ в окрестности $E = E_0$ размером $E_0 \cdot \lambda(E_0) / s(E_0)$ на решение в пограничном слое.

Найдем энергетический спектр обратно рассеянных электронов из полученного диффузионного решения. После прохождения слоя глубиной $\lambda(E_0)$ электроны падающего мононаправленного пучка оказываются распределенными почти изотропно. Энергетический спектр электронов, обратно рассеянных при прохождении этого слоя,

описывается решением уравнения в пограничном слое VII. Масштаб этого спектра по энергии есть $E_0 \cdot \lambda(E_0)/s(E_0)$. Энергетический спектр выходящих электронов вне непосредственной окрестности начальной энергии E_0 формируется в области диффузии и может быть найден из решения (3.4). Полный по углам поток $F(z, E)$ связан с дифференциальной плотностью потока $\Phi(z, \mu, E)$ соотношением

$$F(z, E) = F^+(z, E) + F^-(z, E) = \int_0^{2\pi} \int_0^1 \mu \Phi(z, \mu, E) d\mu d\varphi + \int_0^{2\pi} \int_{-1}^0 \mu \Phi(z, \mu, E) d\mu d\varphi. \quad (3.18)$$

Поскольку в пограничном слое III толщиной $\lambda(E_0)$ перераспределение электронов по энергии дает вклад в дифференциальную плотность потока порядка δ^2 , то для вычисления $\Phi(z, \mu, E)$ при $z=0$ (с точностью δ^2) можно использовать (3.4). Подставляя ее в (3.18), найдем

$$F(0, E) = \int_0^{2\pi} \int_{-1}^1 \delta \frac{\mu^2}{v_1(E \cdot E_0)} \frac{\partial U_0(z, E)}{\partial z} \Big|_{z=0} d\mu d\varphi = \delta \frac{4\pi}{3v_1(E)} \frac{\partial U_0(z, E)}{\partial z} \Big|_{z=0} \quad (3.19)$$

Поскольку падающий поток равен нулю при $E < 1$, то $F(0, E) = F^-(0, E)$. Дифференциальная плотность потока падающих на границу электронов задается формулой (3.2), что дает

$$\int_0^1 F^+(0, E) dE = 1. \text{ Таким образом, энергетический спектр обратно рассеянных электронов,}$$

$$\frac{d\eta}{dE} = -F^-(0, E) \Big/ \int_0^1 F^+(0, E) dE, \text{ оказывается равным}$$

$$\frac{d\eta}{dE} = -\delta \frac{4\pi}{3v_1(E \cdot E_0)} \frac{\partial U_0(z, E)}{\partial z} \Big|_{z=0} \quad (3.20)$$

Ясно, что в окрестности $E=1$ в соответствии с условием срачивания эта формула должна быть заменена на энергетический спектр обратнорассеянных электронов, найденный при решении задачи в пограничном слое VII. Используя (3.12), (3.7), (3.20), для электронов с энергиями, отличными от начальной, в первом приближении по δ получим

$$\frac{d\eta}{dE} = -\delta \frac{4\pi}{3v_1(E \cdot E_0)} \frac{\bar{C}_0(E_0)}{3|v_1(E_0)|} \frac{1}{2\sqrt{\pi}(\tau(E))^{3/2}} \frac{\bar{Q}(E_0)}{\bar{Q}(E \cdot E_0)} \quad (3.21)$$

Использование формулы Бете (1.17) приводит к

$$\frac{\bar{Q}(E \cdot E_0)}{\bar{Q}(E_0)} = \frac{1}{E} (1 + \ln E / \ln(1.166/\varepsilon)) \quad (3.22)$$

Выражения (1.8), (1.50), (1.58) позволяют найти зависимость первого собственного числа оператора $\lambda(E_0)\hat{I}_{el}$ от энергии для экранированного Резерфордского сечения (1.6):

$$\nu_1(E) = \frac{1}{2E^2} \frac{1}{\beta^2(1+\beta^2)(-1-\ln\beta_0^2)} \left(2\beta^2 \ln \frac{\beta^2}{1+\beta^2} + 2\beta^2 + 2\beta^4 \ln \frac{\beta^2}{1+\beta^2} \right). \quad (3.23)$$

где $\beta = 0.565 \cdot Z^{1/3} e^2 \sqrt{m} / \hbar \sqrt{2E}$, $\beta_0 = \beta|_{E=E_0}$. Приближенная зависимость $\tau(E)$ может быть получена при подстановке главных членов выражений (3.22), (3.23) (с точностью до $O(1/\ln \varepsilon)$, $O(1/\ln \beta_0)$, $\varepsilon \rightarrow 0$, $\beta_0 \rightarrow 0$) в (3.8) и (3.21). Это дает

$$\tau(E) = (1 - E^4)/12. \quad (3.24)$$

Подставляя (3.22), (3.23), (3.24) в (3.21), для коэффициента обратного рассеяния $\frac{d\eta}{dE}$ получим

$$\frac{d\eta}{dE} = \frac{2}{9} \sqrt{\pi} (12)^{3/2} \delta \cdot \bar{C}_0(E_0) \frac{E^3}{(1 - E^4)^{3/2}} \quad (3.25)$$

На рисунке 3.1 представлен энергетический спектр обратно рассеянных электронов для мишени из золота, измеренный Г.Бишопом [88] при энергии падающего пучка электронов $E_0 = 20keV$. Аналогичные спектры получены им и для мишеней из Al , C , Cu , Ag и различных энергий пучков в диапазоне 10-50keV. Характерными особенностями измеренных энергетических спектров является весьма слабое влияние энергии пучка E_0 на форму кривых (т.е. спектр зависит лишь от E/E_0) и наличие пика в окрестности E_0 , величина которого растет с ростом атомного номера мишени. Для мишеней с различными Z спектры сильно отличаются лишь в окрестности пика, в то время как в области «хвоста» они достаточно хорошо совпадают. Указанные свойства согласуются с полученной нами универсальной зависимостью (3.25). Энергетический спектр, рассчитанный по этой формуле для мишени из золота, также приведен на рисунке 3.1. Наличие особенности в окрестности начальной энергии связано с неприменимостью диффузионного приближения для описания этого участка спектра¹⁰. Вследствие этого зависимость (3.25) пригодна для описания поведения спектров лишь на падающем участке (в области «хвоста»). Сравнение с экспериментальной кривой в этой области показывает, что теоретическая кривая слишком быстро убывает при удалении от пика. Проведенные численные расчеты позволяют заключить, что учет членов порядка $O(1/\ln \varepsilon)$, $O(1/\ln \beta_0)$, $\varepsilon \rightarrow 0$, $\beta_0 \rightarrow 0$ в выражениях (3.22), (3.23) не приводит к существенному изменению поведения $\frac{d\eta}{dE}$, а для наилучшего согласования теоретического и экспериментального спектров необходимо

¹⁰ Для корректного расчета формы спектра в окрестности E_0 необходимо рассмотреть решение кинетического уравнения в области VII.

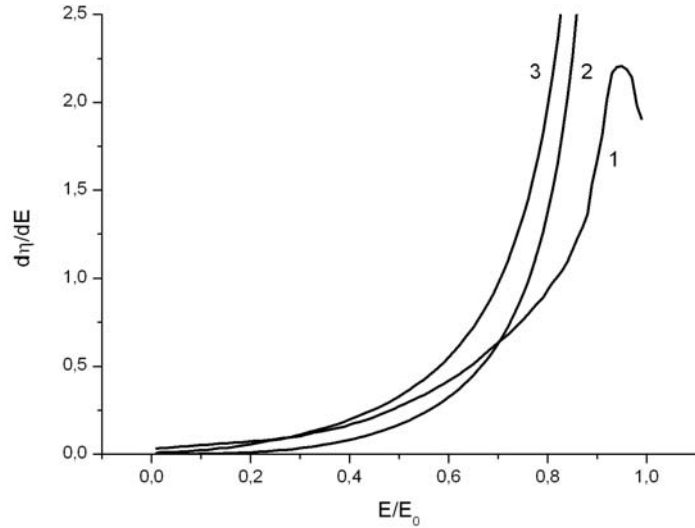


Рисунок 3.1 Энергетический спектр обратнорассеянных электронов для мишени из золота, вычисленный в диффузионном приближении. 1 – экспериментальные данные [88], 2 – расчет по формуле (3.25), 3 – расчет по (3.21) с потерями по формуле Джоя и Луо [90] и зависимостью $\nu_1(E)$ для сечения Мотта.

рассчитывать средние потери энергии по формулам более точным, чем формула Бете (например, по формуле Джоя и Луо [90]) и использовать зависимость первого собственного числа оператора $\lambda(E_0)\hat{I}_{el}$ от энергии, $\nu_1(E)$, найденную для сечения Мотта.

Диффузионное приближение использовалось для расчета распределения электронов в полубесконечной мишени многими авторами. Так в работах В.А.Смоляра [91, 92] были рассчитаны характеристики обратного рассеяния электронов и распределение их в глубине полубесконечной мишени с учетом потерь энергии и обратного рассеяния электронов на начальном этапе проникновения. Несовместимость граничного условия (3.2) с видом функции распределения в области диффузии (ФР в этой области почти изотропна) заставляет использовать дополнительные соображения для постановки граничных условий для U_0 . В работе [91] использовано условие обращения в нуль диффузионного потока извне на границе $z = 0$, что приводит к условию третьего рода для U_0 (условия Маршака). Поступление электронов в область диффузии описывается с помощью источника, расположенного на глубине полной диффузии x_d (соответствующей глубине изотропизации) и испускающего электроны с возрастным параметром τ_d . Этот параметр соответствует энергии, меньшей E_0 на величину потерь энергии на пути x_d . Интенсивность источника меньше единицы на величину, описывающую вклад в коэффициент обратного рассеяния однократных рассеяний

на достаточно большие углы при движении электрона от поверхности до глубины x_d . В последующих работах Смоляра использовались несколько иные значения возрастного параметра электронов источника и его интенсивности, что позволило неплохо смоделировать энергетический спектр обратнорассеянных электронов с помощью решения диффузионного уравнения.

В связи с этим отметим, что развитый в главе 1 метод асимптотического расщепления кинетического уравнения дает асимптотическое представление решения и при конечном значении основного параметра разложения δ может аппроксимировать функцию распределения лишь с некоторой (вообще говоря, неизвестной) численной погрешностью. Основное назначение полученного разложения заключается в выявлении структуры решения и связей решения в основной области с погранслоиными решениями. Поскольку численное значение параметра δ сравнительно велико даже для мишени с самым большим атомным номером ($Z = 79$) среди рассматриваемых, то погрешность в определении спектра обратнорассеянных электронов достаточно велика. Кроме того, из проведенных в главе 1 рассуждений следует, что на глубинах порядка длины изотропизации диффузионное приближение неприменимо, и в приповерхностном слое распределение электронов описывается погранслоиным решением. Предложенные в [91] модели расчета характеристик обратнорассеянных электронов на основе диффузионного уравнения в действительности неявно реализуют аналог сращивания решений в пограничном слое и в области диффузии, что проявляется в специфическом выборе источника в уравнении диффузии.

3.2 Расчет функции выхода электронов из полубесконечной однородной мишени в диффузионном приближении

Развитие современных технологий микроэлектроники приводит к необходимости разработки методов диагностики, позволяющих определять параметры исследуемых объектов со сверхвысоким разрешением. В настоящее время существует ряд широко известных методов, применяемых для этой цели. Многие из них основаны на использовании электронов в качестве регистрируемого сигнала (метод рентгеновских стоячих волн [93], SEXAFS-спектроскопия [94, 95], рентгеновская фотоэлектронная спектроскопия, Оже-спектроскопия [96], спектрометрия электронной эмиссии, возбуждаемой рентгеновским излучением (XIEES) [97]). Адекватная обработка экспериментальных данных, полученных с помощью этих методов, требует корректного описания транспорта электронов в веществе. Между тем количественная теория электронной эмиссии до сих пор находится в стадии разработки, и для описания процесса выхода электронов из вещества часто используются полуэмпирические выражения, полученные на основе анализа экспериментов по прострелу

тонких пленок [98, 99], или выражения, найденные путем аппроксимации результатов моделирования процессов транспорта электронов по методу Монте-Карло [100, 101]. Зависимость вероятности выхода от глубины в этих выражениях носит линейный, квадратичный либо экспоненциальный характер. Экспериментальное определение функции выхода для образцов кремния и германия, облучаемых характеристическим рентгеновским излучением $CuK\alpha$, было выполнено в работе [93]. Экспериментально измеренные в этой работе зависимости функции выхода от глубины значительно отличаются от зависимостей, рассчитанных по линейной и экспоненциальной моделям. Квадратичная зависимость, найденная в [100, 101], согласуется с экспериментальными, данными, однако, как отмечено в [93], измеренная длина выхода электронов оказывается меньше расчетной. Таким образом, существующие формулы для вероятности выхода электрона не обеспечивают удовлетворительной аппроксимации экспериментальных данных во всем диапазоне энергий генерированных электронов и атомных номеров образцов и, следовательно, нуждаются в дополнительном обосновании и определении областей их пригодности.

Вероятность выхода электрона из образца определяется полным потоком электронов через его границу, который может быть рассчитан с помощью кинетического уравнения. Такой расчет был проведен нами в работе [102]. В плоской геометрии кинетическое уравнение, описывающее распространение электронов, рожденных на глубине z_0 изотропно по углам с энергией E_0 имеет вид

$$\mu \frac{\partial \Phi(z, \mu, E)}{\partial z} = \hat{I}_{el} \Phi + \hat{I}_{in} \Phi + \frac{F_0}{4\pi} \cdot \delta(z - z_0) \cdot \delta(E - E_0) \quad (3.26)$$

Третье слагаемое в правой части (3.26) определяет наличие изотропного источника электронов интенсивности F_0 с энергией E_0 на глубине z_0 . Уравнение (3.26) должно быть дополнено граничным условием

$$\Phi(z, \mu, E) \Big|_{\substack{z=0 \\ \mu>0}} = 0, \quad (3.27)$$

означающим, что поток электронов, падающих на образец извне, равен нулю, и условием ограниченности дифференциальной плотности потока на бесконечности. Вероятность выхода электрона из эмиттера при этом представляет собой полный поток электронов, проходящих через $z = 0$, т.е.

$$q(z_0, E_0) = - \int_0^{E_0} \int_0^{2\pi} \int_0^\pi \cos \theta \cdot \Phi(0, \theta, E) \sin \theta d\theta d\phi dE \quad (3.28)$$

Перейдем в уравнении (3.26) к безразмерным величинам, используя в качестве масштаба длины величину $\sqrt{\lambda(E_0)s(E_0)}$, масштаба энергии – величину E_0 и масштаба

дифференциальной плотности потока - F_0/E_0 . Для безразмерных величин будем использовать те же обозначения, что и для размерных, т.е. z , E и Φ . При отыскании решения уравнения (3.26) в виде ряда по степеням малого параметра $\delta = \sqrt{\lambda(E_0)/s(E_0)}$ в соответствии с результатами главы 1 можно заключить, что распределение быстрых электронов приближенно описывается формулой (3.4). Отметим, что согласно (3.28) вклад в полный поток электронов дает лишь член, пропорциональный $\frac{\partial U_0(z, E)}{\partial z}$. Функция U_0 является решением одномерного обобщенного уравнения диффузии, отличающегося от (3.5) лишь наличием источников члена. Использование приближения непрерывного замедления для аппроксимации неупругой части интеграла столкновений позволяет записать это уравнение в виде

$$\frac{1}{3\nu_1(E)} \frac{\partial^2 U_0}{\partial z^2} - \frac{\partial}{\partial E} (\gamma(E) U_0(E)) - \delta(z - z_0) \cdot \delta(E - 1) = 0, \quad (3.29)$$

где $\gamma(E) = \frac{\bar{Q}(E \cdot E_0)}{\bar{Q}(E_0)}$. Отсутствие источников на границе $z = 0$ и ограниченность плотности

потока на бесконечности приводят к граничным условиям

$$U_0|_{z=0} = 0, \quad |U_0|_{z \rightarrow \infty} < M \quad (3.30)$$

где M - некоторая константа. Поскольку все электроны имеют энергию $E \leq 1$ и поступление электронов с энергией $E = 1$ в эмиттер учтено в (3.29) с помощью источника, то

$$U_0|_{E=1} = 0. \quad (3.31)$$

Преобразования, аналогичные проведенным в параграфе 3.1, позволяют привести задачу (3.29)-(3.31) к виду

$$\frac{\partial^2 W_0}{\partial z^2} - \frac{\partial W_0}{\partial \tau} = \delta(z - z_0) \cdot \delta(\tau), \quad (3.32)$$

$$W_0|_{\tau=0} = 0, \quad W_0|_{z=0} = 0, \quad |W_0|_{z \rightarrow \infty} < M \quad (3.33)$$

где $W_0(z, \tau)$ и τ определяются соотношениями (3.7), (3.8), соответственно. Задача (3.32), (3.33) имеет очевидное решение

$$W_0(z, \tau) = \frac{1}{8\pi^{3/2}\tau^{1/2}} \left(\exp(-(z - z_0)^2 / 4\tau) - \exp(-(z + z_0)^2 / 4\tau) \right) \quad (3.34)$$

Возвращаясь к $U_0(z, \tau)$ и используя (3.4), (3.28) получим вероятность выхода электрона в виде

$$q(z_0, E_0) = 1 - \text{erf}(z_0 / L), \quad L = 2\sqrt{\lambda(E_0)s(E_0)\tau^*}, \quad (3.35)$$

где

$$\tau^* = \int_1^0 \frac{dE}{3\nu_1(E)\gamma(E)} . \quad (3.36)$$

Ясно, что (3.35) справедливо для глубин z_0 , принадлежащих области диффузии, т.е. отстоящих от поверхности не менее чем на $\lambda(E_0)$.

Полученное выражение для вероятности выхода электронов средних энергий было использовано для расчета функций выхода $K(t)$, измеренных в работе [93]. Экспериментальное определение $K(t)$ основано на регистрации угловых зависимостей фотоэмиссии при брэгговской дифракции рентгеновских лучей на кристаллах германия и кремния с приповерхностными аморфными слоями различной толщины. Различие угловых зависимостей фотоэмиссии из слоя и подложки позволяет разделить их вклад в полный квантовый выход. Предполагая, что вероятность выхода электронов $q(z, E)$ одинакова для кристалла и аморфной пленки, т.е. пренебрегая ориентационными эффектами в процессе транспорта электронов и считая, что длина выхода электронов много меньше характерной глубины рентгеновского поглощения, авторы [93] нашли отношение $K(t)$ количества электронов, вышедших из пленки толщиной t , к полному количеству вышедших электронов

$$K(t) = \int_0^t q(z) dz \bigg/ \int_0^\infty q(z) dz \quad (3.37)$$

Электроны	Энергия, кэВ	Вероятность рождения	L , см	L^l , см	$s(E_0)$, см
e_L	6.83	0.88	$1.2 \cdot 10^{-5}$	$3.76 \cdot 10^{-5}$	$4.6 \cdot 10^{-5}$
e_M	7.9	0.12	$1.5 \cdot 10^{-5}$	$4.6 \cdot 10^{-5}$	$5.8 \cdot 10^{-5}$
e_{LMM}	1.16	0.86	$8.4 \cdot 10^{-7}$	$3.1 \cdot 10^{-6}$	$3.6 \cdot 10^{-6}$

Таблица 3.1 Характеристики основных групп электронов, образующихся при взаимодействии SiK_α излучения с образцом германия.

Электроны	Энергия, кэВ	Вероятность рождения	L , см	L^l , см	$s(E_0)$, см
e_K	6.2	0.92	$2.2 \cdot 10^{-5}$	$6.65 \cdot 10^{-5}$	$5.7 \cdot 10^{-5}$
e_L	7.9	0.08	$3.4 \cdot 10^{-5}$	$9.33 \cdot 10^{-5}$	$8.6 \cdot 10^{-5}$
e_{KLL}	1.6	0.88	$2.3 \cdot 10^{-6}$	$9.9 \cdot 10^{-6}$	$5.9 \cdot 10^{-6}$

Таблица 3.2 Характеристики основных групп электронов, образующихся при взаимодействии SiK_α излучения с образцом кремния.

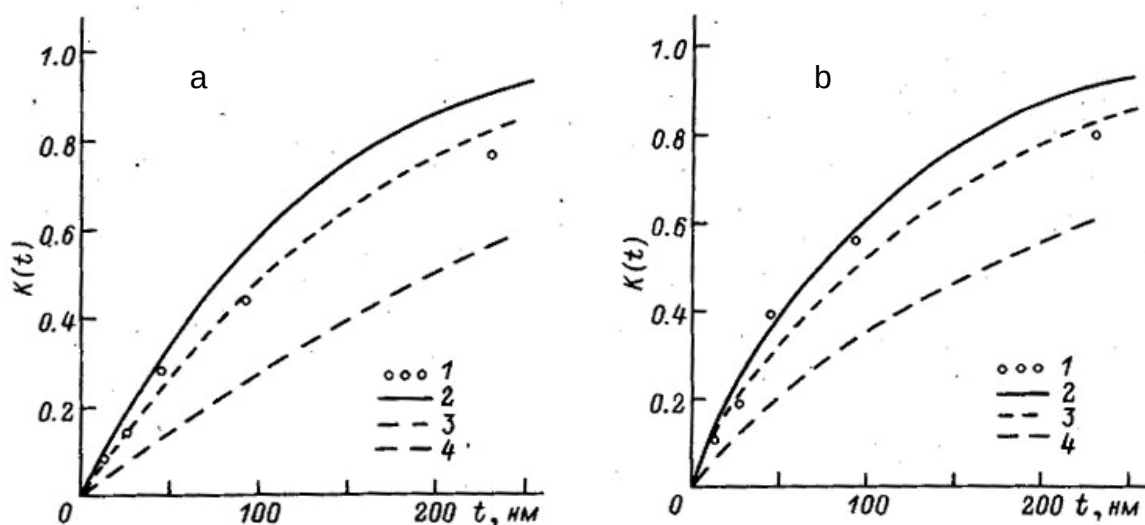


Рисунок 3.2 Зависимость доли $K(t)$ электронов, вышедших из слоя, от толщины слоя t для кремния, облучаемого SiK_α -линией при запирающем напряжении (а) 1.9 кВ (вклад в квантовый выход вносят лишь электроны первой и второй групп); (б) 50 В (вклад в квантовый выход вносят электроны первой, второй и третьей групп). 1 – экспериментальные результаты [93], 2 – результаты расчета по формуле (3.38) с функцией выхода (3.35), 3 – результаты расчета по формуле (3.38) с функцией выхода (3.35) и увеличенной в 1.3 раза длиной выхода, 4 – результаты расчета по формуле (3.38) с функцией выхода (3.39).

Измерение $K(t)$ проводилось для образцов, облучаемых линией $\text{SiK}\alpha$ (энергия рентгеновских фотонов 8.05 кэВ). Характеристики электронов, возникающих в результате фотоионизации, представлены в таблицах 3.1, 3.2. Учитывая, что электроны разных групп характеризуются разными вероятностями выхода, выражение (3.37) можно переписать в виде

$$K(t) = \frac{\sum P_i \int_0^t q(z, E_i) dz}{\sum P_i \int_0^\infty q(z, E_i) dz} \quad (3.38)$$

Суммирование здесь проводится по всем группам электронов, дающим вклад в квантовый выход. Эксперименты в [93] проводились при различных напряжениях на сетке, расположенной между образцом и счетчиком, что позволяет выделить вклад в квантовый выход отдельных групп электронов. Для Si зависимость $K(t)$ была определена при запирающих напряжениях $U_c = 1.9$ кэВ, 50 В, а для Ge — при $U_c = 1.3$ кэВ, 50 В. При этом вклад в квантовый выход для $U_c = 1.9(1.3)$ кэВ вносят лишь электроны 1-й и 2-й групп

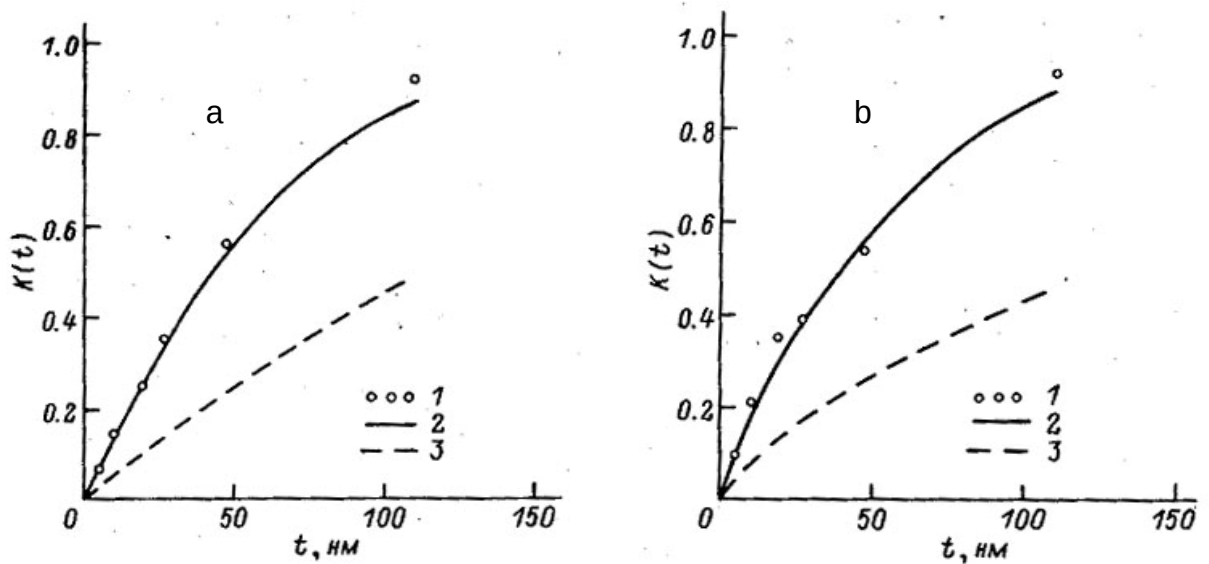


Рисунок 3.3 Зависимость доли $K(t)$ электронов, вышедших из слоя, от толщины слоя t для германия, облучаемого SiK_α -линией при запирающем напряжении (а) 1.3 кВ (вклад в квантовый выход вносят лишь электроны первой и второй групп); (б) 50 В (вклад в квантовый выход вносят электроны первой, второй и третьей групп). 1 – экспериментальные результаты [93], 2 – результаты расчета по формуле (3.38) с функцией выхода (3.35), 3 – результаты расчета по формуле (3.38) с функцией выхода (3.39).

(таблицы 3.1, 3.2), а для $U_c = 50$ В — электроны 1, 2 и 3-й групп. Результаты расчета $K(t)$ по формуле (3.38) с использованием (3.35) приведены на рисунках 3.2, 3.3. На тех же рисунках показаны зависимости $K(t)$, рассчитанные при помощи широко используемой эмпирической формулы для вероятности выхода [98]:

$$q(z, E) = \frac{1}{2} \left(1 - \frac{z}{L^I(E)} \right), \quad L^I(E) = \frac{6 \cdot 10^{-6} \cdot A}{\rho Z} E^{1.4}. \quad (3.39)$$

Зависимости $K(t)$, рассчитанные с вероятностью выхода (3.35), демонстрируют неплохое согласие с экспериментальными данными. Большее расхождение экспериментальных и теоретических результатов для Si связано, по-видимому, с малостью его атомного номера. Действительно, процедура разложения решения кинетического уравнения по параметру δ , использованная для получения (3.35), является корректной лишь при достаточно малых значениях δ . В то же время отношение λ/s растет с убыванием атомного номера образца, так что, например, для Si при энергии электронов $E_0 = 7$ кэВ малый параметр $\delta = \sqrt{\lambda(E_0)/s(E_0)}$ имеет величину порядка 0.7. Отметим, что расхождение рассчитанных и измеренных зависимостей $K(t)$ для Si может быть улучшено при введении небольшого

корректирующего фактора, увеличивающего длину выхода, найденную по (3.35), в 1.3 раз (рис. 3.3).

Кривые $K(t)$, рассчитанные с использованием (3.39), сильно отличаются от экспериментальных результатов. Это связано, прежде всего, с величиной характерных длин выхода электронов. Характерные длины выхода L_i , L_i^l для электронов различных групп, рассчитанные по (3.35), (3.36) и по (3.39), представлены в табл. 3.1, 3.2. Как видно, значения L_i оказываются существенно меньшими, чем соответствующие значения величин L_i^l . Это связано с тем, что значения L_i^l определялись эмпирически из экспериментов по прострелу тонких пленок и не учитывали перераспределение электронов по углу в процессе транспорта. В то же время именно угловое перераспределение оказывается определяющим в процессе переноса электронов с энергиями порядка нескольких кэВ, что приводит к диффузионному характеру распространения электронов от точки генерации до поверхности.

Таким образом, вероятность выхода электронов средних энергий из полубесконечного эмиттера, рассчитанная на основе приближенного решения кинетического уравнения, правильно учитывает особенности транспорта электронов и, в отличие от предложенных ранее формул, обеспечивает хорошее согласие с экспериментальными данными. Это позволяет использовать ее для определения полного квантового выхода в методах диагностики материалов, использующих явление рентгеновской фотоэмиссии.

3.3 Расчет функции выхода электронов из образцов типа «слой на подложке» в диффузионном приближении

Полученные в предыдущем параграфе результаты позволяют рассчитать вероятность выхода электронов из однородных мишеней. Однако потребности современных технологий приводят к необходимости разработки методов диагностики неоднородных объектов, в частности, слоистых структур с толщинами слоев субмикронных размеров. В связи с этим актуальным является расчет функции выхода электронов и для неоднородных мишеней типа «слой на подложке». Эта задача в диффузионном приближении была рассмотрена в работе [103]. Некоторые ее результаты будут приведены в настоящем параграфе.

Итак, рассмотрим, как и раньше, кинетическое уравнение в полубесконечной мишени с плоской границей. В плоской геометрии это уравнение имеет вид (3.26), однако дифференциальные сечения рассеяния, входящие в интеграл столкновений, зависят теперь не только от параметров электрона до и после рассеяния, но и от глубины z . В случае образцов типа «слой на подложке» кинетика электронов определяется двумя наборами характерных длин, описывающими взаимодействие электронов с веществом слоя и подложки. Обозначим

длину изотропизации, длину энергетической релаксации, первое собственное число упругой части интеграла столкновений и средние потери энергии электронов в слое и в подложке $\lambda^{(1)}(E)$, $s^{(1)}(E)$, $\nu_1^{(1)}(E)$, $\bar{Q}^{(1)}(E)$ и $\lambda^{(2)}(E)$, $s^{(2)}(E)$, $\nu_1^{(2)}(E)$, $\bar{Q}^{(2)}(E)$, соответственно.

При переходе к безразмерным величинам в кинетическом уравнении (3.26) примем за масштаб длины величину $\sqrt{\lambda^{(1)}(E_0)s^{(1)}(E_0)}$, относящуюся к слою. Рассмотрим случай, когда источник электронов находится в слое на глубине $z_0 < a$, где a - толщина слоя. С учетом введенных обозначений дифференциальное уравнение для изотропной части распределения принимает вид:

$$\frac{1}{3\nu_1^{(1)}(E)} \cdot \frac{\partial^2 U_0}{\partial z^2} - \frac{\partial}{\partial E} (\gamma^{(1)}(E) U_0) = \delta(z - z_0) \delta(E - 1), \quad 0 < z < a, \quad (3.40)$$

$$\frac{\lambda^{(2)}(E_0)}{\lambda^{(1)}(E_0)} \frac{1}{3\nu_1^{(2)}(E)} \cdot \frac{\partial^2 U_0}{\partial z^2} - \frac{s^{(1)}(E_0)}{s^{(2)}(E_0)} \frac{\partial}{\partial E} (\gamma^{(2)}(E) U_0) = 0, \quad a < z < \infty.$$

где $\gamma^{(1)}(E) = \frac{\bar{Q}^{(1)}(E \cdot E_0)}{\bar{Q}^{(1)}(E_0)}$, $\gamma^{(2)}(E) = \frac{\bar{Q}^{(2)}(E \cdot E_0)}{\bar{Q}^{(2)}(E_0)}$. Обозначая $B_0 = \gamma^{(1)} U_0$, получим

$$\frac{1}{3\nu_1^{(1)}(E)\gamma^{(1)}(E)} \cdot \frac{\partial^2 B_0}{\partial z^2} - \frac{\partial B_0}{\partial E} = \delta(z - z_0) \delta(E - 1), \quad 0 < z < a, \quad (3.41)$$

$$\frac{\lambda^{(2)}(E_0)s^{(2)}(E_0)}{\lambda^{(1)}(E_0)s^{(1)}(E_0)} \frac{1}{3\nu_1^{(2)}(E)\gamma^{(1)}(E)} \frac{\partial^2 B_0}{\partial z^2} - \frac{\partial}{\partial E} \left(\frac{\gamma^{(2)}(E)}{\gamma^{(1)}(E)} B_0 \right) = 0, \quad a < z < \infty.$$

Для дальнейшего упрощения уравнения существенно, что $\gamma^{(2)}(E)/\gamma^{(1)}(E)$ слабо зависит от энергии. Действительно, в том случае, когда средняя потеря энергии на единицу длины описывается формулой Бете, это отношение имеет вид

$$\frac{\gamma^{(2)}(E)}{\gamma^{(1)}(E)} = \left(1 + \frac{\sum_i N_i^{(2)} Z_i^{(2)} \cdot \ln(E/E_0)}{\sum_i N_i^{(2)} Z_i^{(2)} \cdot \ln(1.166 E_0 / I_i^{(2)})} \right) / \left(1 + \frac{\sum_i N_i^{(1)} Z_i^{(1)} \cdot \ln(E/E_0)}{\sum_i N_i^{(1)} Z_i^{(1)} \cdot \ln(1.166 E_0 / I_i^{(1)})} \right). \quad (3.42)$$

Здесь $N_i^{(1)}$, $N_i^{(2)}$ - концентрация рассеивателей i -го сорта в слое и в подложке, $Z_i^{(1)}$, $Z_i^{(2)}$ - атомные номера рассеивателей, $I_i^{(1)}$, $I_i^{(2)}$ - средние потенциалы ионизации, в первой скобке суммирование происходит по всем элементам подложки, во второй скобке - по всем элементам слоя.

Будем считать, что $\gamma^{(2)}(E)/\gamma^{(1)}(E) = 1$. Тогда уравнение (3.41) для $a < z < \infty$ переходит в

$$\frac{\lambda^{(2)}(E_0)s^{(2)}(E_0)}{\lambda^{(1)}(E_0)s^{(1)}(E_0)} \frac{1}{3\nu_1^{(2)}(E)\gamma^{(2)}(E)} \frac{\partial^2 B_0}{\partial z^2} - \frac{\partial B_0}{\partial E} = 0. \quad (3.43)$$

Сделав замену переменной

$$\tau = \int_1^E \frac{dE}{3\nu_1^{(1)}(E)\gamma^{(1)}(E)}, \quad (3.44)$$

легко получить:

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 B_0}{\partial z^2} - \frac{\partial B_0}{\partial \tau} &= \delta(z - z_0)\delta(E - 1), \quad z < a, \\ D \frac{\partial^2 B_0}{\partial z^2} - \frac{\partial B_0}{\partial \tau} &= 0, \quad z > a, \end{aligned} \quad (3.45)$$

где

$$D = \frac{\lambda^{(2)}(E_0)S^{(2)}(E_0)}{\lambda^{(1)}(E_0)S^{(1)}(E_0)} \frac{\nu_1^{(1)}(E)\gamma^{(1)}(E)}{\nu_1^{(2)}(E)\gamma^{(2)}(E)} \quad (3.46)$$

Рассмотрим теперь отношение $\nu_1^{(2)}(E)/\nu_1^{(1)}(E)$. При использовании экранированного сечения Резерфорда для описания упругих столкновений эта величина имеет вид

$$\frac{\nu^{(2)}(E)}{\nu^{(1)}(E)} = \left(1 + \frac{\sum_i N_i^{(2)} (Z_i^{(2)})^2 \cdot \ln(E_0/E)}{\sum_i N_i^{(2)} (Z_i^{(2)})^2 \cdot \ln(\alpha_i^{(2)}(E_0))} \right) \bigg/ \left(1 + \frac{\sum_i N_i^{(1)} Z_i^{(1)} \cdot \ln(E_0/E)}{\sum_i N_i^{(1)} Z_i^{(1)} \cdot \ln(\alpha_i^{(1)}(E_0))} \right), \quad (3.47)$$

где $\alpha_i^{(j)}(E) = \left(0.565 \cdot (Z_i^{(j)})^{1/3} e^2 \sqrt{m} / \hbar \sqrt{2E} \right)^2$, m и e – масса и заряд электрона. Учитывая, что $\alpha_i^{(j)}(E_0) \ll 1$, в дальнейшем будем полагать отношение $\nu^{(2)}(E)/\nu^{(1)}(E)$ равным единице и

$$D = \left(\frac{L^{(2)}}{L^{(1)}} \right)^2, \quad (3.48)$$

где $L^{(1)}$, $L^{(2)}$ – длины выхода соответственно из слоя и из подложки, определяемые соотношением (3.35):

$$L^{(i)}(E_0) = 2\sqrt{\lambda^{(i)}(E_0)s^{(i)}(E_0)\tau^{(i)*}}, \quad i = 1, 2, \quad (3.49)$$

где безразмерный коэффициент $\tau^{(i)*} = \int_1^0 \frac{dE}{3\nu_1^{(i)}(E)\gamma^{(i)}(E)}$.

Для однозначного определения решения уравнение (3.45) должно быть дополнено граничными условиями, описывающими отсутствие источников электронов при $z = 0$, $z \rightarrow \infty$ и при энергиях, больших E_0 . Это дает

$$B_0(0, \tau) = 0, \quad B_0(z, \tau)|_{z \rightarrow \infty} = 0, \quad B_0(z, 0) = 0. \quad (3.50)$$

Задача (3.45), (3.50) может быть решена с помощью преобразования Лапласа. Пусть $F(z, p)$ есть изображение неизвестной функции $B_0(z, \tau)$. Тогда $F(z, p)$ удовлетворяет уравнению

$$\frac{\partial^2 F(z, p)}{\partial z^2} - pF(z, p) = \delta(z - z_0) , \quad z < a , \quad (3.51)$$

$$D \frac{\partial^2 F(z, p)}{\partial z^2} - pF(z, p) = 0 , \quad z > a .$$

Для расчета функции выхода необходимо найти решение уравнения (3.51) на интервале $z < z_0$. Можно показать, что оно имеет вид:

$$F(z, p) = -\frac{1}{2\sqrt{p}} \frac{\exp(-\sqrt{p}z_0) + \frac{(\sqrt{D}-1)}{(\sqrt{D}+1)} \exp(-\sqrt{p}(-z_0+2a))}{1 - \left(\frac{\sqrt{D}-1}{\sqrt{D}+1}\right) \cdot \exp(-\sqrt{p} \cdot 2a)} \times \\ \times (\exp(\sqrt{p}z) - \exp(-\sqrt{p}z)) \quad (3.52)$$

Для вычисления оригинала заметим, что величина τ в уравнении (3.45) ограничена сверху: $\tau < \tau^*$. В случае использования формулы Бете и экранированного сечения Резерфорда величина τ^* приблизительно равна 1/12. Это позволяет ограничиться рассмотрением случая малых τ , что соответствует большим значениям p . В этом случае выражение (3.52) может быть разложено в ряд по малому параметру $\exp(-\sqrt{p} \cdot 2a) \ll 1$, что дает:

$$F(z, p) = -\frac{1}{2\sqrt{p}} \cdot \left\{ \exp(-\sqrt{p}(-z+z_0)) + \exp(-\sqrt{p}(z+z_0)) + \sum_{k=1}^{\infty} \left(\frac{\sqrt{D}-1}{\sqrt{D}+1}\right)^k \times \right. \\ \times \left[\exp(-\sqrt{p}(-z+z_0+2ka)) - \exp(-\sqrt{p}(z+z_0+2ka)) - \right. \\ \left. \left. - \exp(-\sqrt{p}(-z-z_0+2ka)) + \exp(-\sqrt{p}(z-z_0+2ka)) \right] \right\} . \quad (3.53)$$

Переходя к оригиналу, получим решение уравнения (3.45) на интервале $z < z_0$:

$$B_0(z, \tau) = \frac{1}{2\pi\sqrt{\tau}} \cdot \left\{ \exp\left(-\frac{(-z+z_0)^2}{4\tau}\right) - \exp\left(-\frac{(z+z_0)^2}{4\tau}\right) + \sum_{k=1}^{\infty} \left(\frac{\sqrt{D}-1}{\sqrt{D}+1}\right)^k \times \right. \\ \times \left(\exp\left(-\frac{(-z+z_0+2ka)^2}{4\tau}\right) - \exp\left(-\frac{(z+z_0+2ka)^2}{4\tau}\right) - \right. \\ \left. \left. - \exp\left(-\frac{(-z-z_0+2ka)^2}{4\tau}\right) + \exp\left(-\frac{(z-z_0+2ka)^2}{4\tau}\right) \right) \right\} \quad (3.54)$$

Первые два слагаемых в (3.54) совпадают с решением для однородного образца. Влияние подложки на дифференциальную плотность потока в слое выражено суммой по k , отличным от нуля.

Аналогичные рассуждения для случая, когда источник электронов находится в подложке, приводят к

$$B_0(z, \tau) = \frac{1}{\sqrt{\pi}(1+\sqrt{D})} \cdot \frac{1}{\sqrt{\tau}} \cdot \sum_{k=0}^{\infty} \left(\frac{\sqrt{D}-1}{\sqrt{D}+1} \right)^k \times \\ \times \left(\exp \left(-\frac{1}{4\tau} \left(\frac{z_0-a}{\sqrt{D}} + (2k+1)a - z \right)^2 \right) - \exp \left(-\frac{1}{4\tau} \left(\frac{z_0-a}{\sqrt{D}} + (2k+1)a + z \right)^2 \right) \right). \quad (3.55)$$

Чтобы найти функцию выхода из слоя и подложки нужно подставить выражения (3.54) и (3.55) в (3.28). Функция выхода из слоя имеет следующий вид:

$$q(z, E) = \left\{ 1 - \operatorname{erf} \left(\frac{z}{L^{(1)}} \right) + \sum_{k=1}^{\infty} \left(\frac{\sqrt{D}-1}{\sqrt{D}+1} \right)^k \cdot \left(\operatorname{erf} \left(\frac{2ka-z}{L^{(1)}} \right) - \operatorname{erf} \left(\frac{2ka+z}{L^{(1)}} \right) \right) \right\}. \quad (3.56)$$

Первые два члена в (3.56), не входящие под знак суммы, совпадают с функцией выхода из однородного образца. Функция выхода из подложки определяется выражением:

$$q(z, E) = \left\{ \frac{2}{1+\sqrt{D}} \cdot \sum_{k=0}^{\infty} \left(\frac{\sqrt{D}-1}{\sqrt{D}+1} \right)^k \cdot \left(1 - \operatorname{erf} \left(\frac{z-a}{\sqrt{D} \cdot L^{(1)}} + \frac{(2k+1) \cdot a}{L^{(1)}} \right) \right) \right\}. \quad (3.57)$$

Легко видеть, что в пределе $D \rightarrow 1$ выражения (3.56), (3.57) переходят в функцию выхода из однородного образца.

Глава 4.

Моментный метод решения уравнения Больцмана и ядра интеграла столкновений

Развитый в предыдущих главах асимптотический подход к исследованию кинетического уравнения для электронов позволяет провести полный качественный анализ решения, однако значения малых параметров оказываются не настолько малыми, чтобы найти распределение электронов с точностью, достаточной для решения обратных задач. В связи с этим представляется актуальной разработка численных методов для решения кинетического уравнения при сильных отклонениях ФР от равновесия. При этом рассматривается более общая задача решения нелинейного уравнения Больцмана. Как уже отмечалось во введении, необходимость в решении нелинейного кинетического уравнения возникает, например, при расчете физико-химических процессов в газе и плазме, где требуется информация о ФР в области больших скоростей, при исследовании кинетических режимов в пристеночных областях, где ФР оказывается сильно неравновесной. В последние годы значительный импульс получил моментный метод решения уравнения Больцмана. В этом методе ФР раскладывается по базисным функциям, представляющим собой произведение полиномов Сонина на сферические гармоники, и уравнение Больцмана заменяется на уравнения для коэффициентов разложения. Интеграл столкновений при этом переходит в двойную сумму, коэффициентами которой являются матричные элементы интеграла столкновений. Основные соотношения моментного метода и последние результаты, полученные в процессе его разработки, приведены в параграфе 4.1.

Необходимо отметить, что полученное при использовании моментного метода разложение ФР сходится не всегда. Чтобы избавиться от ограничений, связанных с критерием сходимости, нужно рассматривать разложение ФР по сферическим гармоникам. Интеграл столкновений при этом заменяется набором интегральных операторов, ядра которых зависят только от модулей скоростей. Определение этих ядер, которые будут являться предметом дальнейшего исследования, и их связи с матричными элементами интеграла столкновений рассмотрены в параграфе 4.2.

4.1 Основные соотношения моментного метода

Рассмотрим нелинейное уравнение Больцмана

$$\frac{Df}{Dt} = n_0^2 \hat{I}(f, f), \quad (4.1)$$

где f - нормированная на единицу функция распределения по скоростям, а n_0 - плотность частиц. Дифференциальный оператор в левой части при отсутствии внешних сил имеет вид

$$\frac{Df}{Dt} = \left(\frac{\partial}{\partial t} + \vec{v} \cdot \frac{\partial}{\partial \vec{r}} \right) n_0(\vec{r}, t) f(\vec{v}, \vec{r}, t), \quad (4.2)$$

а пятикратный интеграл столкновений $\hat{I}(f, f)$ представляется в форме

$$\hat{I}(f, f) = \int (f(\vec{v}_1) f(\vec{v}_2) - f(\vec{v}) f(\vec{v}')) g \sigma(g, \theta) d\vec{v}' d\vec{k}. \quad (4.3)$$

Здесь $\vec{v}$, $\vec{v}'$, $\vec{v}_1$, $\vec{v}_2$ - скорости сталкивающихся частиц до и после взаимодействия, $\vec{v}_1 = (\vec{v} + \vec{v}' + \vec{k}g)/2$, $\vec{v}_2 = (\vec{v} + \vec{v}' - \vec{k}g)/2$, $\vec{g} = \vec{v} - \vec{v}'$ - вектор относительной скорости, $\vec{k}$ - единичный вектор, направленный вдоль вектора относительной скорости частиц после столкновения. Угол рассеяния θ определяется соотношением $\cos \theta = \vec{k} \cdot \vec{g} / |\vec{g}|$. Величина $\sigma(g, \theta)$ представляет собой дифференциальное сечение рассеяния.

При применении моментного метода к решению уравнения Больцмана функция распределения раскладывается по базисным функциям, и уравнение сводится к системе уравнений для коэффициентов разложения. Для линеаризованного уравнения Больцмана такое разложение лежит в основе известного метода Чепмена-Энскога [104]. В нелинейном случае этот метод получил развитие в работах Барнета [105], [42] и Греда [44]. Вслед за Барнетом мы будем использовать в качестве базисных функций вещественные сферические ненормированные полиномы Эрмита

$$H_j(\vec{c}) = S_{l+1/2}^r(c^2) c^l Y_{lm}^i(\theta, \varphi), \quad i = 0, 1, \quad 0 \leq m \leq l. \quad (4.4)$$

Индекс j соответствует четырем индексам i , r , l , m . Здесь

$$S_{l+1/2}^r(x) = \frac{1}{r!} x^{-(l+1/2)} e^x \frac{d^r}{dx^r} (e^{-x} x^{r+l+1/2}) = \sum_{p=0}^r \frac{\Gamma(r+l+3/2) (-c)^{2p}}{p! (r-p)! \Gamma(p+l+3/2)} \quad (4.5)$$

полиномы Сонина (Лагерра), вещественные сферические гармоники $Y_{lm}^i(\theta, \varphi)$ определяются формулами

$$Y_{lm}^0(\theta, \varphi) = P_l^m(\cos \theta) \cos m\varphi, \quad Y_{lm}^1(\theta, \varphi) = P_l^m(\cos \theta) \sin m\varphi, \quad (4.6)$$

где $P_l^m(x)$ - присоединенные полиномы Лежандра, а величины c , θ , φ - сферические координаты вектора $\vec{c}$. Полиномы Эрмита ортогональны с весом $M(c) = \left(\frac{1}{\pi} \right)^{3/2} \exp(-c^2)$:

$$(H_j, H_p) = \int M(c) H_j(\vec{c}) H_p(\vec{c}) d^3c = \delta_{j,p} g_j. \quad (4.7)$$

Квадрат нормы полинома Эрмита $\|H_j\|^2 = g_j = \int M(c) H_j^2 d\vec{c}$ можно представить в виде

$$g_j = y_{lm}^i \sigma_{r,l}, \quad y_{lm}^i = \pi_l^m d_m^i \quad (4.8)$$

$$d_m^i = \pi(1 + \delta_{m0})(1 - \delta_{i1}\delta_{m0}), \quad \pi_l^m = \int_{-1}^1 (P_l^m(x))^2 dx = \frac{2(l+m)!}{(2l+1)(l-m)!} \quad (4.9)$$

$$\sigma_{r,l} = \int_0^\infty \frac{1}{\pi^{3/2}} e^{-c^2} (S_{l+1/2}^{(r)}(c^2) c^l)^2 c^2 dc = \frac{\Gamma(r+l+3/2)}{2\pi^{3/2} r!} \quad (4.10)$$

Здесь y_{lm}^i - нормировочный коэффициент сферических гармоник, $\sigma_{r,l}$ - нормировочный коэффициент полиномов Сонина.

Представим ФР в виде

$$f(\vec{v}, \vec{r}, t) = M_T(c) \sum_j C_j(\vec{r}, t) H_j(\vec{c}), \quad (4.11)$$

где $\vec{c} = \sqrt{\alpha}(\vec{v} - \vec{u})$, $\alpha = m/(2kT)$, а $M_T(c) = \left(\frac{m}{2kT\pi}\right)^{3/2} \exp(-c^2)$ - весовой максвеллиан с температурой T и средней скоростью $\vec{u}$. Разложение (4.11) сходится, если выполнено условие

$$\int (M_T(c))^{-1} f^2(\vec{v}) d^3v < \infty \quad (4.12)$$

Это условие будем называть критерием Грэда.

Если подставить (4.11) в правую часть уравнения Больцмана (4.1), умножить обе части уравнения на H_j и проинтегрировать по $\vec{v}$, то получим систему моментных уравнений для коэффициентов разложения C_j

$$\frac{D(n_0(\vec{r}, t) C_j)}{Dt} = n_0^2 \sum_0^\infty K_{j_1, j_2}^j C_{j_1} C_{j_2} \quad (4.13)$$

Дифференциальный оператор D/Dt представляет собой левые части моментных уравнений (см., например, [42, 106]). Его явный вид можно найти также в [107]. Матричные элементы (МЭ) интеграла столкновений K_{j_1, j_2}^j определяются следующим образом

$$K_{j_1, j_2}^j = \int H_j \hat{I}(M_T H_{j_1}, M_T H_{j_2}) d^3v / g_j. \quad (4.14)$$

Как легко видеть, МЭ являются размерными величинами. Их размерность есть $[K_{j_1, j_2}^j] = \frac{L^3}{T}$.

При решении релаксационных задач при постоянной плотности частиц используется уравнение (4.13) в безразмерном виде

$$\frac{DC_j}{D\tau} = \sum_0^\infty K'_{j_1, j_2}{}^j C_{j_1} C_{j_2}, \quad (4.15)$$

где безразмерное время $\tau = t/t_0$ измеряется в единицах t_0 , а безразмерные МЭ $K'_{j_1, j_2}{}^j$ отличаются от (4.14) множителем $t_0 n_0$.

В одномерных пространственных проблемах ФР по скоростям осесимметрична, и она разлагается по сферическим полиномам Эрмита только с двумя индексами - r и l . При этом базисные функции имеют вид $H_{rl} = S_{l+1/2}^r(c^2)c^l P_l(\cos\theta)$, а осесимметричные МЭ существенно упрощаются и зависят только от шести индексов $K_{r_1, l_1, r_2, l_2}^{r, l} = K_{r_1, l_1, 0, 0, r_2, l_2, 0, 0}^{r, l, 0, 0}$. Очень важным оказывается тот факт (см. [49]), что трехмерные МЭ пропорциональны соответствующим осесимметричным МЭ

$$K_{r_1, l_1, m_1, i_1, r_2, l_2, m_2, i_2}^{r, l, m, i} = \tilde{Z}_{l_1, m_1, i_1, l_2, m_2, i_2}^{l, m, i} K_{r_1, l_1, r_2, l_2}^{r, l} \quad (4.16)$$

где $\tilde{Z}_{l_1, m_1, i_1, l_2, m_2, i_2}^{l, m, i}$ - не зависящие от сечения рассеяния универсальные числовые коэффициенты, легко выражающиеся через коэффициенты Клебша-Гордана (см. [49], стр. 190-191). Можно показать, что

$$\tilde{Z}_{l_1, m_1, i_1, l_2, m_2, i_2}^{l, m, i} = \frac{\int Y_{l, m}^i(\theta, \varphi) Y_{l_1, m_1}^{i_1}(\theta, \varphi) Y_{l_2, m_2}^{i_2}(\theta, \varphi) d\Omega}{\int_{-1}^1 P_l(x) P_{l_1}(x) P_{l_2}(x) dx} \frac{y_{l_0}^0}{y_{lm}^i} \quad (4.17)$$

Существенно, что числа $\tilde{Z}_{l_1, m_1, i_1, l_2, m_2, i_2}^{l, m, i}$ могут отличаться от нуля только если $|l_1 - l_2| \leq l \leq l_1 + l_2$, число $l + l_1 + l_2$ - четное, $m = |m_1 \pm m_2|$ и $m + m_1 + m_2$ - четное (обобщенная теорема Гекке [108]). Соотношение (4.16) позволяет без потери общности исследовать только осесимметричные МЭ, зависящие от шести индексов.

Для изотропных задач в качестве базисных функций нужно использовать набор полиномов Сонина $H_r = S_{1/2}^r(c^2)$. МЭ при этом зависят лишь от трех индексов. Очевидно, что изотропные МЭ связаны с осесимметричными МЭ соотношениями

$$K_{r_1, r_2}^r = K_{r_1, 0, r_2, 0}^{r, 0} \quad (4.18)$$

Для линейных задач, когда рассматривается релаксация малой примеси на равновесном фоне, удобно выбрать в качестве параметров весового максвеллиана в (4.11) температуру T и среднюю скорость $\vec{u}$ фонового распределения. Тогда МЭ линейного интеграла столкновений представляют собой

$$K_{j_1, 0}^j = \int H_j \hat{I}(M_T H_{j_1}, M_T) d^3v / g_j \quad (4.19)$$

Мы будем называть такие МЭ линейными МЭ первого типа. При рассмотрении линеаризованного уравнения Больцмана вводятся и линейные МЭ второго типа

$$K_{0, j_2}^j = \int H_j \hat{I}(M_T, M_T H_{j_2}) d^3v / g_j \quad (4.20)$$

Основной трудностью в реализации моментного метода является расчет матрицы МЭ. При больших значениях индексов формулы оказываются исключительно громоздкими, что не позволяет выполнить расчеты МЭ даже на современных ЭВМ. Так, в [47] для

изотропного по скоростям уравнения Больцмана в предположении о независимости сечения рассеяния от углов были получены формулы, содержащие шестикратное суммирование. В [48] при произвольной угловой зависимости сечения рассеяния были получены формулы с четырехкратным суммированием. При расчетах по формулам [47] и [48] машинное время быстро возрастает, а точность падает с ростом индексов матричных элементов.

В [49] был предложен новый подход к расчету МЭ. Он основан на свойстве инвариантности интеграла столкновений по отношению к выбору базисных функций. Заметим, что в разложении (4.11) может быть использован весовой максвеллиан с различными значениями температуры и средней скорости. В осесимметричном случае средние скорости $\vec{u}$ направлены вдоль оси симметрии $\vec{e}_z$ и отличаются лишь величиной $u = |\vec{u}|$. Выбор параметров T и u фиксирует начало отсчета и единицу измерения скорости, и, тем самым, влияет на вид базисных функций. Переход от параметров T_0, u_0 к T_1, u_1 соответствует, по существу, переходу от одного базиса к другому. В то же время, ФР может быть представлена как в одном базисе, так и в другом, что позволяет связать коэффициенты разложения в этих базисах, C_k^0, C_j^1 матрицей перехода

$$C_j^1 = \sum_{k=0}^{\infty} D_{j,k}(T_1, u_1; T_0, u_0) C_k^0 \quad (4.21)$$

Инвариантность интеграла столкновений относительно выбора базиса приводит к соотношению

$$K_{k',j'}^{i'} = \sum_{i=0}^{\infty} D_{i',i}(T_1, u_1; T_0, u_0) \sum_{k=0}^{\infty} \sum_{j=0}^{\infty} D_{k,k'}(T_0, u_0; T_1, u_1) D_{j,j'}(T_0, u_0; T_1, u_1) K_{k,j}^i \quad (4.22)$$

В книге [49] рассчитаны матрицы перехода $D_{j,k}(T_1, u_1; T_0, u_0)$. Связи между МЭ получаются при дифференцировании (4.22) по параметрам T_1, u_1 . Дифференцируя (4.22) по u_1 и полагая $T_1 = T_0, u_1 = u_0$, авторы [49] получают

$$\begin{aligned} 0 = & -\frac{l}{2l-1} K_{r_1, l_1, r_2, l_2}^{r, l-1} + \frac{r(l+1)}{2l+3} K_{r_1, l_1, r_2, l_2}^{r-1, l+1} + \frac{l_1+1}{2l_1+1} K_{r_1, l_1+1, r_2, l_2}^{r, l} - \frac{l_1(r_1+1)}{2l_1+1} K_{r_1+1, l_1-1, r_2, l_2}^{r, l} + \\ & + \frac{l_2+1}{2l_2+1} K_{r_1, l_1, r_2, l_2+1}^{r, l} - \frac{l_2(r_2+1)}{2l_2+1} K_{r_1, l_1, r_2+1, l_2-1}^{r, l} \end{aligned} \quad (4.23)$$

Дифференцирование (4.22) по T_1 при $T_1 = T_0, u_1 = u_0$ дает

$$\begin{aligned} 0 = & \left(r_1 + r_2 - r + (l_1 + l_2 - l)/2 - T \frac{d}{dT} \right) K_{r_1, l_1, r_2, l_2}^{r, l} + r K_{r_1, l_1, r_2, l_2}^{r-1, l} - \\ & - (r_1+1) K_{r_1+1, l_1, r_2, l_2}^{r, l} - (r_2+1) K_{r_1, l_1, r_2+1, l_2}^{r, l} \end{aligned} \quad (4.24)$$

Формулы (4.23), (4.24) справедливы для произвольных потенциалов взаимодействия. Именно они являются основой для построения рекуррентной процедуры последовательного отыскания МЭ.

В случае степенной зависимости потенциала V от расстояния r ($V \sim 1/r^\kappa$) зависимость дифференциального сечения от угла рассеяния и от относительной скорости частиц может быть разделена, т.е. сечение рассеяния может быть представлено в виде

$$g\sigma(g, z) = \frac{1}{4\pi} g^\gamma F_\gamma(z), \quad z = \sin^2(\theta/2), \quad \gamma = (\kappa - 4)/\kappa \quad (4.25)$$

где θ - угол рассеяния. В [49] показано, что при степенном характере зависимости сечения от g , при любой угловой части $F_\gamma(z)$ МЭ пропорционален T^μ , где $\mu = \gamma/2$. В этом случае равенство (4.24) имеет вид

$$(r_1 + r_2 - r + (l_1 + l_2 - l)/2 - \mu)K_{r_1, l_1, r_2, l_2}^{r, l} + rK_{r_1, l_1, r_2, l_2}^{r-1, l} - \\ - (r_1 + 1)K_{r_1+1, l_1, r_2, l_2}^{r, l} - (r_2 + 1)K_{r_1, l_1, r_2+1, l_2}^{r, l} = 0, \quad (4.26)$$

и связи между МЭ оказываются алгебраическими.

В кинетической теории обычно рассматриваются неориентированные частицы и сечения рассеяния, зависящие только от относительной скорости g и угла рассеяния θ , т.е.

$$\sigma = \sigma(g, \theta) \quad (4.27)$$

В этом случае на МЭ накладываются некоторые ограничения, определяемые обобщенной теоремой Гекке.

В предложенной еще Гильбертом в [34, 39] итерационной процедуре уравнение Больцмана с нелинейным столкновительным оператором сводилось к бесконечной системе линейных интегральных уравнений. На примере твердых шаров Гильберт показал, что все эти уравнения представляют собой линейные интегральные уравнения Фредгольма 2-го рода с симметричным и ортогонально-инвариантным ядром $A(\vec{v}, \vec{v}_1)$. Ортогональная инвариантность определяется как инвариантность относительно поворота координатных осей. Ядро при этом зависит только от $|\vec{v}|$, $|\vec{v}_1|$ и скалярного произведения $(\vec{v}, \vec{v}_1)$. В работах [40, 41] Гекке доказал, что интегральный оператор $\hat{A}$ с ортогонально-инвариантным ядром $A(\vec{v}, \vec{v}_1)$ переводит любую функцию вида $\psi(v)Y_{lm}^i(\vec{\Omega})$ в функцию

$$\hat{A}(\psi(v)Y_{lm}^i(\vec{\Omega})) = \hat{A}^l(\psi(v))Y_{lm}^i(\vec{\Omega}) \quad (4.28)$$

Здесь $\vec{v} = v\vec{\Omega}$, а оператор $\hat{A}^l$ не зависит от индексов i, m .

Линейный больцмановский оператор обладает свойством ортогональной инвариантности для произвольных сечений вида (4.27). Поэтому теорема Гекке (4.28) для неориентированных частиц выполнена всегда. При разложении по сферическим полиномам

Эрмита теорема Гекке приводит к тому, что в осесимметричном случае отличными от нуля оказываются только линейные МЭ вида $K_{r_1, l_1, 0, 0}^{r, l}, K_{0, 0, r_2, l}^{r, l}$, т.е.

$$K_{r_1, l_1, 0, 0}^{r, l} = \Lambda_{r, r_1, l}^{(1)} \delta_{l_1, l}, \quad K_{0, 0, r_2, l}^{r, l} = \Lambda_{r, r_2, l}^{(2)} \delta_{l_2, l} \quad (4.29)$$

Если выполнено (4.27), то в ноль обращаются и многие нелинейные МЭ. В [49] показано, что нелинейные МЭ $K_{r_1, l_1, r_2, l_2}^{r, l}$ могут быть отличны от нуля только при выполнении условий

$$|l_1 - l_2| \leq l \leq l_1 + l_2, \quad l + l_1 + l_2 - \text{четное число} \quad (4.30)$$

Условия (4.30) и являются обобщением теоремы Гекке для линейных МЭ на случай нелинейных МЭ. Обобщенную теорему Гекке можно сформулировать и следующим образом: для сечения рассеяния вида (4.27) нелинейный интеграл столкновений от двух функций, каждая из которых представляет собой произведение функции, зависящей только от модуля скорости, и сферической гармоники, можно разложить в конечную сумму вида

$$\hat{I}(\psi_1(v_1)Y_{l_1 m_1}(\vec{\Omega}_1), \psi_2(v_2)Y_{l_2 m_2}(\vec{\Omega}_2)) = \sum_{l_3} C_{l_1, l_2}^{l_3}(v) Y_{l_3 m_1 + m_2}(\vec{\Omega}), \quad (4.31)$$

причем суммирование по l_3 проводится только в диапазоне, определяемом условиями (4.30).

Здесь $Y_{lm}(\vec{\Omega})$ - комплексные сферические гармоники.

В ходе исследования структуры столкновительного оператора и свойств МЭ для сферически симметричного потенциала взаимодействия в [109] было обнаружено, что обнуление некоторых нелинейных МЭ приводит к возникновению дополнительных связей между линейными изотропными, $K_{r_1, 0, 0, 0}^{r, 0}$, и линейными неизотропными, $K_{r_1, l, 0, 0}^{r, l}$, элементами, и, в конечном счете, к возможности определения вторых через первые. Это, в свою очередь, означает, что все нелинейные осесимметричные матричные элементы могут быть определены через линейные изотропные. В [49] была предложена рекуррентная процедура последовательного определения МЭ, стартовыми для которой являются линейные изотропные МЭ.

Отметим, что в том случае, когда функция распределения изотропна, в качестве базисных функций вместо сферических полиномов Эрмита $H_j(\vec{c})$ выбирают полиномы Сонина $S_{1/2}^r(c^2)$. При этом в разложении (4.11) используются весовые максвеллианы, отличающиеся только температурой, а МЭ зависят только от трех индексов. Переход от одной температуры к другой соответствует, как и в осесимметричном случае, переходу от одного базиса к другому. Инвариантность интеграла столкновений по отношению к выбору базиса, как и раньше, приводит к связям между МЭ. Эти связи получаются при дифференцировании соотношений между МЭ в разных базисах по температуре и совпадают

с (4.24) при $l = l_1 = l_2 = 0$. Для степенных потенциалов взаимодействия связи между изотропными МЭ имеют вид

$$(r_1 + r_2 - r - \mu)K_{r_1, r_2}^r + rK_{r_1, r_2}^{r-1} - (r_1 + 1)K_{r_1+1, r_2}^r - (r_2 + 1)K_{r_1, r_2+1}^r = 0 \quad (4.32)$$

1.2 Ядра интеграла столкновений

Ядра нелинейного интеграла столкновений

Как отмечалось в предыдущем параграфе, для сходимости разложения (4.11) необходимо выполнение критерия Грэда (4.12). Поскольку ограничения, связанные с этим критерием, возникают при разложении по полиномам Сонина, ортогональным с максвелловским весом, то можно избавиться от этой трудности, если рассматривать разложение ФР только по сферическим гармоникам. Для удобства дальнейших выкладок будем рассматривать ФР в системе отсчета, движущейся со средней скоростью максвеллиана, около которого проводится разложение. Функция распределения при этом представляется в виде

$$f(\vec{v}) = \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=0}^l \sum_{i=0}^1 f_{l,m}^i(v) Y_{l,m}^i(\theta, \varphi) \quad (4.33)$$

В работе [110] показано, что интеграл столкновений можно записать в виде

$$\hat{I}(f, f) = \int G(\vec{v}, \vec{v}_1, \vec{v}_2) f(\vec{v}_1) f(\vec{v}_2) d\vec{v}_1 d\vec{v}_2 \quad (4.34)$$

Здесь $G(\vec{v}, \vec{v}_1, \vec{v}_2)$ – ядро интеграла столкновений, зависящее от векторных скоростей. Это ядро содержит δ – функцию, отражающую выполнение закона сохранения энергии в столкновении. Ядро $G(\vec{v}, \vec{v}_1, \vec{v}_2)$ связано с матричными элементами соотношением

$$G(\vec{v}, \vec{v}_1, \vec{v}_2) = M_T(c) \sum_{j, j_1, j_2} H_j(\vec{c}) K_{j_1, j_2}^j H_{j_1}(\vec{c}_1) H_{j_2}(\vec{c}_2) / (g_{j_1} g_{j_2}) \quad (4.35)$$

Здесь безразмерные скорости $\vec{c}$, $\vec{c}_1$, $\vec{c}_2$ связаны со скоростями $\vec{v}$, $\vec{v}_1$, $\vec{v}_2$ соотношениями $\vec{c} = \sqrt{\alpha} \vec{v}$, $\vec{c}_1 = \sqrt{\alpha} \vec{v}_1$, $\vec{c}_2 = \sqrt{\alpha} \vec{v}_2$, где $\alpha = m/(2kT)$ определяется температурой T базисного максвеллиана, возле которого проводится разложение. Используя свойство (4.16) и тот факт, что коэффициенты $\tilde{Z}_{l_1, m_1, i_1, l_2, m_2, i_2}^{l, m, i}$ не зависят от индексов r , r_1 , r_2 , получаем более простое представление ядра

$$G(\vec{v}, \vec{v}_1, \vec{v}_2) = \sum_{l, m, i} \sum_{l_1, m_1, i_1} \sum_{l_2, m_2, i_2} Y_{l, m}^i(\theta, \varphi) \tilde{Z}_{l_1, m_1, i_1, l_2, m_2, i_2}^{l, m, i} G_{l_1, l_2}^l(v, v_1, v_2) \frac{Y_{l_1, m_1}^{i_1}(\theta_1, \varphi_1) Y_{l_2, m_2}^{i_2}(\theta_2, \varphi_2)}{Y_{l_1, m_1}^{i_1} Y_{l_2, m_2}^{i_2}}, \quad (4.36)$$

где

$$G_{l_1, l_2}^l(v, v_1, v_2) = M_T(c) \sum_{r, r_1, r_2} c^l S_{l+1/2}^r(c^2) K_{r_1, l_1, r_2, l_2}^{r, l} \frac{c_1^{l_1} S_{l_1+1/2}^{r_1}(c_1^2) c_2^{l_2} S_{l_2+1/2}^{r_2}(c_2^2)}{\sigma_{r_1 l_1} \sigma_{r_2 l_2}}. \quad (4.37)$$

Отметим, что теперь для построения ядра $G(\vec{v}, \vec{v}_1, \vec{v}_2)$ достаточно знания «осесимметричных ядер» $G_{l_1, l_2}^l(v, v_1, v_2)$, которые, в свою очередь, выражаются через осесимметричные МЭ $K_{r_1, l_1, r_2, l_2}^{r, l}$. Умножим обе части уравнения Больцмана (4.1) на функцию $Y_{l, m}^i(\theta, \varphi)/y_{l, m}^i$ и проинтегрируем по θ и φ . Если теперь в интеграле столкновений (4.34) с ядром в виде (4.36) выполнить интегрирование по угловым переменным $\theta_1, \varphi_1, \theta_2, \varphi_2$, то можно получить следующую систему уравнений для проекций ФР на сферические гармоники

$$\frac{\tilde{D}(n_0(\vec{r}, t) f_{l, m}^i(v))}{\tilde{D}t} = n_0^2 \sum_{l_1, l_2, m_1, m_2, i_1, i_2} \tilde{Z}_{l_1, m_1, i_1, l_2, m_2, i_2}^{l, m, i} \int_0^\infty \int_0^\infty G_{l_1, l_2}^l(v, v_1, v_2) f_{l_1, m_1}^{i_1}(v) f_{l_2, m_2}^{i_2}(v) v_1^2 v_2^2 dv_1 dv_2. \quad (4.38)$$

В соотношении (4.38) суммирование проводится по индексам, удовлетворяющим обобщенной теореме Гекке. Дифференциальный оператор $\tilde{D}/\tilde{D}t$ представляет собой левые части моментных уравнений и его явный вид здесь рассматриваться не будет. Заметим, что коэффициенты разложения ФР по сферическим гармоникам $f_{l, m}^i(v)$ связаны с коэффициентами разложения ФР по сферическим полиномам Эрмита

$$C_j = \frac{1}{\sigma_{r, l}} \int_0^\infty f_{l, m}^i(v) c^l S_{l+1/2}^r(c^2) v^2 dv \quad (4.39)$$

Выражение (4.37) можно рассматривать как определение ядра $G_{l_1, l_2}^l(v, v_1, v_2)$. В этом определении использованы МЭ и безразмерные скорости, зависящие от выбранного температурного базиса. Для доказательства корректности определения необходимо показать, что так определенные ядра действительно не зависят от температуры базисного максвеллиана. С этой целью для произвольного целого l определим набор функций $H^l = \{M(c) c^l S_{l+1/2}^r(c^2)\}$, где $M(c) = \left(\frac{1}{\pi}\right)^{3/2} \exp(-c^2)$. Функции из H^l образуют базис для множества F зависящих только от модуля скорости ФР $f(v)$, рассматриваемых в температурном базисе T , т.е. для множества функций $\varphi(c) = \alpha^{-3/2} f(c/\sqrt{\alpha})$. Чтобы подчеркнуть зависимость функций из H^l от T , обозначим элементы базиса через $|l, r, T\rangle$.

Рассмотрим сопряженное к F пространство – пространство функционалов F^* , действующих на функции из F по правилу $\psi_\rho(f) = \int \rho(v) f(v) v^2 dv$. В фиксированном температурном базисе этот функционал приобретает вид

$$\psi_g(\varphi) = \int g(c) \varphi(c) c^2 dc, \quad (4.40)$$

где $g(c) = \rho(c/\alpha)$. Сопряженный к H^l базис H_l^* состоит из функционалов ψ_l^k таких, что $\psi_l^k(|l, r, T\rangle) = \delta_r^k$. Легко видеть, что вследствие свойств ортогональности полиномов Сонина такими функционалами будут

$$\psi_l^k(\varphi) = \int \frac{1}{\sigma_{l,r}} c^l S_{l+1/2}^k(c^2) \varphi(c) c^2 dc. \quad (4.41)$$

Обозначим элементы сопряженного базиса через $\langle l, k, T|$, а действие функционалов из F^* на функции из F - через $\langle \psi | f \rangle$.

Определим теперь в базисе T интегральный оператор $\hat{I}_{l_1, l_2; T}^l$, соответствующий правой части равенства (4.37). Во введенных обозначениях имеем

$$\hat{I}_{l_1, l_2; T}^l = \sum_{r, r_1, r_2} |l, r, T\rangle K_{r_1, l_1, r_2, l_2}^{r, l}(T) \langle l_1, r_1, T| \langle l_2, r_2, T|. \quad (4.42)$$

В [49] получены формулы, по которым преобразуются базисные функции $\langle l, r, T_0|$ и МЭ при переходе от одного температурного базиса T_0 к другому T_1 . В наших обозначениях они могут быть легко получены при использовании представления для единичного оператора

$$\hat{J}^l = \sum_r |l, r, T\rangle \langle l, r, T| \quad (4.43)$$

в базисе T в пространстве H^l . Действительно,

$$|l, r, T_1\rangle = \sum_k |l, k, T_0\rangle \langle l, k, T_0| l, r, T_1\rangle = \sum_k D_{kr}^l(T_0, T_1) |l, k, T_0\rangle, \quad (4.44)$$

где $D_{kr}^l(T_0, T_1) = \langle l, k, T_0| l, r, T_1\rangle$. Заметим, что оператор $\hat{J}^l$ является единичным и в пространстве H_l^* , поэтому

$$\langle l, r, T_1| = \sum_k \langle l, r, T_1| l, k, T_0\rangle \langle l, k, T_0| = \sum_k D_{rk}^l(T_1, T_0) \langle l, k, T_0|. \quad (4.45)$$

Согласно [49], МЭ преобразуются по формулам

$$K_{r_1, l_1, r_2, l_2}^{r, l}(T_1) = \sum_{k, k_1, k_2} D_{rk}^l(T_1, T_0) K_{k_1, l_1, k_2, l_2}^{k, l}(T_0) D_{k_1 r_1}^{l_1}(T_0, T_1) D_{k_2 r_2}^{l_2}(T_0, T_1) = \sum_{k k_1 k_2} \langle l, r, T_1| l, k, T_0\rangle K_{k_1, l_1, k_2, l_2}^{k, l}(T_0) \times \\ \times \langle l_1, k_1, T_0| l_1, r_1, T_1\rangle \langle l_2, k_2, T_0| l_2, r_2, T_1\rangle. \quad (4.46)$$

Запишем теперь интегральный оператор $\hat{I}_{l_1, l_2; T_1}^l$ в базисе T_1 и заменим МЭ в соответствии с (4.46)

$$\hat{I}_{l_1, l_2; T_2}^l = \sum_{r, r_1, r_2} |l, r, T_1\rangle K_{r_1, l_1, r_2, l_2}^{r, l}(T_1) \langle l_1, r_1, T_1| \langle l_2, r_2, T_1| = \sum_{r, r_1, r_2} \sum_{k, k_1, k_2} |l, r, T_1\rangle \langle l, r, T_1| l, k, T_0\rangle K_{k_1, l_1, k_2, l_2}^{k, l}(T_0) \times \\ \times \langle l_1, k_1, T_0| l_1, r_1, T_1\rangle \langle l_2, k_2, T_0| l_2, r_2, T_1\rangle \langle l_1, r_1, T_1| \langle l_2, r_2, T_1|. \quad (4.47)$$

Если учесть, что суммирование по r , r_1 и r_2 приводят к выделению трех единичных операторов, то найдем

$$\hat{I}_{l_1, l_2; T_1}^l = \sum_{k, k_1, k_2} |l, k, T_0\rangle K_{k_1, l_1, k_2, l_2}^{k, l}(T_0) \langle l_1, k_1, T_0 | \langle l_2, k_2, T_0 | = \hat{I}_{l_1, l_2; T_0}^l. \quad (4.48)$$

Последнее равенство показывает, что интегральные операторы с ядрами, соответствующими формуле (4.37) в разных температурных базисах, совпадают. Это значит, что и ядра этих интегральных операторов совпадают, и, следовательно, (4.37) определяет независящее от базиса ядро $G_{l_1, l_2}^l(v, v_1, v_2)$.

Как видно из (4.37), без потери общности интеграл столкновений можно рассматривать в осесимметричном случае. При этом

$$\hat{I}(f, f) = \int G(\vec{v}, \vec{v}_1, \vec{v}_2) f(\vec{v}_1) f(\vec{v}_2) d\vec{v}_1 d\vec{v}_2 = \sum_{l_1, l_2} P_l(x) \left(\int_0^\infty \int_0^\infty G_{l_1 l_2}^l(v, v_1, v_2) f_{l_1}(v_1) f_{l_2}(v_2) v_1^2 v_2^2 dv_1 dv_2 \right) \quad (4.49)$$

Здесь $x = \cos \theta$, θ - угол между вектором скорости $\vec{v}$ и направлением оси симметрии e_z , $f_l(v)$ - коэффициенты разложения ФР по полиномам Лежандра

$$f(\vec{v}) = \sum_{l=0}^{\infty} f_l(v) P_l(x). \quad (4.50)$$

Суммирование в (4.49) по l_1 , l_2 согласно обобщенной теореме Гекке проводится по комбинациям индексов, удовлетворяющим условиям: $|l_1 - l_2| \leq l \leq l_1 + l_2$, $l + l_1 + l_2$ - четное число.

Тут необходимо сделать одно замечание. Интеграл столкновений (4.49) записан для простого газа. Однако такое же ядро можно получить, если при изучении смеси газов

рассмотреть $\left(\frac{\partial f^a(\vec{v})}{\partial t} \right)_{(col)}^{(a,b)}$ - скорость изменения ФР частиц сорта a при их

взаимодействии с частицами сорта b в предположении, что массы частиц одинаковы, а потенциал взаимодействия такой же, как и у исходного простого газа. В этих предположениях

$$\left(\frac{\partial f^a(\vec{v})}{\partial t} \right)_{(col)}^{(a,b)} = \sum_{l_1, l_2} P_l(x) \left(\int_0^\infty \int_0^\infty G_{l_1 l_2}^l(v, v_1, v_2) f_{l_1}^a(v_1) f_{l_2}^b(v_2) v_1^2 v_2^2 dv_1 dv_2 \right) \quad (4.51)$$

В случае простого газа из-за симметрии произведения $f_{l_1}(v_1) f_{l_2}(v_2)$ относительно перестановки $v_1 \leftrightarrow v_2$ и $l_1 \leftrightarrow l_2$ ядро $G_{l_1 l_2}^l(v, v_1, v_2)$ можно заменить на

$\hat{G}_{l_1 l_2}^l(v, v_1, v_2) = \frac{1}{2} (G_{l_1 l_2}^l(v, v_1, v_2) + G_{l_2 l_1}^l(v, v_2, v_1))$. Однако мы в дальнейшем будем рассматривать несимметризованные ядра и для простого газа.

Отметим, что каждое ядро может быть представлено в виде разности ядер интегралов обратных и прямых столкновений, т.е.

$$G_{l_1 l_2}^l(v, v_1, v_2) = G_{l_1 l_2}^{+l}(v, v_1, v_2) - G_{l_1 l_2}^{-l}(v, v_1, v_2) \quad (4.52)$$

Ядра линеаризованного интеграла столкновений

При малых отклонениях от равновесия уравнение Больцмана может быть линеаризовано, и его решение находится методом последовательных приближений. Впервые такой метод решения был предложен Гильбертом в работе [34]. В нулевом приближении решение есть произведение плотности частиц на максвелловское распределение

$$f_0(\vec{r}, \vec{v}) = n(\vec{r}) M_T(v), \quad (4.53)$$

средняя скорость $\vec{u}$ и температура T которого зависят от $\vec{r}$. В первом приближении решение представляется в виде

$$f_1 = n(\vec{r}) M_T(v) (1 + \varphi), \quad (4.54)$$

где $\varphi \ll 1$. Интеграл столкновений при этом зависит только от функции φ . Уравнение в первом приближении имеет вид

$$n^2 J(\varphi) = \frac{D}{Dt} [f_0] \quad (4.55)$$

Здесь $\frac{D}{Dt} [f_0]$ соответствует левой (дифференциальной) части уравнения Больцмана и при построении первого приближения представляет собой известную функцию. Дальнейшие исследования в [34] проводятся для модели твердых шаров. Гильбертом показано, что результат действия оператора J на φ представляет собой сумму четырех частей. В наших обозначениях его можно записать в виде

$$J(\varphi) = \hat{I}(M_T \varphi, M_T) + \hat{I}(M_T, M_T \varphi) = \hat{I}^+(M_T \varphi, M_T) + \hat{I}^+(M_T, M_T \varphi) - \hat{I}^-(M_T \varphi, M_T) - \hat{I}^-(M_T, M_T \varphi) = J^{(+,1)}(\varphi) + J^{(+,2)}(\varphi) - J^{(-,1)}(\varphi) - J^{(-,2)}(\varphi) \quad (4.56)$$

Здесь индексы «+», «-» соответствуют интегралу обратных и прямых столкновений, «1» - интегралу столкновений первого рода, когда рассматривается рассеяние $M_T \varphi$ на максвелловском распределении, «2» - интегралу столкновений второго рода, когда рассматривается рассеяние максвеллиана на $M_T \varphi$. В [34] показано, что $J^{(-,1)}(\varphi)$ есть

произведение $\varphi(\vec{v})$ на функцию $k_H(v)$, которая зависит только от модуля скорости, а линеаризованный интеграл столкновений $J(\varphi)$ имеет вид

$$J(\varphi) = -k_H(v)\varphi(\vec{v}) + \int A(\vec{v}, \vec{v}_1)\varphi(\vec{v}_1)d\vec{v}_1 \quad (4.57)$$

Это означает, что уравнение (4.55) представляет собой линейное интегральное уравнение второго рода. В [34] для модели твердых шаров получены выражения для $k_H(v)$ и ядра $A(\vec{v}, \vec{v}_1)$. Показано, что $A(\vec{v}, \vec{v}_1)$ состоит из трех частей, $A^{(+,1)}(\vec{v}, \vec{v}_1)$, $A^{(+,2)}(\vec{v}, \vec{v}_1)$ и $A^{(-,2)}(\vec{v}, \vec{v}_1)$, причем $A^{(+,1)}(\vec{v}, \vec{v}_1) = A^{(+,2)}(\vec{v}, \vec{v}_1) = A^+(\vec{v}, \vec{v}_1)$. Поэтому ядро линеаризованного интеграла столкновений имеет вид

$$A(\vec{v}, \vec{v}_1) = 2A^+(\vec{v}, \vec{v}_1) - A^{(-,2)}(\vec{v}, \vec{v}_1) \quad (4.58)$$

Ядро $A(\vec{v}, \vec{v}_1)$ является ортогонально инвариантным. Это свойство позволило Гекке в [41] построить разложение этого ядра по сферическим гармоникам.

Ядра линейного интеграла столкновений

Пусть имеется небольшая примесь на фоне основного газа, имеющего максвелловское распределение. Пусть $f(\vec{v}, \vec{r}, t)$ - функция распределения этой примеси, $n(\vec{r}, t) = \int f(\vec{v}, \vec{r}, t)d\vec{v}$ - плотность частиц примеси. В этом случае интеграл столкновений имеет вид $\hat{I}(f, M_T)$, т.е. в нем присутствуют только члены первого рода. Уравнение Больцмана для ФР примеси в отсутствии внешних сил тогда можно записать

$$\frac{Df}{Dt} = \left(\frac{\partial}{\partial t} + \vec{v} \cdot \frac{\partial}{\partial \vec{r}} \right) f(\vec{v}, \vec{r}, t) = \int L^{(1)}(\vec{v}, \vec{v}_1)f(\vec{v}_1)d\vec{v}_1 = -k(v)f(\vec{v}) + \int L^{(+,1)}(\vec{v}, \vec{v}_1)f(\vec{v}_1)d\vec{v}_1, \quad (4.59)$$

где

$$L^{(1)}(\vec{v}, \vec{v}_1) = \int G(\vec{v}, \vec{v}_1, \vec{v}_2)M_T(v_2)d\vec{v}_2 \quad (4.60)$$

является ядром линейного интеграла столкновений первого рода. В случае равных масс частиц примеси и фонового газа из сравнения линеаризованного и линейного уравнений (4.55) и (4.59) с учетом (4.54), (4.57), (4.58) имеем

$$k_H(v) = M_T(v)k(v), \quad A^+(\vec{v}, \vec{v}_1) = M_T(v_1)L^{(+,1)}(\vec{v}, \vec{v}_1) \quad (4.61)$$

Здесь, конечно, предполагается, что концентрация, температура и средняя скорость фонового газа совпадают с соответствующими параметрами нулевого приближения.

Соотношение (4.60) представляет собой связь между ядрами нелинейного и линейного интегралов столкновений. Аналогичные соотношения могут быть получены и для ядер $G_{l,0}^l(v, v_1, v_2)$, зависящих только от модулей скоростей. Действительно, подставим (4.36) в (4.60). Максвеллиан в формуле (4.60) зависит только от модуля скорости, и при

интегрировании по углам в сумме остаются только те ядра $G_{l,l_2}^l(v, v_1, v_2)$, у которых $l_2 = 0$. Согласно обобщенной теореме Гекке отличны от нуля лишь ядра вида $G_{l,0}^l(v, v_1, v_2)$. Кроме того, в силу (4.17), коэффициенты $\check{Z}_{l,m_1,i_1,0,0,0}^{l,m,i}$ отличны от нуля лишь при $m = m_1$, $i = i_1$. Поэтому в сумме для $L^{(1)}(\vec{v}, \vec{v}_1)$ необходимо проводить суммирование только по l , m , i . Используя теорему сложения для присоединенных функций Лежандра (см. [73]), находим

$$L^{(1)}(\vec{v}, \vec{v}_1) = \sum_{l,m,i} Y_{l,m}^i(\theta, \varphi) \int_0^\infty G_{l,0}^l(v, v_1, v_2) M(v_2) v_2^2 dv_2 \frac{Y_{l,m}^i(\theta_1, \varphi_1)}{Y_{l,m}^i} = \sum_l \frac{2l+1}{2\pi} L_l^{(1)}(v, v_1) P_l\left(\frac{(\vec{v}, \vec{v}_1)}{v \cdot v_1}\right) \quad (4.62)$$

где

$$L_l^{(1)}(v, v_1) = \int_0^\infty G_{l,0}^l(v, v_1, v_2) M_T(v_2) v_2^2 dv_2 \quad (4.63)$$

Таким образом, ядро $L^{(1)}(\vec{v}, \vec{v}_1)$ зависит лишь от v , v_1 и $\cos\theta = (\vec{v}, \vec{v}_1)/(vv_1)$, и, следовательно, ортогонально инвариантно. При этом коэффициенты разложения $L^{(1)}(v, v_1; \cos\theta)$ по $P_l(\cos\theta)$ есть $\frac{2l+1}{2\pi} L_l^{(1)}(v, v_1)$.

Используя (4.59), коэффициенты разложения линейного интеграла столкновений по полиномам Лежандра можно представить в виде

$$I_l(f, M_T) = -k(v) f_l(v) + \int_0^\infty L_l^{(+,1)}(v, v_1) f_l(v_1) v_1^2 dv_1 \quad (4.64)$$

По аналогии с (4.60) можно ввести ядро линейного интеграла столкновений второго рода. Оно имеет вид

$$L^{(2)}(\vec{v}, \vec{v}_2) = \int G(\vec{v}, \vec{v}_1, \vec{v}_2) M_T(v_1) d\vec{v}_1 \quad (4.65)$$

Коэффициенты разложения этого ядра по полиномам Лежандра связаны с ядрами $G_{0,l}^l(v, v_1, v_2)$ соотношением

$$L_l^{(2)}(v, v_2) = \int_0^\infty G_{0,l}^l(v, v_1, v_2) M_T(v_1) v_1^2 dv_1 \quad (4.66)$$

Ядро $L^{(2)}(\vec{v}, \vec{v}_2)$ также является ортогонально инвариантным. Очевидно, что

$$A^{(2)}(\vec{v}, \vec{v}_1) = M_T(v_1) L^{(2)}(\vec{v}, \vec{v}_1) \quad (4.67)$$

и

$$A^{(-,2)}(\vec{v}, \vec{v}_1) = M_T(v_1) L^{(-,2)}(\vec{v}, \vec{v}_1). \quad (4.68)$$

Поскольку, согласно результатам Гильберта, $A^{(+,1)}(\vec{v}, \vec{v}_1) = A^{(+,2)}(\vec{v}, \vec{v}_1) = A^+(\vec{v}, \vec{v}_1)$, то и

$$L^{(+,1)}(\vec{v}, \vec{v}_1) = L^{(+,2)}(\vec{v}, \vec{v}_1) = L^+(\vec{v}, \vec{v}_1). \quad (4.69)$$

Перейдем в (4.59) к безразмерным переменным, выбирая в качестве масштабов скорости и времени величины $v_T = 1/\sqrt{\alpha}$ и $\tau = 1/(n\Sigma v_T)$. Для модели твердых шаров из результатов [34] следует

$$k(c) = \frac{e^{-c^2}}{\pi^{1/2}} + (1/2c + c)\Phi(c), \quad (4.70)$$

Здесь c - безразмерная скорость, $\Phi(c)$ - интеграл вероятности. Как уже отмечалось, в работе [41] Гекке построил разложение по сферическим гармоникам ядра Гильберта $A(\vec{v}, \vec{v}_1)$ для модели твердых шаров и получил формулы для $A_l(v, v_1)$. В соответствии с (4.61), (4.68) $A_l(v, v_1)$ связаны с коэффициентами разложения линейных ядер $L^+(\vec{v}, \vec{v}_1)$, $L^{(-,2)}(\vec{v}, \vec{v}_1)$. В безразмерных скоростях эта связь имеет вид

$$A_l(c, c_1) = M(c_1)(2L_l^+(c, c_1) - L_l^{(-,2)}(c, c_1)) \quad (4.71)$$

Используя результаты [41] легко получить формулы для $L_l^+(c, c_1)$ и $L_l^{(-,2)}(c, c_1)$. Эти формулы имеют вид

$$L_l^+(c, c_1) = \left(\frac{1}{\pi}\right)^{3/2} e^{-c^2} 4\pi \left[\frac{1}{2l+1} \frac{c_{\min}^{2l+1}}{(cc_1)^{l+1}} + \frac{1}{cc_1} \int_{|u| < c_{\min}} u e^{u^2} \frac{\sqrt{\pi}}{2} \Phi(u) P_l(u/c) P_l(u/c_1) du \right] \quad (4.72)$$

$$L_l^{(-,2)}(c, c_1) = \left(\frac{1}{\pi}\right)^{3/2} e^{-c^2} 4\pi \left[\frac{1}{(2l+1)(2l+3)} \frac{c_{\min}^{2l+3}}{(cc_1)^{l+1}} - \frac{1}{(2l+1)(2l-1)} \frac{c_{\min}^{2l-1}}{(cc_1)^{l-1}} \right] \quad (4.73)$$

Здесь $c_{\min} = \min(c, c_1)$. В частном случае $l=0$ ядро $L_l^+(c, c_1)$ может быть преобразовано и представлено в виде

$$L_0^+(c, c_1) = 2e^{-c^2} \frac{1}{cc_1} e^{(c_{\min})^2} \Phi(c_{\min}) \quad (4.74)$$

Формулы для ядер линейного интеграла столкновений получены недавно в работе [50] и для максвелловских молекул. В этом случае дифференциальное сечение рассеяния имеет вид

$$\sigma(g, z) = g^{-1} F_0(z), \quad z = \sin^2(\theta/2) \quad (4.75)$$

где g - относительная скорость сталкивающихся частиц, θ - угол рассеяния. Ядра $L_l^{(1)}(c, c_1)$, $L_l^{(2)}(c, c_1)$ представляются в виде квадратур

$$L_l^{(1)}(c, c_1) = \int_0^1 F_0(1-z) \left(2\pi^{3/2} \frac{M(c)P_l(\sqrt{z})}{\sqrt{cc_1} z^{1/4} (1-z)} \exp\left(-z \frac{c^2 + c_1^2}{1-z}\right) I_{l+1/2}\left(2 \frac{cc_1 \sqrt{z}}{1-z}\right) - \frac{\delta(c-c_1)}{c^2} \right) dz \quad (4.76)$$

$$L_l^{(2)}(c, c_1) = 2\pi^{3/2} M(c) \int_0^1 F_0(z) \left(\frac{P_l(\sqrt{z})}{\sqrt{cc_1} z^{1/4} (1-z)} \exp\left(-z \frac{c^2 + c_1^2}{1-z}\right) I_{l+1/2}\left(2 \frac{cc_1 \sqrt{z}}{1-z}\right) - \frac{2\delta_{l0}}{\sqrt{\pi}} \right) dz \quad (4.77)$$

Для псевдомаксвелловских молекул, т.е. в том случае, когда $F_0(z) = \text{const}$, ядра обратного интеграла столкновений первого и второго рода равны:

$$L_l^{(1)+}(c, c_1) = L_l^{(2)+}(c, c_1) = L_l^+(c, c_1) \quad (4.78)$$

При $l=0$ ядро обратного интеграла столкновений может быть найдено аналитически, что дает

$$L_0^+(c, c_1) = \frac{2\sqrt{\pi}}{cc_1} \exp(c_1^2) \begin{cases} \text{erfc}(c) \text{erf}(c_1) & c_1 < c \\ \text{erfc}(c_1) \text{erf}(c) & c_1 > c \end{cases} \quad (4.79)$$

Глава 5.

Асимптотика матричных элементов и построение линейных ядер для некоторых моделей взаимодействия частиц

Как показано в предыдущей главе, применение метода разложения по сферическим гармоникам к решению уравнения Больцмана приводит к замене шестикратного интеграла столкновений набором интегральных операторов, ядра которых зависят от модулей скоростей. Эти ядра оказываются связанными с матричными элементами интеграла столкновений – согласно формуле (4.37) они представляют собой тройную сумму произведений матричных элементов на полиномы Сонина. Формула (4.37) дает принципиальную возможность расчета ядер для любого потенциала взаимодействия, если известны МЭ интеграла столкновений. Для реализации такого расчета необходима информация о МЭ при больших значениях индексов. В связи с этим в параграфе 5.1 исследуются асимптотические свойства МЭ.

При рассмотрении задачи о релаксации малой примеси на фоне с известным распределением интеграл столкновений оказывается линейным оператором. Если фон имеет равновесное распределение, то ядра линейного интеграла столкновений оказываются связанными с ядрами нелинейного интеграла столкновений соотношением (4.63). Использование ряда (4.37) позволяют выразить ядра линейного интеграла столкновений через матричные элементы. В параграфах 5.2, 5.3 проводится расчет ядер линейного интеграла столкновений через МЭ для случаев твердых шаров и псевдомаксвелловских молекул с использованием найденной в параграфе 5.1 асимптотики.

5.1 Асимптотические свойства МЭ

Как уже отмечалось в параграфе 4.1, нелинейные МЭ в осесимметричной задаче могут быть определены через линейные, а линейные неизотропные МЭ определяются через линейные изотропные. Это, в свою очередь, означает, что все нелинейные осесимметричные матричные элементы могут быть определены через линейные изотропные. В связи с этим исследование МЭ для изотропного случая приобретает особую важность.

Развитый в [109, 111] подход к расчету МЭ на основе рекуррентных соотношений существенно сократил время счета и позволил провести вычисления МЭ до значений индексов, равных 128. Вычисление МЭ с еще большими значениями индексов может быть осуществлено с помощью отыскания асимптотики. Асимптотический подход позволяет определить поведение МЭ при стремлении индексов к бесконечности и исследовать зависимость МЭ от сечения рассеяния сталкивающихся частиц.

В этом параграфе построены асимптотики линейных и нелинейных МЭ в изотропном случае. В случае модели “псевдостепенного” взаимодействия частиц, т.е. взаимодействия, которому соответствует сечение с той же зависимостью от скорости, как и в случае степенных потенциалов, но в предположении изотропного перераспределения по углам, получена формула для линейных МЭ, не содержащая суммирования. Это, в свою очередь, позволило найти асимптотику линейных и нелинейных элементов при большом значении двух индексов. Для случая максвелловских молекул получена асимптотика МЭ по трем индексам.

В работе [109] приведены выражения для линейных и нелинейных МЭ для произвольных степенных потенциалов взаимодействия. Линейные матричные элементы $K_{0,n}^r$ и $K_{n,0}^r$ содержат однократные суммы, число слагаемых в которых определяется минимальным значением индексов n и r . Выражения для нелинейных МЭ в случае степенных потенциалов взаимодействия содержат четырехкратные суммы, и при больших значениях индексов их вычисление оказывается чрезвычайно громоздким. В связи с этим для расчета K_{r_1,r_2}^r в [109] было предложено использовать основное соотношение, связывающее матричные элементы для степенных потенциалов взаимодействия в изотропном случае (4.32). Это соотношение, переписанное в виде

$$K_{p,n}^r = \frac{1}{p} \left[(n + p - r - 1 - \mu) K_{p-1,n}^r + r K_{p-1,n}^{r-1} - (n+1) K_{p-1,n+1}^r \right], \quad (5.1)$$

дает возможность последовательно отыскивать матричные элементы с увеличивающимся первым нижним индексом. Аналогичное соотношение может быть записано для отыскания МЭ с увеличивающимся вторым нижним индексом.

$$K_{n,p}^r = \frac{1}{p} \left[(n + p - r - 1 - \mu) K_{n,p-1}^r + r K_{n,p-1}^{r-1} - (n+1) K_{n+1,p-1}^r \right] \quad (5.2)$$

Ясно, что соотношения (5.1), (5.2) позволяют найти нелинейные матричные элементы с произвольными индексами из линейных элементов $K_{0,n}^r$, $K_{n,0}^r$.

Изложенная вычислительная схема была применена в [111] для расчета нелинейных МЭ. Оказалось, что для вычисления нелинейных МЭ с большими значениями индексов необходимо иметь значения линейных элементов с очень малой погрешностью. При расчете МЭ в [111] для преодоления этой трудности использовались процедуры точной арифметики, обеспечивающие проведение точных расчетов с большим количеством десятичных разрядов. В результате погрешность расчетов всех МЭ до $N_0 = 128$ не превышала 10^{-8} . Это открывает возможности для прямой проверки сходимости асимптотических формул. Построение

асимптотики МЭ позволяет естественным образом распространить процедуру их вычисления на область очень больших значений индексов.

Асимптотика линейных матричных элементов

Полученные в работе [111] выражения для линейных МЭ имеют вид

$$K_{0,n}^r = B_\gamma \left(\frac{4kT_0}{m} \right)^\mu \frac{r!}{\Gamma(r+3/2) \cdot 2^{r+n}} \cdot \sum_{q=1}^{\min(n,r)} 2^{2q} W_{r,q}^n \Gamma(q+\mu+3/2) J_q / q! \quad (5.3)$$

$$K_{n,0}^r = B_\gamma \left(\frac{4kT_0}{m} \right)^\mu \frac{r!}{\Gamma(r+3/2) \cdot 2^{r+n}} \cdot \sum_{q=1}^{\min(n,r)} 2^{2q} W_{r,q}^n \Gamma(q+\mu+3/2) \tilde{J}_q / q! \quad (5.4)$$

Здесь

$$W_{r,q}^n = \frac{-\mu(-\mu+1)\dots(-\mu+n+r-2q-1)}{(n-q)!(r-q)!} = \frac{\Gamma(-\mu+n+r-2q)}{\Gamma(-\mu)(n-q)!(r-q)!} \quad (5.5)$$

Эти выражения были получены для степенных потенциалов взаимодействия, когда зависимость дифференциального сечения от угла рассеяния и от относительной скорости частиц может быть представлена в виде (4.25)

$$\sigma(g, \theta) = \frac{1}{4\pi} \cdot g^{\gamma-1} F_\gamma((\sin \theta/2)^2) = B_\gamma g^{\gamma-1} \bar{F}_\gamma((\sin \theta/2)^2), \quad (5.6)$$

где B_γ - размерная константа, а $\bar{F}_\gamma((\sin \theta/2)^2)$ - нормированная на единицу угловая часть сечения. При этом параметр μ в формулах (5.3), (5.4) связан с γ соотношением $\mu = \gamma/2$, а коэффициенты J_q и $\tilde{J}_q$ представляют собой интегралы от угловой части сечения $F_\gamma(z)$ с весами z^q и $((1-z)^q - 1)$, соответственно:

$$J_q = 4\pi \int_0^1 \bar{F}_\gamma(z) z^q dz, \quad \tilde{J}_q = 4\pi \int_0^1 \bar{F}_\gamma(z) ((1-z)^q - 1) dz \quad (5.7)$$

В работах по кинетической теории газов часто используется модель “псевдостепенного” взаимодействия частиц, которой соответствует дифференциальное сечение (5.6) с $\bar{F}(z) = 1/4\pi$, т.е. рассеяние частиц при взаимодействии предполагается изотропным. При этом

$$J_q = \frac{1}{q+1}, \quad \tilde{J}_q = \frac{1}{q+1} - 1 \quad (5.8)$$

В этом случае выражение (5.3) для линейных МЭ может быть преобразовано к виду, значительно более удобному для построения асимптотики и численного расчета. Для реализации такого преобразования заметим, что сумма, входящая в (5.3), с учетом (5.8) приобретает вид

$$S = \sum_{q=1}^{\min(n,r)} 2^{2q} W_{r,q}^n \Gamma(q + \mu + 3/2) J_q / q! = \sum_{q=1}^{\min(n,r)} 2^{2q} \frac{\Gamma(q + \mu + 3/2) \Gamma(-\mu + n + r - 2q)}{(n-q)!(r-q)! \Gamma(-\mu)(q+1)!} \quad (5.9)$$

Факториалы, входящие в знаменатель членов суммы, преобразуем следующим образом

$$(r-q)! = \frac{r!}{(r-q+1)\dots(r-1)r} = \frac{r!}{(-1)^q (-r)(-r+1)\dots(-r+q-1)} = \frac{(-1)^q r!}{(-r)_q} \quad (5.10)$$

$$(n-q)! = \frac{(-1)^q n!}{(-n)_q} \quad (5.11)$$

Здесь через $(a)_q$ обозначены символы Похгаммера

$$(a)_0 = 1, \quad (a)_q = a(a+1)\dots(a+q-1), \quad q = 1, 2, 3, \dots \quad (5.12)$$

Γ -функция, входящая в числитель членов суммы в (5.9), может быть записана в виде

$$\begin{aligned} \Gamma(-\mu + n + r - 2q) &= \frac{\pi}{\sin(\pi\mu)(-1)^{n+r+1} \Gamma(1 + \mu - n - r + 2q)} = \\ &= \frac{\pi^{3/2}}{\sin(\pi\mu)(-1)^{n+r+1} 2^{\mu-n-r+2q} \Gamma(q + (\mu+1-n-r)/2) \Gamma(q + (\mu+1-n-r)/2 + 1/2)} \end{aligned} \quad (5.13)$$

Подставляя (5.10), (5.11), (5.13) в (5.9) и учитывая, что $(a)_p = \Gamma(a+p)/\Gamma(a)$, найдем

$$\begin{aligned} S &= \frac{\pi \Gamma(\mu + 1/2) (-1)^{r+n+1}}{4 \Gamma(-\mu)(n+1)!(r+1)! \sin(\pi\mu) \Gamma(\mu - 1 - r - n)} \times \\ &\times \sum_{p=2}^{\min(n,r)+1} \frac{(\mu + 1/2)_p (-n-1)_p (-r-1)_p}{((\mu - 1 - r - n)/2)_p ((\mu - 1 - r - n)/2 + 1/2)_p p!} \end{aligned} \quad (5.14)$$

Заметим теперь, что

$$\sum_{p=0}^{\infty} \frac{(a)_p (b)_p (c)_p}{(d)_p (e)_p p!} z^p = {}_3F_2 \left(\begin{matrix} a, b, c \\ d, e \end{matrix} \middle| z \right) \quad (5.15)$$

В том случае, когда один из верхних индексов представляет собой отрицательное целое число, ряд содержит конечное число членов и сумма в (5.14) может быть представлена в виде

$$\begin{aligned} S &= \sum_{p=2}^{\min(n,r)+1} \frac{(\mu + 1/2)_p (-n-1)_p (-r-1)_p}{((\mu - 1 - r - n)/2)_p ((\mu - 1 - r - n)/2 + 1/2)_p p!} = \\ &= {}_3F_2 \left(\begin{matrix} \mu + 1/2 & -n-1 & -r-1 \\ (\mu - 1 - n - r)/2 & (\mu - 1 - n - r)/2 + 1/2 \end{matrix} \middle| z=1 \right) - 1 - \frac{4(\mu + 1/2)(-n-1)(-r-1)}{(\mu - 1 - r - n)(\mu - r - n)} \end{aligned} \quad (5.16)$$

Согласно теореме Заальшютца [112], при выполнении условий $c = -m$ (m – целое),

$e + d = a + b + c + 1$ значение гипергеометрической функции ${}_3F_2 \left(\begin{matrix} a, b, c \\ d, e \end{matrix} \middle| z=1 \right)$ дается

формулой

$${}_3F_2\left(\begin{matrix} a, b, -m \\ d, 1+a+b-d-m \end{matrix} \middle| z=1\right) = \frac{(d-a)_m (d-b)_m}{(d)_m (d-a-b)_m} \quad (5.17)$$

В рассматриваемом случае требуемое соотношение индексов выполняется, и

$$s = \frac{(-\mu/2 - 1 - n/2 - r/2)_{R+1} (\mu/2 - 1/2 - n/2 - r/2 + R_1 + 1)_{R+1}}{(\mu/2 - 1/2 - n/2 - r/2)_{R+1} (-\mu/2 - n/2 - r/2 + R_1)_{R+1}} - 1 - \frac{4(\mu + 1/2)(-n-1)(-r-1)}{(\mu - n - r)(\mu - n - r - 1)} \quad (5.18)$$

Здесь $R = \min(n, r)$, $R_1 = \max(n, r)$. Учитывая (5.18), (5.14) найдем, что линейный МЭ $K'_{0,n}$ представляется в виде:

$$K'_{0,n} = B_\gamma \left(\frac{4kT_0}{m} \right)^\mu \frac{r! n_0^2}{\Gamma(r + 3/2) \cdot 2^{r+n+2}} \cdot \frac{\Gamma(\mu + 1/2) \Gamma(r + n + 2 - \mu)}{\Gamma(-\mu)(n+1)!(r+1)!} \times \\ \times \left[\frac{((-\mu - n - r)/2 - 1)_{R+1} ((\mu - n - r)/2 + R_1 + 1/2)_{R+1}}{((\mu - 1 - n - r)/2)_{R+1} ((-\mu - n - r)/2 + R_1)_{R+1}} - 1 - \frac{4(\mu + 1/2)(n+1)(r+1)}{(\mu - n - r)(\mu - n - r - 1)} \right] \quad (5.19)$$

Выражение (5.19) и является искомым представлением для линейного МЭ.

Численные расчеты показывают, что наибольшие значения имеют линейные матричные элементы с незначительно различающимися индексами r и n , и, следовательно, именно в этом случае асимптотика представляет наибольший интерес. Полученное выражение (5.19) дает возможность построить такую асимптотику. Будем считать, что $r \rightarrow \infty$, $n \rightarrow \infty$ так, что разность между значениями индексов остается фиксированной, т.е. $R \rightarrow \infty$, $R_1 \rightarrow \infty$, $\Delta = R_1 - R$ — фиксировано. Найдем вначале асимптотику дроби Z_1 , содержащей похгаммеровские символы в квадратных скобках в выражении (5.19). Учитывая, что $r + n = 2R + \Delta$, и используя соотношение

$$(\alpha - (R+1))_{R+1} = (\alpha - (R+1))(\alpha - (R+1) + 1) \dots (\alpha - (R+1) + R) = \\ = (-1)^{R+1} (-\alpha + 1)(-\alpha + 2) \dots (-\alpha + (R+1)) = (-1)^{R+1} (-\alpha + 1)_{R+1}, \quad (5.20)$$

преобразуем Z_1 следующим образом:

$$Z_1 = \frac{((-\mu - n - r)/2 - 1)_{R+1} ((\mu - n - r)/2 + R_1 + 1/2)_{R+1}}{((\mu - 1 - n - r)/2)_{R+1} ((-\mu - n - r)/2 + R_1)_{R+1}} = \\ = \frac{((\mu + \Delta)/2 + 1)_{R+1} ((\mu + \Delta + 1)/2)_{R+1}}{((-\mu + \Delta)/2)_{R+1} ((-\mu + \Delta + 1)/2)_{R+1}}. \quad (5.21)$$

Переходя от похгаммеровских символов к отношению Γ -функций и используя асимптотику отношения Γ -функций с большими аргументами (см., например, [112])

$$\frac{\Gamma(z + \alpha)}{\Gamma(z + \beta)} = z^{\alpha - \beta} \left(1 + \frac{1}{2z} (\alpha - \beta)(\alpha + \beta - 1) + O(z^{-2}) \right), \quad z \rightarrow \infty, \quad (5.22)$$

найдем

$$Z_1 = 2^{2\mu+1} \frac{\Gamma(-\mu+\Delta)}{\Gamma(\mu+\Delta+1)} \cdot (R+1)^{2\mu+1} \left[1 + \frac{1}{2(R+1)} (2\mu+1)\Delta + O((R+1)^{-2}) \right], \quad R \rightarrow \infty. \quad (5.23)$$

Асимптотика второй дроби Z_2 в квадратных скобках выражения (5.19) очевидна:

$$\begin{aligned} Z_2 &= \frac{4(\mu+1/2)(n+1)(r+1)}{(\mu-n-r)(\mu-n-r-1)} = \frac{(\mu+1/2)(R+1)(R+\Delta+1)}{((\mu-\Delta)/2-R)((\mu-\Delta)/2-R-1/2)} = \\ &= (\mu+1/2) \left[1 + \frac{\mu+3/2}{R+1} + O((R+1)^{-2}) \right], \quad R \rightarrow \infty \end{aligned} \quad (5.24)$$

Асимптотику коэффициента перед квадратной скобкой в (5.20) легко найти, применяя формулу удвоения для Γ -функции в числителе и формулу (5.22) для отношения Γ -функций

$$\begin{aligned} U &= \frac{r! \Gamma(r+n+2-\mu)}{\Gamma(r+3/2) 2^{r+n+2} (n+1)! (r+1)!} = 2^{-\mu-1} (R+1)^{-\mu-2} \frac{1}{\sqrt{\pi}} \cdot \left[1 + \frac{B}{2(R+1)} + O((R+1)^{-2}) \right], \\ R &\rightarrow \infty \\ B &= ((-\mu+\Delta)-2)(-\mu+\Delta)/4 + (-\mu-\Delta-1)(-\mu+3\Delta+1)/4 - (\Delta_1 - 1/4) \end{aligned} \quad (5.25)$$

$$\Delta_1 = \begin{cases} 0 & r \leq n \\ \Delta & r > n \end{cases}$$

Собирая (5.23)-(5.25), окончательно получим выражение для асимптотики линейного элемента:

$$\begin{aligned} K_{0,n}^r &= P(\mu) \left\{ 2^\mu \frac{\Gamma(-\mu+\Delta)}{\Gamma(\mu+\Delta+1)} (R+1)^{\mu-1} \left[1 + \frac{A}{2(R+1)} + O((R+1)^{-2}) \right] - \right. \\ &\quad \left. - 2^{-\mu-1} (\mu+3/2)(R+1)^{-\mu-2} \left[1 + \frac{B+2\mu+1}{2(R+1)} + O((R+1)^{-2}) \right] \right\}, \quad R \rightarrow \infty \end{aligned} \quad (5.26)$$

$$P(\mu) = B_\gamma \left(\frac{4kT_0}{m} \right)^\mu \frac{\Gamma(\mu+1/2) \cdot n_0^2}{\Gamma(-\mu) \sqrt{\pi}}$$

$$A = B + \Delta(2\mu+1)$$

Из (5.26) видно, что асимптотика $K_{0,n}^r$ состоит из двух частей, главные члены которых ведут себя как $(R+1)^{\mu-1}$, $(R+1)^{-\mu-2}$, соответственно. Основной вклад в асимптотику определяется той или иной частью в зависимости от значения параметра μ : при $\mu > -1/2$ основной вклад дает первый член, при $\mu < -1/2$ - второй. Отметим, что при $\mu = 0$ найденные члены асимптотики обращаются в ноль, если $\Delta \neq 0$. При $\Delta = 0$ имеем

$$K_{0,r}^r = B_0 n_0^2 (r+1)^{-1} (1 + O((r+1)^{-2})) \quad (5.27)$$

Этот результат соответствует известной формуле для линейного элемента в случае псевдомаксвелловских молекул

$$K_{0,n}^r = B_0 \frac{n_0^2}{r+1} \delta_{r,n} \quad (5.28)$$

Перейдем теперь к отысканию асимптотики линейных МЭ по индексам n и r в общем случае, когда дифференциальное сечение взаимодействия частиц (5.6) неізотропно. Рассмотрим прежде всего асимптотику $K_{0,n}^r$ при $r \rightarrow \infty$ и фиксированном значении n . Используя формулу для отношения Γ -функций с большими аргументами (5.22), из (5.5) найдем

$$W_{r,q}^n = \frac{1}{\Gamma(-\mu)(n-q)!} \cdot r^{n-q-\mu-1} \cdot \left[1 + \frac{1}{2r} (n-q-\mu-1)(n-3q-\mu) + O(r^{-2}) \right], \quad r \rightarrow \infty \quad (5.29)$$

Из (5.29) видно, что сумма, входящая в выражение (5.3) для $K_{0,n}^r$ представляет собой асимптотическое разложение, и главный вклад определяется членом суммы с $q=1$. Подставляя (5.29) в (5.3) и учитывая (5.22), для первых членов разложения $K_{0,n}^r$ имеем

$$K_{0,n}^r = B_\gamma \left(\frac{4kT_0}{m} \right)^\mu \frac{n_0^2}{2^{n-2}} \cdot \frac{\Gamma(\mu+5/2)}{\Gamma(-\mu)(n-1)!} \cdot 2^{-r} \cdot r^{n-\mu-5/2} \times \\ \times \left\{ J_1 + \frac{1}{r} \left[J_1 \left(\frac{(n-\mu-2)(n-\mu-3)}{2} - \frac{3}{8} \right) + 2J_2(\mu+5/2)(n-1) \right] + O(r^{-2}) \right\}, \quad r \rightarrow \infty \quad (5.30)$$

Асимптотика по второму индексу может быть найдена аналогично. При этом получаем

$$W_{r,q}^n = \frac{\Gamma(-\mu+n+r-2q)}{\Gamma(-\mu)(r-q)!\Gamma(n-q+1)} = \frac{1}{\Gamma(-\mu)(r-q)!} \cdot n^{-\mu+r-q-1} \times \\ \times \left[1 + \frac{1}{2n} (r-\mu-q-1)(r-\mu-3q) + O(n^{-2}) \right], \quad n \rightarrow \infty \quad (5.31)$$

что, в свою очередь, дает

$$K_{0,n}^r = B_\gamma \left(\frac{4kT_0}{m} \right)^\mu \frac{r!n_0^2}{\Gamma(r+3/2)2^{r-2}} \cdot \frac{\Gamma(\mu+5/2)}{\Gamma(-\mu)(r-1)!} \cdot 2^{-n} \cdot n^{r-\mu-2} \times \\ \times \left\{ J_1 + \frac{1}{n} \left[J_1 \frac{(r-\mu-2)(r-\mu-3)}{2} + 2J_2(\mu+5/2)(r-1) \right] + O(n^{-2}) \right\}, \quad n \rightarrow \infty \quad (5.32)$$

Асимптотика линейных МЭ с другим порядком нижних индексов может быть получена из формул (5.30), (5.32) заменой коэффициентов J_q на $\tilde{J}_q$. Это следует из сравнения выражений (5.3) и (5.4).

Асимптотика нелинейных матричных элементов

Полученные в предыдущем разделе результаты совместно с рекуррентными соотношениями (5.1), (5.2) позволяют построить асимптотику нелинейных элементов $K_{p,n}^r$.

Для модели псевдостепенного взаимодействия можно определить поведение $K_{p,n}^r$ при фиксированном p и больших значениях индексов r, n , подставляя асимптотику (5.26) в рекуррентное соотношение (5.1). При этом, однако, необходимо учесть, что $R = \min(r, n)$, и для вычисления результата подстановки следует рассмотреть два случая. В первом случае $r > n$, что дает $R = n$, $\Delta = |r - n| = r - n \geq 1$. Во втором случае $r \leq n$, при этом $R = r$, $\Delta = n - r \geq 0$. Переходя в рекуррентном соотношении от переменных r, n к переменным R, Δ , для указанных случаев найдем:

$$K_{1,n}^r = P(\mu) \left\{ \frac{\Gamma(-\mu + \Delta - 1)}{\Gamma(\mu + \Delta)} 2^\mu (R + 1)^{\mu-1} + O((R + 1)^{\mu-2}) - \right. \\ \left. - (\mu + 3/2) \cdot 2^{-\mu-1} (R + 1)^{-\mu-2} + O((R + 1)^{-\mu-3}) \right\}, \quad r > n \quad (5.33)$$

$$K_{1,n}^r = P(\mu) \left\{ \frac{\Gamma(-\mu + \Delta + 1)}{\Gamma(\mu + \Delta + 2)} 2^\mu (R + 1)^{\mu-1} + O((R + 1)^{\mu-2}) - \right. \\ \left. - (\mu + 3/2) \cdot 2^{-\mu-1} (R + 1)^{-\mu-2} + O((R + 1)^{-\mu-3}) \right\}, \quad r \leq n \quad (5.34)$$

Для отыскания асимптотики элемента $K_{2,n}^r$ придется рассматривать уже три случая: $r > n + 1$, $r = n + 1$, $r < n + 1$, поскольку для $K_{1,m}^q$, входящих в рекуррентное соотношение (5.1) при $p = 2$, необходимо будет использовать (5.33) или (5.34) в зависимости от соотношения между q и m . Это дает

$$K_{2,n}^r = P(\mu) \left\{ \frac{\Gamma(-\mu + \Delta - 2)}{\Gamma(\mu + \Delta - 1)} 2^\mu (R + 1)^{\mu-1} + O((R + 1)^{\mu-2}) - \right. \\ \left. - (\mu + 3/2) \cdot 2^{-\mu-1} (R + 1)^{-\mu-2} + O((R + 1)^{-\mu-3}) \right\}, \quad r > n + 1 \quad (5.35)$$

$$K_{2,n}^r = P(\mu) \left\{ \frac{\Gamma(-\mu + 1)}{\Gamma(\mu + 2)} 2^\mu (R + 1)^{\mu-1} + O((R + 1)^{\mu-2}) - \right. \\ \left. - (\mu + 3/2) \cdot 2^{-\mu-1} (R + 1)^{-\mu-2} + O((R + 1)^{-\mu-3}) \right\}, \quad r = n + 1 \quad (5.36)$$

$$K_{2,n}^r = P(\mu) \left\{ \frac{\Gamma(-\mu + \Delta + 2)}{\Gamma(\mu + \Delta + 3)} 2^\mu (R + 1)^{\mu-1} + O((R + 1)^{\mu-2}) - \right. \\ \left. - (\mu + 3/2) \cdot 2^{-\mu-1} (R + 1)^{-\mu-2} + O((R + 1)^{-\mu-3}) \right\}, \quad r < n + 1 \quad (5.37)$$

Заметим теперь, что формулы (5.26), (5.33) - (5.37) для асимптотики элементов $K_{p,n}^r$ при $p = 0, 1, 2$ могут быть представлены в виде

$$K_{p,n}^r = P(\mu) \left\{ \frac{\Gamma(-\mu + |r - n - p|)}{\Gamma(\mu + |r - n - p| + 1)} 2^\mu (R + 1)^{\mu-1} + O((R + 1)^{\mu-2}) - \right. \\ \left. - (\mu + 3/2) \cdot 2^{-\mu-1} (R + 1)^{-\mu-2} + O((R + 1)^{-\mu-3}) \right\} \quad (5.38)$$

По индукции можно показать, что эта формула справедлива и при $p > 2$. При доказательстве этого факта необходимо рассмотреть три случая: $r \geq n + p + 1$, $n < r < n + p + 1$, $r \leq n$. Такой выбор границ диапазонов индексов диктуется необходимостью раскрытия знака модуля в аргументах Γ -функций и связью переменных r , n с R . Полученная формула (5.38) представляет асимптотику МЭ при фиксированных p и $\Delta = |r - n|$ и больших значениях r , n для случая псевдостепенного взаимодействия частиц.

Отыскание асимптотики нелинейных МЭ по одному индексу при фиксированных остальных осуществляется таким же приемом. Запишем асимптотику МЭ $K_{0,n}^r$ при фиксированном n и $r \rightarrow \infty$ в виде

$$K_{0,n}^r = \tilde{P}(\mu) \frac{r^{n-\mu-5/2}}{2^{n+r-2}(n-1)!} \left\{ J_1 + \frac{1}{r} C_0(n, \mu) + O(r^{-2}) \right\}, \quad (5.39)$$

где

$$\tilde{P}(\mu) = B_\gamma \left(\frac{4kT_0}{m} \right)^\mu \frac{\Gamma(\mu + 5/2) \cdot n_0^2}{\Gamma(-\mu)} \quad (5.40)$$

$$C_0(n, \mu) = J_1 \left(\frac{(n - \mu - 2)(n - \mu - 3)}{2} - \frac{3}{8} \right) + 2J_2(\mu + 5/2)(n - 1) \quad (5.41)$$

Подставляя это выражение в рекуррентное соотношение (5.1) и выделяя главные члены по r , найдем асимптотику $K_{1,n}^r$. Асимптотика элементов $K_{p,n}^r$ при любом конечном значении p находится повторным применением той же процедуры. Методом индукции можно показать, что

$$K_{p,n}^r = \tilde{P}(\mu) \left\{ (n - p) \frac{r^{n-\mu+p-5/2}}{2^{n+r+p-2} n! p!} J_1 + \frac{r^{n-\mu+p-7/2}}{2^{n+r+p-2} (n-1)!} C_p(n, \mu) + O\left(\frac{r^{n-\mu+p-9/2}}{2^r} \right) \right\} \quad (5.42)$$

Коэффициенты $C_p(n, \mu)$ связаны соотношением

$$C_p(n, \mu) = \frac{2}{p} \left(C_{p-1}(n, \mu) - \frac{n+1}{2n} C_{p-1}(n+1, \mu) \right) - \frac{2}{n \cdot p!} (n - \mu + p - 6)(n - p + 1) J_1 \quad (5.43)$$

Для отыскания $C_p(n, \mu)$ в явном виде заметим, что $C_0(n, \mu)$ как функция от n является линейной комбинацией степеней n^i , $i = 0, 1, 2$, а оператор $L(F(n)) = F(n) - \frac{n+1}{2n} F(n+1)$

переводит n^i при $i \geq 0$ в линейную комбинацию вида $\sum_{j=-1}^i T_j^i \cdot n^j$. Учитывая, что

$L(n^{-1}) = \frac{1}{2} n^{-1}$, и что свободный член в (5.43) является комбинацией степеней n^i , $i = -1, 0, 1$

индекса n , методом индукции легко показать, что

$$\begin{aligned}
C_p(n, \mu) = & \frac{A_2}{p!} n^2 + \frac{1}{p!} n [A_1 - 3pA_2 - 2pJ_1] + \\
& + \frac{1}{p!} [A_0 - 2pA_1 + 3p(p-2)A_2 + 2J_1p(p+\mu+4)] - \\
& - \frac{1}{(p-1)!} \frac{1}{n} [A_0 + A_2 - A_1(p-2) + A_2(p-1)(p-5) + 2J_1(p-1)(\mu+4)]
\end{aligned} \quad (5.44)$$

где

$$\begin{aligned}
A_2 &= J_1 / 2, \quad A_1 = (\mu + 5/2)(2J_2 - J_1), \\
A_0 &= \frac{J_1}{2} \left((\mu + 2)(\mu + 3) - \frac{3}{4} \right) - 2J_2(\mu + 5/2)
\end{aligned} \quad (5.45)$$

Заметим, что формула (5.42) верна лишь для значений индексов $p \leq n$. При $p = n$ порядок главного члена меняется, и общая закономерность построения $K_{n+1,n}^r$ по рекуррентному соотношению (5.1) нарушается. Асимптотика элементов с другим порядком нижних индексов может быть легко получена из асимптотики (5.42), (5.44) заменой J_q на $\tilde{J}_q$. Действительно, для линейных элементов $K_{0,n}^r$ и $K_{n,0}^r$ это справедливо, а рекуррентные соотношения для определения $K_{n,p}^r$ через $K_{n,p-1}^r$, $K_{n,p-1}^{r-1}$, $K_{n+1,p-1}^r$ совпадают с рекуррентными соотношениями для определения $K_{p,n}^r$ через $K_{p-1,n}^r$, $K_{p-1,n}^{r-1}$, $K_{p-1,n+1}^r$. Поэтому

$$K_{n,p}^r = \tilde{P}(\mu) \left\{ (n-p) \frac{r^{n-\mu+p-5/2}}{2^{n+r+p-2} n! p!} \tilde{J}_1 + \frac{r^{n-\mu+p-7/2}}{2^{n+r+p-2} (n-1)!} \tilde{C}_p(n, \mu) + O\left(\frac{r^{n-\mu+p-9/2}}{2^r}\right) \right\}, \quad (5.46)$$

$$\begin{aligned}
\tilde{C}_p(n, \mu) = & \frac{\tilde{A}_2}{p!} n^2 + \frac{1}{p!} n [\tilde{A}_1 - 3p\tilde{A}_2 - 2p\tilde{J}_1] + \\
& + \frac{1}{p!} [\tilde{A}_0 - 2p\tilde{A}_1 + 3p(p-2)\tilde{A}_2 + 2\tilde{J}_1p(p+\mu+4)] - \\
& - \frac{1}{(p-1)!} \frac{1}{n} [\tilde{A}_0 + \tilde{A}_2 - \tilde{A}_1(p-2) + \tilde{A}_2(p-1)(p-5) + 2\tilde{J}_1(p-1)(\mu+4)]
\end{aligned} \quad (5.47)$$

где

$$\begin{aligned}
\tilde{A}_2 &= \tilde{J}_1 / 2, \quad \tilde{A}_1 = (\mu + 5/2)(2\tilde{J}_2 - \tilde{J}_1), \\
\tilde{A}_0 &= \frac{\tilde{J}_1}{2} \left((\mu + 2)(\mu + 3) - \frac{3}{4} \right) - 2\tilde{J}_2(\mu + 5/2)
\end{aligned} \quad (5.48)$$

Эта асимптотика также справедлива для $p \leq n$. В том случае, когда $p = n$, выражения для $C_n(n, \mu)$, $\tilde{C}_n(n, \mu)$ могут быть представлены в виде

$$C_n(n, \mu) = \frac{4(\mu + 5/2)}{n!} (J_2 - J_1), \quad \tilde{C}_n(n, \mu) = \frac{4(\mu + 5/2)}{n!} (\tilde{J}_2 - \tilde{J}_1), \quad (5.49)$$

что, с учетом соотношений $\tilde{J}_1 = -J_1$, $\tilde{J}_2 = J_2 - 2J_1$, дает $\tilde{C}_n(n, \mu) = C_n(n, \mu)$. Это, в свою очередь, означает, что асимптотика элемента $K_{n,n}^r$ может рассчитываться по любой из формул (5.42), (5.46).

Асимптотика нелинейных элементов $K_{p,n}^r$ при больших n находится так же. Записывая формулу (5.32) в виде

$$K_{0,n}^r = \tilde{P}(\mu) \frac{r}{\Gamma(r+3/2)} \frac{n^{r-\mu-2}}{2^{n+r-2}} \left\{ J_1 + \frac{1}{n} D_0(r, \mu) + O(n^{-2}) \right\}, \quad (5.50)$$

где

$$D_0(r, \mu) = J_1 \frac{(-\mu+r-2)(-\mu+r-3)}{2} + 2J_2(\mu+5/2)(r-1), \quad (5.51)$$

и последовательно используя рекуррентное соотношение (5.1), получим

$$K_{p,n}^r = \tilde{P}(\mu) \frac{r}{\Gamma(r+3/2)} \left\{ \frac{n^{r+p-\mu-2}}{2^{n+r+p-2}} \frac{1}{p!} J_1 + \frac{n^{r+p-\mu-3}}{2^{n+r+p-2}} \frac{1}{p!} D_p(r, \mu) + O(n^{r-\mu+p-4}) \right\} \quad (5.52)$$

$$D_p(r, \mu) = D_{p-1}(r, \mu) + (-\mu - 3r + p)J_1. \quad (5.53)$$

Замечая, что $D_1(r, \mu) = (-\mu - 3r)J_1 + 1 \cdot J_1 + D_0(r, \mu)$, легко найти явный вид коэффициента $D_p(r, \mu)$:

$$D_p(r, \mu) = p(-\mu - 3r)J_1 + \sum_{i=1}^p i \cdot J_1 + D_0(r, \mu) = p(-\mu - 3r)J_1 + \frac{(p+1)p}{2} J_1 + D_0(r, \mu) \quad (5.54)$$

Необходимо отметить, что найденные асимптотики МЭ по одному индексу справедливы для произвольной зависимости дифференциального сечения от угла рассеяния.

Сравнение асимптотики матричных элементов с их точными значениями

Полученные в предыдущих разделах выражения для асимптотик МЭ были сопоставлены с результатами численных расчетов. Прежде всего, было проведено сравнение вычисленных значений $K_{0,n}^r$ с аналитическим выражением (5.19) для линейного МЭ в случае псевдостепенного взаимодействия частиц. Численно найденные величины $K_{0,n}^r$ совпадают с результатом расчета по формуле (5.19) с высокой степенью точности при $\mu \in [-1.5, 1]$ и значениях индексов $0 \leq r \leq 100$, $0 \leq n \leq 100$.

Для оценки качества асимптотических приближений в случае псевдостепенных потенциалов были найдены отношения $\eta(r; n; \mu) = \tilde{K}_{0,n}^r / K_{0,n}^r$, где через $\tilde{K}_{0,n}^r$ обозначена сумма явно выделенных членов асимптотики в выражениях (5.30) или (5.32). Величина $K_{0,n}^r$ при этом вычислялась по формуле (5.19). Расчеты показали, что рост параметра μ приводит к

некоторому замедлению выхода $K_{0,n}^r$ на асимптотическое значение, однако влияние это не очень сильное. Так, например, отношение $\eta(5;n;-1.5)$ достигает значения 0.9 при $n=18$, а $\eta(5;n;1.)$ - при $n=43$. В то же время, величина индекса r существенно влияет на границу области близости асимптотических и точных значений $K_{0,n}^r$. Так, например, при $r=3$ отношение $\eta(r;n;\mu)$ достигает значения 0.9 для $n=13$, а при $r=10$ - для $n=100$. Причиной сильной чувствительности $\eta(r;n;\mu)$ к величине индекса r , как легко видеть, является неравномерность асимптотического разложения (5.32). Аналогичная ситуация имеет место и для асимптотики $K_{0,n}^r$ по индексу r , задаваемой формулой (5.30). В этом случае скорость выхода на асимптотическое значение сильно зависит от параметра n .

Большой интерес представляет сравнение точного выражения для МЭ $K_{0,n}^r$ и его асимптотического поведения при одновременном росте индексов r , n . Особая важность этого случая связана с тем, что именно в окрестности диагонали линейные матричные элементы приобретают максимальные значения. На рисунке 5.1 приведены зависимости отношения $\tau(r;\Delta;\mu) = \tilde{K}_{0,\Delta+r}^r / K_{0,\Delta+r}^r$ от r при различных μ и $\Delta=5$, где, как и раньше, через $\tilde{K}_{0,\Delta+r}^r$ обозначена сумма явно выделенных членов асимптотики в формуле (5.26). Влияние

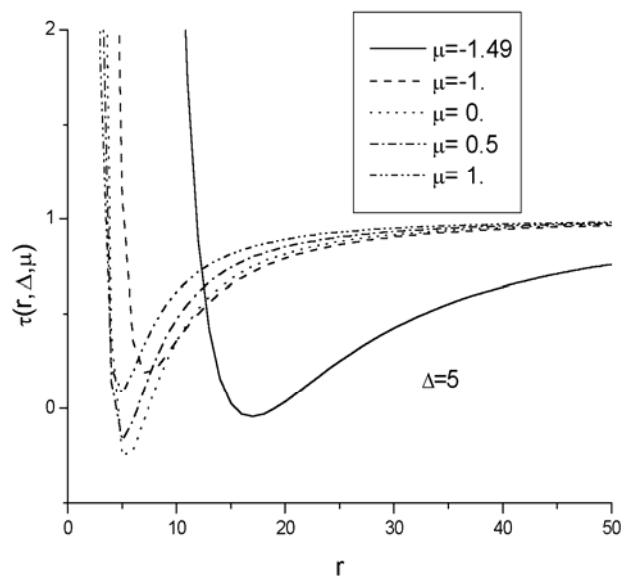


Рисунок 5.1 Зависимость отношения $\tau(r;\Delta;\mu) = \tilde{K}_{0,\Delta+r}^r / K_{0,\Delta+r}^r$ от индекса r при различных значениях μ и $\Delta=5$.

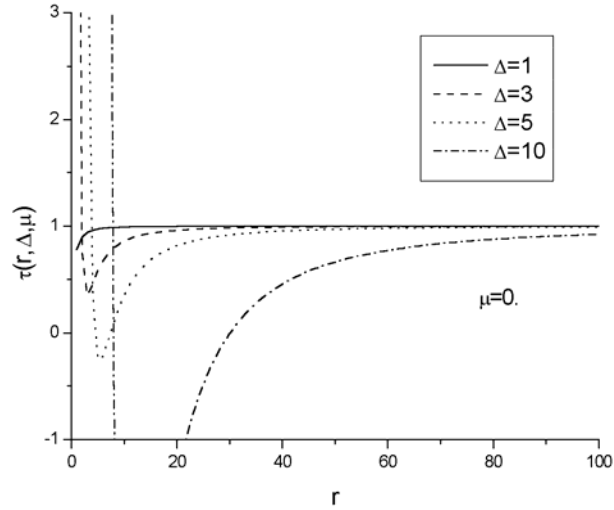


Рисунок 5.2 Зависимость отношения $\tau(r; \Delta; \mu) = \tilde{K}_{0, \Delta+r}^r / K_{0, \Delta+r}^r$ от индекса r при различных Δ и $\mu = 0$.

параметра μ на поведение $\tau(r; \Delta; \mu)$ вдали от значения $\mu = -1.5$ достаточно мало, и с ростом μ выход на асимптотику осуществляется несколько быстрее. При приближении к значению $\mu = -1.5$ выход на асимптотику существенно замедляется. Так для $\mu = -1.4999$ и $\Delta = 5$ отношение $\tau(r; \Delta; \mu)$ достигает значения 0.9 при $r \approx 800$. Зависимость $\tau(r; \Delta; \mu)$ от Δ демонстрируется на рисунке 5.2. Как видно, индекс Δ существенно влияет на поведение отношения $\tilde{K}_{0, \Delta+r}^r / K_{0, \Delta+r}^r$. С ростом Δ граница области близости асимптотических и точных значений линейных МЭ сдвигается в область больших r .

Асимптотические формулы (5.30), (5.32) сравнивались со значениями линейных МЭ и для потенциалов, включающих угловую зависимость. В этом случае формула (5.19) уже неприменима, и для отыскания МЭ необходимо использовать численный алгоритм. Нами были рассчитаны $K_{0, n}^r$ некоторой гибридной модели, когда зависимость сечения от скорости выбиралась такой же как для модели твердых шаров ($\mu = 0.5$), а угловая часть - как для истинно максвелловских молекул. Угловая часть сечения рассеяния для максвелловских молекул имеет вид [113]

$$F_M^{FU}(\theta) = \frac{(\cos 2\varphi)^{1/2}}{4 \sin \theta \sin 2\varphi (\cos^2 \varphi \cdot \mathbf{K}(\sin \varphi) - \cos 2\varphi \cdot \mathbf{E}(\sin \varphi))}, \quad (5.55)$$

где величины θ , φ связаны соотношением $\frac{\pi - \theta}{2} = (\cos 2\varphi)^{1/2} \cdot \mathbf{K}(\sin \varphi)$, а $\mathbf{K}(k)$, $\mathbf{E}(k)$ - полные эллиптические интегралы первого и второго рода, соответственно. Зависимость

(5.55) имеет особенность в окрестности точки $\theta=0$. При расчетах J_q , $\tilde{J}_q$ по формуле (5.7) использовалась аппроксимация

$$F_M^{FU}(\theta) \approx F_M(z) = \frac{\sqrt{1.5 \cdot \pi}}{64z^{5/4}} \cdot (1.00005 + 0.927579 \cdot \sqrt{z} + 0.216338 \cdot z),$$

$$z = \sin^2 \theta / 2. \quad (5.56)$$

При такой аппроксимации погрешность в определении $F_M^{FU}(\theta)$ не превышает 10^{-4} . Основные черты зависимости отношения $\eta(r; n; \mu) = \tilde{K}_{0,n}^r / K_{0,n}^r$ от параметра n (r) при $r \rightarrow \infty$ ($n \rightarrow \infty$) остаются теми же, что и в случае псевдомолекул.

Сравнение асимптотики нелинейных МЭ $K_{p,n}^r$, задаваемой формулами (5.42), (5.46), (5.52), с численно найденными значениями для псевдостепенного потенциала при $\mu=0.5$ приведено на рисунках 5.3, 5.4. На рисунке 5.3 представлена зависимость отношения $\eta(r, p, n; \mu) = \tilde{K}_{p,n}^r / K_{p,n}^r$ от n при фиксированных r, p . Видно, что, как и для линейных элементов, граница выхода на асимптотику по индексу n существенно зависит от значения двух других индексов. Аналогичная ситуация имеет место и для асимптотики по индексу r , что иллюстрирует рисунок 5.4. Такое поведение объясняется неравномерностью асимптотических разложений (5.42), (5.46), (5.52).

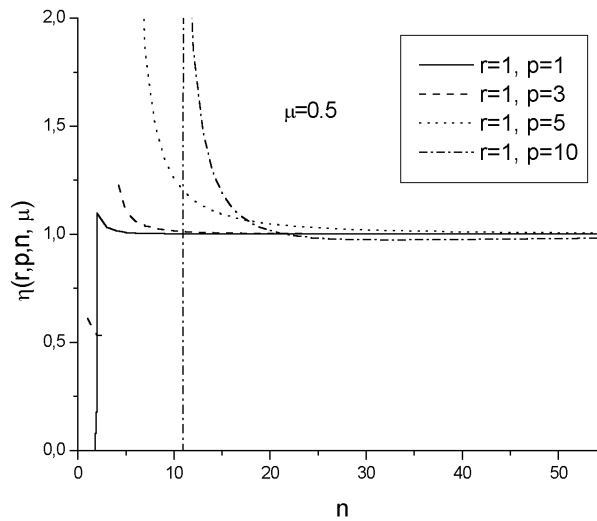


Рисунок 5.3 Зависимость отношения $\tau(r; p, n; \mu) = \tilde{K}_{p,n}^r / K_{p,n}^r$ для нелинейных матричных элементов от индекса n при различных значениях p и $\mu = 0.5$.

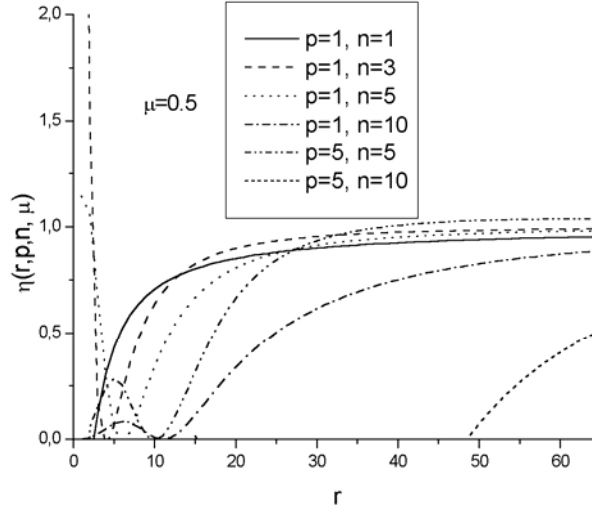


Рисунок 5.4 Зависимость отношения $\tau(r; p, n; \mu) = \tilde{K}_{p,n}^r / K_{p,n}^r$ для нелинейных матричных элементов от индекса r при различных p , n и $\mu = 0.5$.

Рисунок 5.5 демонстрирует поведение отношения $\tau(r, p, \Delta; \mu) = \tilde{K}_{p,\Delta+r}^r / K_{p,\Delta+r}^r$ при росте r и фиксированных индексах p , Δ . Выход на асимптотику в этом случае происходит быстрее, чем для асимптотик по r и по n .

Асимптотика матричных элементов для максвелловских молекул

Полученные в предыдущих разделах асимптотические формулы охватывают случаи, когда один или два индекса МЭ стремятся к бесконечности. В то же время, большой интерес представляет асимптотика при большом значении всех трех индексов. Покажем, как такие асимптотические формулы в общем случае можно получить для максвелловских молекул. Точнее говоря, будем рассматривать молекулы типа максвелловских, когда сечение рассеяния изменяется обратно пропорционально g , а угловая зависимость $\bar{F}(z)$, через которую определяются коэффициенты J_q и $\tilde{J}_q$ в (5.7), произвольна. Для таких молекул ситуация оказывается наиболее простой, поскольку матричные элементы отличны от нуля только если сумма нижних индексов равна верхнему.

Для дальнейших выкладок удобно выбрать другую нормировку для угловой части сечения рассеяния:

$$F^*(z) = 4\pi\bar{F}(z). \quad (5.57)$$

Отметим, что для истинных максвелловских молекул угловая часть сечения $F^*(z)$ имеет неинтегрируемую особенность и задается определенной выше функцией $F_M(z)$.

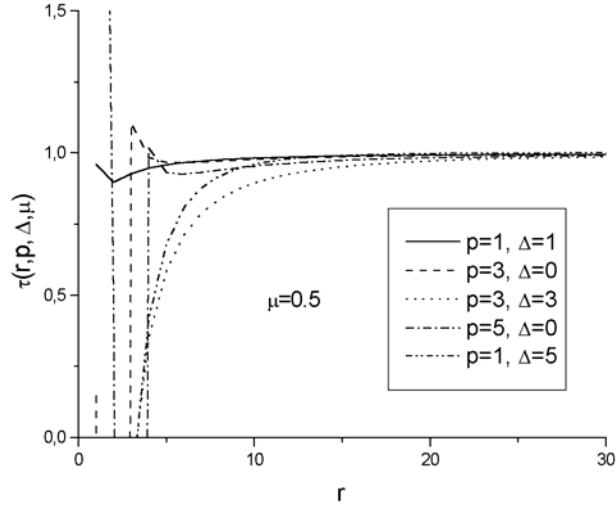


Рисунок 5.5 Зависимость отношения $\tau(r; p, \Delta; \mu) = \tilde{K}_{p, \Delta+r}^r / K_{p, \Delta+r}^r$ для нелинейных матричных элементов от r при различных p и Δ .

В работе [109] получена формула, выражающая нелинейные матричные элементы через линейные в случае максвелловских молекул

$$K_{n,p}^r = \frac{r!}{p!n!} \cdot \sum_{k=0}^p (-1)^k \binom{p}{k} \cdot K_{k+n,0}^{k+n}, \quad (5.58)$$

где $K_{p,0}^r$ определяются формулами (5.4), (5.5), (5.7).

В случае максвелловских молекул выражение под знаком суммы в (5.4) всегда равно нулю за исключением случая, когда $n+r=2q$. Учитывая, что $q \leq \min(n, r)$, можно заключить, что такое равенство оказывается возможным лишь при $q=r=n$. В результате имеем

$$K_{r,0}^r = B_0 \int_0^1 F^*(z) ((1-z)^r - 1) dz \quad (5.59)$$

Подставляя (5.59) в (5.58) и меняя порядок интегрирования и суммирования, найдем

$$K_{n,p}^r = B_0 \frac{r!}{n!p!} \int_0^1 F^*(z) (1-z)^n \sum_{k=0}^p (-1)^k \binom{p}{k} (1-z)^k dz \quad (5.60)$$

Сумма в (5.60) легко вычисляется, что приводит к

$$K_{n,p}^r = B_0 \frac{r!}{n!p!} \int_0^1 F^*(z) z^p ((1-z)^{r-p} - \delta_{p,0} \delta_{r,n}) dz \quad (5.61)$$

Поскольку в дальнейшем нас будут интересовать лишь нелинейные матричные элементы, то последний член в скобках в подынтегральной функции можно отбросить. В (5.61) удобно

перейти к интегрированию по симметричному промежутку, заменяя переменную интегрирования $z = (1 - x)/2$

$$K_{n,p}^r = B_0 \frac{r!}{2 \cdot n! p!} \int_{-1}^1 \chi(x) \left(\frac{1+x}{2} \right)^n \left(\frac{1-x}{2} \right)^p dx \quad (5.62)$$

Здесь $\chi(x) = F^*((1-x)/2)$, а $x = \cos \theta$.

Рассмотрим нормированную на промежутке $(-1,1)$ функцию

$$S_{n,N}(x) = \frac{1}{P} \left(\frac{1+x}{2} \right)^n \left(\frac{1-x}{2} \right)^{N-n}, \quad N = n + p \quad (5.63)$$

$$P = 2 \frac{n!(N-n)!}{(N+1)!}$$

Подставляя (5.63) в (5.62) и учитывая, что для максвелловских молекул $r = N$, имеем

$$K_{n,p}^N = B_0 \frac{1}{N+1} \int_{-1}^1 \chi(x) S_{n,N}(x) dx \quad (5.64)$$

Легко показать, что функция $S_{n,N}(x)$ имеет единственный максимум, который находится в точке $x_0 = 2n/N - 1$. Существенно, что положение максимума определяется отношением n/N . Подчеркнем, что до сих пор нелинейные МЭ выражались через коэффициенты $J_q, \tilde{J}_q$, т.е. через моменты от угловой части сечения рассеяния с функциями $S_{0,N}(x), S_{N,N}(x)$, имеющими максимум на краю промежутка. Это и создавало сложности при вычислении нелинейных МЭ с большими индексами. Переход к моментам с функцией $S_{n,N}(x)$, положение максимума которой зависит от индекса n , устраняет эти трудности.

На рисунке 5.6 представлена функция $S_{n,N}(x)$ при $N = 10$ и $n = 0, 2, 5, 10$. Видно, что она имеет довольно широкий максимум, причем при $n/N = 0.5$ функция симметрична, а по мере приближения значения $2n/N - 1$ к краям промежутка она становится все более асимметричной.

На рисунке 5.7 представлена функция $S_{n,N}(x)$ при различных значениях N и отношении $n/N = 0.5$. Видно, что с ростом N величина максимума растет, а сам он становится уже. В пределе при $N \rightarrow \infty$ зависимость $S_{N/2,N}(x)$ стремится к $\delta(x)$. При произвольном отношении n/N в пределе $N \rightarrow \infty$ функция $S_{n,N}(x)$ переходит в $\delta(x - x_0)$. Из формулы (5.64) теперь очевидно, что асимптотически при больших N

$$K_{n,N-n}^N / B_0 = \frac{1}{N+1} \chi(x_0) = \frac{1}{N+1} F^*(1 - n/N) \quad (5.65)$$

На рисунке 5.8 приведено сравнение величин $(N+1)K_{n,N-n}^N$ с функцией $F^*(1 - n/N)$

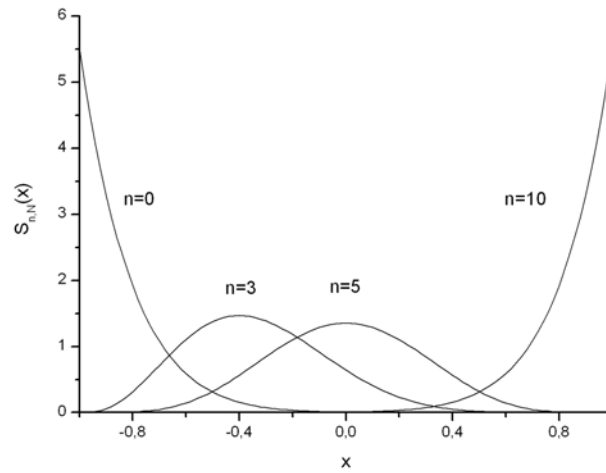


Рисунок 5.6 Функция $S_{n,N}(x)$ при $N = 10$ для различных n .

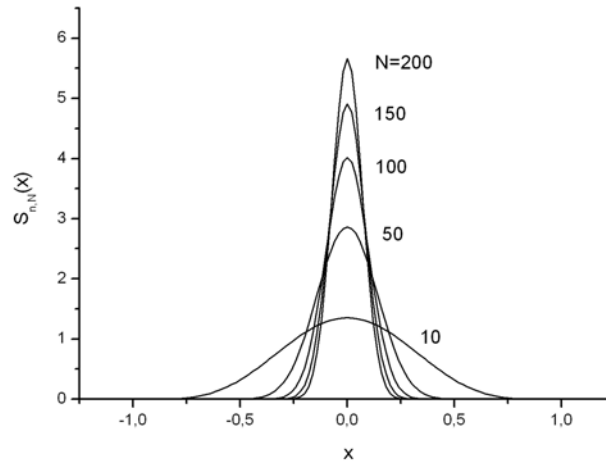


Рисунок 5.7 Функция $S_{n,N}(x)$ для различных N и $n/N = 0.5$.

при различных N . Видно, что уже для $N=30$ нулевое приближение аппроксимирует матричные элементы с неплохой точностью. Более точный результат может быть получен из асимптотического разложения интеграла (5.64) при больших значениях параметра N .

Рассмотрим интеграл

$$I_{p,n}(N) = \int_{-1}^1 \chi(x) S_{n,N}(x) dx = \frac{1}{P} \int_{-1}^1 \chi(x) \omega_{p,n}(x) dx \quad (5.66)$$

Будем считать, что отношения $\alpha = p/N$, $\beta = n/N$ остаются постоянными при $N \rightarrow \infty$.

Представим ядро $\omega_{p,n}(x)$ в виде

$$\omega_{p,n}(x) = \left(\frac{1+x}{2} \right)^n \left(\frac{1-x}{2} \right)^p = \exp \left(n \cdot \ln \left(\frac{1+x}{2} \right) + p \cdot \ln \left(\frac{1-x}{2} \right) \right) = \exp(g(x)) \quad (5.67)$$

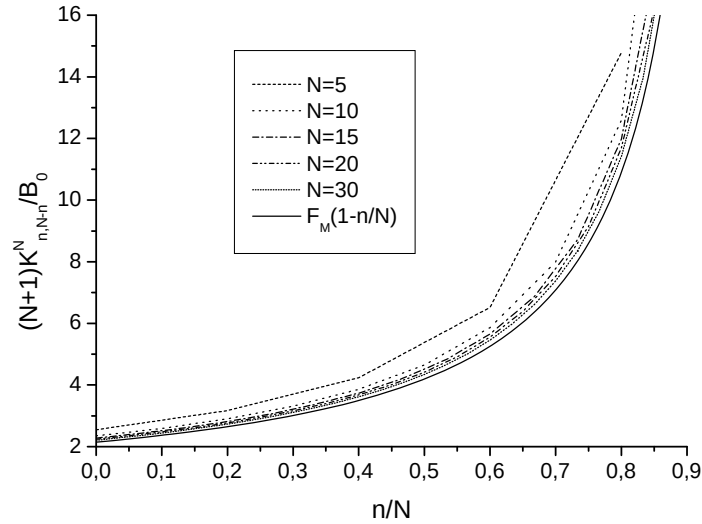


Рисунок 5.8 Величина $(N+1)K_{n, N-n}^N / B_0$ в зависимости от n/N при различных N и функция $F_M(1-n/N)$.

Функция $g(x)$ имеет максимум в точке $x_0 = \beta - \alpha$, которая, естественно, совпадает с точкой максимума $\omega_{p,n}(x)$. Ширина пика в максимуме определяется величиной

$$|g''(x_0)|^{-1/2} = \frac{(4np)^{1/2}}{N^{3/2}} = \left(\frac{4\alpha\beta}{N}\right)^{1/2}. \text{ Выделяя параметр } N \text{ в показателе экспоненты в (5.67), для}$$

интеграла (5.66) найдем

$$I_{p,n}(N) = \frac{1}{P} \int_{-1}^1 \chi(x) \cdot \exp(N \cdot f(x)) dx \quad (5.68)$$

Здесь функция $f(x) = \beta \ln\left(\frac{1+x}{2}\right) + \alpha \ln\left(\frac{1-x}{2}\right)$ не зависит от N , и сам интеграл можно

оценить по методу Лапласа. При $\alpha \neq 0$, $\beta \neq 0$ точка максимума находится внутри промежутка $[-1,1]$, и асимптотика может быть получена заменой переменной $x = \psi(\tau)$, где

функция $\psi(\tau)$ неявно определяется соотношением $f(x_0) - f(x) = \tau^2$, и разложением

функции нагрузки $\chi(\psi(\tau))\psi'(\tau)$ в ряд $\sum_{k=0}^{\infty} c_k \tau^k$ в окрестности точки $\tau = 0$ (см., например,

[114]). Это дает

$$I_{p,n}(N) = \frac{1}{P} e^{N \cdot f(x_0)} \sqrt{\frac{\pi}{N}} \sum_{k=0}^{\infty} \frac{c_{2k}}{N^k} \cdot \frac{(2k)!}{4^k k!} = \frac{1}{P} e^{N \cdot f(x_0)} \sqrt{\frac{\pi}{N}} \cdot \left(c_0 + \frac{1}{2} \frac{c_2}{N} + O(N^{-2}) \right) \quad (5.69)$$

Величина P представляет собой интеграл от ядра $\omega_{p,n}(x)$ и также может быть рассмотрена

как интеграл Лапласовского типа. Асимптотическая оценка этого интеграла имеет вид

$$\begin{aligned}
P &= \int_{-1}^1 1 \cdot \omega_{n,p}(x) dx = \int_{-1}^1 1 \cdot e^{Nf(x)} dx = e^{N \cdot f(x_0)} \sqrt{\frac{\pi}{N}} \sum_{k=0}^{\infty} \frac{d_{2k}}{N^k} \cdot \frac{(2k)!}{4^k k!} = \\
&= e^{N \cdot f(x_0)} \sqrt{\frac{\pi}{N}} \cdot \left(d_0 + \frac{1}{2} \frac{d_2}{N} + O(N^{-2}) \right) \quad (5.70)
\end{aligned}$$

где коэффициенты d_k определяются разложением в ряд функции $\psi'(\tau)$. Подставляя (5.70) в (5.69) и вычисляя коэффициенты c_k , d_k , найдем

$$\begin{aligned}
I_{p,n} &= \chi(x_0) + 2 \cdot [(\alpha - \beta) \cdot \chi'(x_0) + \alpha\beta \cdot \chi''(x_0)] \cdot \frac{1}{N} + \\
&+ \frac{2}{3} \cdot (6(\beta - \alpha)\chi'(x_0) + 3(2 - 11\alpha\beta)\chi''(x_0) - 10(\beta - \alpha)\alpha\beta\chi'''(x_0) + \\
&+ 3\chi'''(x_0)(\alpha\beta)^2) \cdot \frac{1}{N^2} + O(N^{-3}) \quad (5.71)
\end{aligned}$$

Заметим, что полученное асимптотическое разложение (5.71) не теряет смысл и в случае, когда отношение $\alpha = p/N$ или $\beta = n/N$ обращается в ноль. Однако в этом случае точка максимума оказывается на краю промежутка, и метод получения асимптотической оценки является не вполне обоснованным. Для получения асимптотики интеграла (5.66) при малых значениях β представим его в виде

$$I_{p,n}(N) = \frac{1}{P} \int_{-1}^1 \chi(x) \left(\frac{1+x}{1-x} \right)^n \left(\frac{1-x}{2} \right)^N dx = \frac{1}{P} \int_{-1}^1 \chi(x) \left(\frac{1+x}{1-x} \right)^n \exp \left(N \ln \left(\frac{1-x}{2} \right) \right) dx \quad (5.72)$$

После замены переменной и разложения функции нагрузки в окрестности $x = -1$ найдем

$$I_{p,n}(N) = \chi(-1) + 2(n+1) \cdot \chi'(-1) \cdot \frac{1}{N} + (-4\chi'(-1) + 2(n+2)\chi''(-1)) \cdot \frac{(n+1)}{N^2} + O(N^{-3}) \quad (5.73)$$

Отметим, что разложение (5.73) совпадает с (5.71) при $\beta = 0$. Следовательно, формула (5.71) пригодна для асимптотической оценки МЭ $K_{n,N-n}^N$ при всех значениях индекса n .

Было проведено сравнение точного значения величины $(N+1)K_{\beta N, \alpha N}^N / B_0$, полученной численным расчетом в случае максвелловских молекул, со значениями нулевого, первого и второго приближений. Оказалось, что уже первое приближение аппроксимирует значение МЭ с хорошей точностью даже для $N=5$, а второе приближение определяет величину $(N+1)K_{\beta N, \alpha N}^N / B_0$ с точностью до долей процента.

Угловая зависимость $\chi(x)$ в случае максвелловских молекул стремится к бесконечности при $x \rightarrow 1$, причем значения производных растут с увеличением их порядка. Поэтому в этой области значения $(N+1)K_{n,N-n}^N$ растут при n близких к N и $N \rightarrow \infty$, и

асимптотическая оценка осуществляется в очень ‘жестких’ условиях. Однако качество приближения, даваемого формулой (5.71), и в этом случае остается достаточно высоким.

5.2 Построение ядра линейного интеграла столкновений в изотропном случае для псевдомаксвелловских молекул

Как указано в параграфе 4.1, разложение ФР по базисным функциям в моментном методе сходится лишь при выполнении условия Грэда (4.12). Это ограничение снимается, если разлагать ФР не по сферическим полиномам Эрмита, а по сферическим гармоникам. Такой метод, как показано в 4.2, приводит к замене интеграла столкновений набором интегральных операторов. Ядра этих операторов, зависящие только от модулей скоростей, играют ту же роль, что и МЭ в обычном моментном методе. Переход от уравнения Больцмана к системе уравнений для коэффициентов разложения ФР по сферическим гармоникам дает возможность решения более неравновесных задач, чем те, для которых применима система моментных уравнений. Формула (4.37) позволяет рассчитать ядра $G_{l_1, l_2}^l(v, v_1, v_2)$ для произвольного закона взаимодействия как в линейном ($l_2 = 0, l_1 = l$ или $l_1 = 0, l_2 = l$), так и в нелинейном случае, конечно, если известны МЭ с большими индексами. Как показано в 4.2, ядра $L_l^{(1)}(v, v_1)$ линейного интеграла столкновений связаны с $G_{l,0}^l(v, v_1, v_2)$ формулой (4.63)

$$L_l^{(1)}(v, v_1) = \int_0^\infty G_{l,0}^l(v, v_1, v_2) M_T(v_2) v_2^2 dv_2 \quad (5.74)$$

Переходя к безразмерным скоростям, интегрируя по c_2 и учитывая ортогональность полиномов Сонина, получим

$$L_l^{(1)}(c, c_1) = M(c) \sum_{r=0}^\infty \sum_{r_1=0}^\infty c^l S_{l+1/2}^r(c^2) K_{r_1 l, 0}^{rl} \frac{c_1^l S_{l+1/2}^{r_1}(c_1^2)}{\sigma_{r_1 l}} \quad (5.75)$$

Эта формула позволяет вычислить ядра линейного интеграла столкновений, если известны линейные МЭ $K_{r_1 l, 0}^{rl}$. Известные аналитические выражения для $L_l^{(1)}(c, c_1)$ в случае твердых шаров дают возможность оценить применимость (5.75) для расчета ядер. Выполненные нами вычисления показали, что сумма (5.75) действительно сходится к результату, полученному Гекке, однако при некоторых значениях аргументов ряд сходится плохо, и необходимо учитывать очень большое число членов в сумме. В связи с этим представляется перспективным подход к расчету «хвоста» ряда (5.75), основанный на использовании асимптотики МЭ и полиномов Сонина при больших индексах и замене суммирования по индексу интегрированием.

В работе [115] такой метод использован для расчета ядра линейного интеграла обратных столкновений в случае модели псевдомаксвелловских молекул при $l = 0$. В этом параграфе мы изложим основные результаты [115]. В модели псевдомаксвелловских молекул сечение обратно пропорционально модулю относительной скорости, а угловое распределение изотропно. При этом матричные элементы вычисляются аналитически для любых значений индексов, и для интеграла обратных столкновений имеют вид

$$K_{n0,00}^{(+)r0} = K_{n0}^{(+)r} = B_0 n_0^2 \frac{1}{(r+1)} \cdot \delta_n^r. \quad (5.76)$$

При этом двойная сумма в (5.75) переходит в однократную. Нормировочные коэффициенты σ_{r0} , как легко видеть из (4.10), имеют вид

$$\sigma_{r0} = \frac{1}{2\pi} \frac{(2r+1)!!}{(2r)!!} = \frac{1}{2\pi} \nu_r \quad (5.77)$$

Таким образом, задача сводится к вычислению суммы ряда

$$H(c, c_1) = \sum_{r=0}^{\infty} \frac{S_{1/2}^r(c^2) \cdot S_{1/2}^r(c_1^2)}{(r+1) \cdot \nu_r}, \quad (5.78)$$

Для отыскания функции $H(c, c_1)$ разобьем ряд (5.78) на две части – сумму конечного числа элементов $H_{m-1}^f(c, c_1)$ с $r = 0, \dots, m-1$ и остаток

$$H_m(c, c_1) = \sum_{r=m}^{\infty} \frac{S_{1/2}^r(c^2) \cdot S_{1/2}^r(c_1^2)}{(r+1) \cdot \nu_r} \quad (5.79)$$

Конечная сумма вычисляется непосредственно, а остаток (5.79) может быть оценен с помощью формулы Эйлера-Маклорена. Как известно [116], эта формула сводит вычисление суммы к расчету интеграла и используется в том случае, когда зависимость членов z_r ряда

$Z_m = \sum_{r=m}^{\infty} z_r$ от индекса может быть интерполирована гладким образом во всех точках

вещественной оси. Таким образом, если $h(t)$ - гладкая функция такая, что $h(r) = z_r$, то, как показано в [116],

$$Z_m = \frac{1}{2} h(m) + \int_m^{\infty} h(t) dt + \sum_{s=1}^{k-1} (-1)^s \omega_{s+1}(0) \cdot h^{(s)}(m) + (-1)^{k+1} \int_m^{\infty} \omega_k(t) \cdot h^{(k)}(t) dt \quad (5.80)$$

Здесь

$$\omega_1(x) = x - [x] - 1/2, \quad \omega_s(x) = \int \omega_{s-1}(x) dx, \quad \int_0^1 \omega_s(x) dx = 0.$$

Непосредственное использование (5.80) для получения остатка $H_m(c, c_1)$ весьма затруднительно. Поэтому необходимо, во-первых, исследовать асимптотическое поведение членов ряда (5.79) при больших значениях r и, во-вторых, воспользоваться (5.80) для

отыскания асимптотики $H_m(c, c_1)$ по m . Заметим, что аналогичная задача возникает при расчете ядер и в неізотропном случае, однако для расчета остатка ряда необходимо использовать асимптотику полиномов Сонина $S_{l+1/2}^r(c^2)$ при произвольных значениях l .

Метод получения асимптотики полиномов Сонина $S_{l+1/2}^r(x)$ по индексу r был предложен в [55], где с его помощью найден первый член асимптотического разложения. Для вывода формул заметим, что функция $V_r(x) = e^{-x/2} S_{l+1/2}^r(x)$ представляет собой интеграл дифференциального уравнения

$$xV_r'' + (\alpha + 1)V_r' + (r + (\alpha + 1)/2)V_r = \frac{xV_r}{4}, \quad (5.81)$$

где $\alpha = l + 1/2$, регулярна в $x = 0$ и

$$V_r(0) = S_{l+1/2}^r(0) = \Gamma(r + \alpha + 1)/(r! \Gamma(\alpha + 1)). \quad (5.82)$$

Считая, что правая часть уравнения (5.81) известна, и применяя метод Лагранжа, перейдем от (5.81) к интегральному уравнению

$$V_r(x) = A_1 U_r^1(x) + A_2 U_r^2(x) + \frac{\pi}{4R} \int_0^x (Ry)^{\alpha+1} V_r(y) \cdot [U_r^1(y) U_r^2(x) - U_r^1(x) U_r^2(y)] dy \quad (5.83)$$

Здесь

$$U_r^1(x) = (Rx)^{-\alpha/2} J_\alpha(2\sqrt{Rx}), \quad (5.84)$$

$$U_r^2(x) = (Rx)^{-\alpha/2} Y_\alpha(2\sqrt{Rx}), \quad (5.85)$$

$$R = r + (\alpha + 1)/2, \quad (5.86)$$

а $J_\alpha(y)$, $Y_\alpha(y)$ - функции Бесселя первого и второго рода. Принимая во внимание ограниченность $V_r(x)$ в окрестности нуля и (5.84), (5.85) найдем, что при $x \rightarrow 0$ интегральный член в (5.83) есть $O(x^2)$. Поэтому, согласно (5.82), значения постоянных интегрирования будут

$$A_1 = \frac{\Gamma(r + \alpha + 1)}{r!}, \quad A_2 = 0, \quad (5.87)$$

Это, в свою очередь, дает

$$V_r(x) = \frac{\Gamma(r + \alpha + 1)}{r!} \left((Rx)^{-\alpha/2} J_\alpha(2\sqrt{Rx}) + q_r(x) \right) \quad (5.88)$$

где

$$q_r(x) = \frac{\pi}{4RA_1} \int_0^x (Ry)^{\alpha+1} V_r(y) [U_r^1(y) U_r^2(x) - U_r^1(x) U_r^2(y)] dy = \frac{1}{A_1} \hat{P}(V_r). \quad (5.89)$$

В [55] приведена оценка порядков функций $q_r(x)$ и $U_r^1(x)$ в интервалах $0 \leq x \leq R^{-1}$, $x > R^{-1}$. При этом

$$\begin{aligned} U_r^1(x) &= O(1), & q_r(x) &= O(R^{-2}) & 0 \leq x \leq R^{-1} \\ U_r^1(x) &= O((Rx)^{-(\alpha+1/2)/2}), & q_r(x) &= O(R^{-1/4} x^{3/2}) O((Rx)^{-1/2}) & x > R^{-1} \end{aligned} \quad (5.90)$$

Таким образом, при фиксированном x и $r \rightarrow \infty$ функция $q_r(x)$ имеет более высокий порядок малости, чем $U_r^1(x)$, и формула (5.88) представляет собой асимптотическое разложение.

Вычислим теперь следующий член асимптотики. Для этого необходимо подставить (5.88) в правую часть (5.83). Оценка вклада функций $U_r^1(x)$ и $q_r(x)$ в интегральный член, проведенная с использованием (5.90), позволяет утверждать, что

$$\begin{aligned} \hat{P}(U_r^1) &= O(R^{-2}), & \hat{P}(q_r) &= O(R^{-4}), & 0 \leq x \leq R^{-1} \\ \hat{P}(U_r^1) &= O(R^{-1}x), & \hat{P}(q_r) &= O(R^{-5/4} x^{5/2}), & x > R^{-1} \end{aligned} \quad (5.91)$$

то есть основной вклад в асимптотику этого члена дает $\hat{P}(U_r^1(x))$. Подстановка первого члена (5.88) в (5.83) и вычисление интегралов дает выражение для следующего члена асимптотического разложения функции $V_r(x)$, а следовательно, и полинома Сонина

$$\begin{aligned} S_{l+1/2}^r(x) &= \frac{\Gamma(r+l+3/2)}{r!} \cdot \exp(x/2) \cdot \left\{ (Rx)^{-(l+1/2)/2} J_{l+1/2}(2\sqrt{Rx}) + \right. \\ &\quad \left. \frac{x^{3/2}}{12R^{1/2}} (Rx)^{-(l+1/2)/2} Y_{l+1/2}(2\sqrt{Rx}) + o((R)^{-(l+3/2)/2} Y_{l+1/2}(2\sqrt{Rx})) \right\}, \quad R \rightarrow \infty. \end{aligned} \quad (5.92)$$

Сравнение $S_{l+1/2}^r(x)$ при $x=1$ с (5.92) показывает, что несмотря на значительный рост величины полинома Сонина с ростом l , относительная погрешность асимптотического представления (5.92), например, при $r=1000$ не превосходит $3 \cdot 10^{-4}$ для всех значений l . Отметим, что дальнейшие члены асимптотического разложения $S_{l+1/2}^r(x)$ могут быть получены последовательным применением того же приема – подстановкой уже имеющегося разложения в формулу (5.83).

Использование разложения (5.92) для отыскания асимптотики $H_m(c, c_1)$ по m не вполне удобно, поскольку входящие в асимптотику интегралы не удастся вычислить в аналитическом виде. Для перехода к элементарным функциям в (5.92) заметим, что для функций Бесселя с полуцелым индексом имеют место соотношения

$$J_{l+1/2}(x) = (-1)^l \left(\frac{2}{\pi} \right)^{1/2} x^{l+1/2} \left(\frac{d}{x dx} \right)^l \frac{\sin x}{x}, \quad l = 0, 1, 2 \dots$$

$$Y_{l+1/2}(x) = (-1)^{l+1} \left(\frac{2}{\pi} \right)^{1/2} x^{l+1/2} \left(\frac{d}{x dx} \right)^l \frac{\cos x}{x}, \quad l = 0, 1, 2 \dots \quad (5.93)$$

Выполнив дифференцирование в (5.93), найдем

$$J_{l+1/2}(x) = \left(\frac{2}{\pi x} \right)^{1/2} \left[\cos(x - (l+1/2)\pi/2 - \pi/4) - \frac{4(l+1/2)^2 - 1}{8x} \sin(x - (l+1/2)\pi/2 - \pi/4) + O\left(\frac{1}{x^2}\right) \right]$$

$$Y_{l+1/2}(x) = \left(\frac{2}{\pi x} \right)^{1/2} \left[\sin(x - (l+1/2)\pi/2 - \pi/4) + \frac{4(l+1/2)^2 - 1}{8x} \cos(x - (l+1/2)\pi/2 - \pi/4) + O\left(\frac{1}{x^2}\right) \right] \quad (5.94)$$

Выражения (5.94) представляют собой асимптотические разложения функций Бесселя при больших значениях аргумента. Их подстановка в (5.92) приводит к

$$S_{l+1/2}^r(x) = \frac{\Gamma(r+l+3/2)}{r! \sqrt{\pi}} \cdot \exp(x/2) \cdot \left\{ \frac{1}{(Rx)^{(l+1)/2}} \cos(2\sqrt{Rx} - (l+1)\pi/2) + \left(-\frac{4(l+1/2)^2 - 1}{16(Rx)^{(l+2)/2}} + \frac{x^2}{12(Rx)^{(l+2)/2}} \right) \sin(2\sqrt{Rx} - (l+1)\pi/2) + O((Rx)^{-(l+3)/2}) \right\}, \quad R \rightarrow \infty. \quad (5.95)$$

Как показывают расчеты, использование (5.95) вместо (5.92) ухудшает оценку $S_{l+1/2}^r(x)$, особенно для больших значений l . Причина этого заключается в том, что область применимости асимптотики функций Бесселя с ростом l сдвигается в область больших значений аргумента. Это демонстрирует рисунок 5.9а, где приведены значения $S_{l+1/2}^r(x)$ и

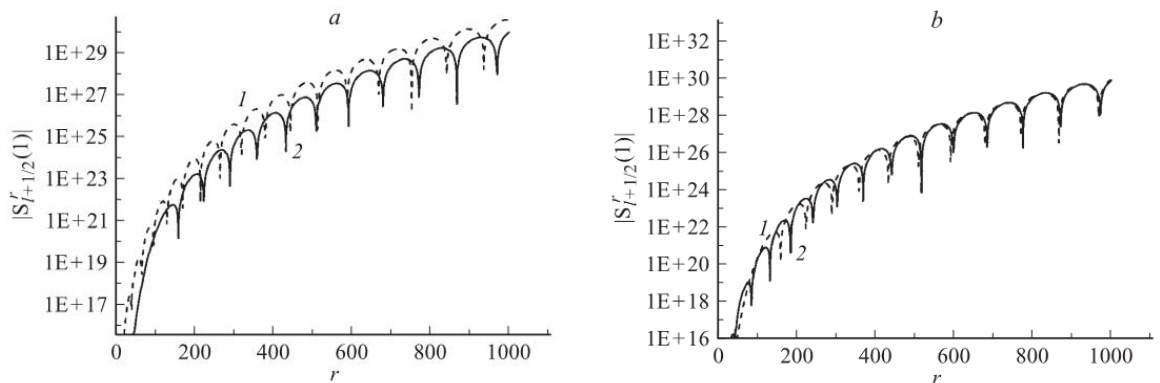


Рисунок 5.9 Зависимость полинома Сонина $|S_{l+1/2}^r(1)|$ (1) и асимптотической оценки (2) от r при $l = 20$: (а) для асимптотической оценки использована формула (5.95); (б) для асимптотической оценки использована формула (5.96).

асимптотическая оценка (5.95) для $l = 20$. Видно, что значения асимптотической оценки сдвинуты по отношению к значениям $S_{l+1/2}^r(x)$ и отличаются от них, по крайней мере, на порядок. Для компенсации этого различия введем «фазовый сдвиг» в аргумент (5.95), т.е. будем искать асимптотическую оценку $S_{l+1/2}^r(x)$ в виде

$$S_{l+1/2}^r(x) = \frac{\Gamma(r+l+3/2)}{r! \sqrt{\pi} (Rx)^{(l+1)/2}} \cdot \exp(x/2) \cdot \left[\cos(2\sqrt{(R+\Delta)x} - (l+1)\pi/2) + O((Rx)^{-1}) \right]. \quad (5.96)$$

Считая Δ малым, разложим (5.96) в ряд и сопоставим первые члены разложения с (5.95). Это дает

$$\Delta = \left(\frac{4(l+1/2)^2 - 1}{16} - \frac{x^2}{12} \right) \frac{1}{x} \quad (5.97)$$

Сравнение $S_{l+1/2}^r(x)$ с асимптотической оценкой (5.96), (5.97) при $l = 20$ приведено на рисунке 5.9b. Как видно из рисунка, введение «фазового сдвига» в аргумент оценки (5.95) значительно улучшает соответствие между точными и приближенными значениями $S_{l+1/2}^r(x)$. В заключение отметим, что при $l = 0$ асимптотические оценки (5.92) и (5.95) совпадают, и погрешность при их использовании оказывается величиной порядка 10^{-4} при $x = 1$ и $r = 1000$.

Перейдем теперь к расчету остатка $H_m(c, c_1)$ (5.79), используя найденную асимптотику. Асимптотика членов ряда (5.79) с учетом (5.92) имеет вид

$$\begin{aligned} a_r &= \frac{S_{1/2}^r(c^2) S_{1/2}^r(c_1^2) (2r)!!}{(r+1)(2r+1)!!} = \exp((c^2 + c_1^2)/2) \times \\ &\quad \times \frac{(\Gamma(r+3/2))^2 (2r)!!}{(r!)^2 (r+1)(2r+1)!!} \cdot \frac{1}{\pi} \cdot \left\{ \frac{\sin(2c\sqrt{R}) \sin(2c_1\sqrt{R})}{Rcc_1} - \right. \\ &\quad \left. - \frac{c^3 \cos(2c\sqrt{R}) \sin(2c_1\sqrt{R}) + c_1^3 \cos(2c_1\sqrt{R}) \sin(2c\sqrt{R})}{12R^{3/2}cc_1} + o(R^{-3/2}) \right\} = \\ &= a_r^0 + a_r^1 + o(a_r^1) \end{aligned} \quad (5.98)$$

Принимая во внимание, что

$$\frac{(\Gamma(r+3/2))^2 (2r)!!}{(r!)^2 (r+1)(2r+1)!!} = \frac{\sqrt{\pi} \Gamma(r+3/2)}{2\Gamma(r+2)} \quad (5.99)$$

и заменяя произведение синусов разностью косинусов, представим первый член разложения (5.98) в виде

$$a_r^0 = \frac{\exp((c^2 + c_1^2)/2)}{4\sqrt{\pi}cc_1} \cdot (b_r^- - b_r^+) \quad (5.100)$$

$$b_r^\pm = \frac{\Gamma(r+3/2)}{\Gamma(r+2)} \cdot \frac{\cos(2\sqrt{R}(c \pm c_1))}{R} \quad (5.101)$$

Вклад от первого члена разложения (5.98) в интеграл в формуле Эйлера-Маклорена запишется тогда

$$H_m^0(c, c_1) = \frac{\exp((c^2 + c_1^2)/2)}{4\sqrt{\pi c c_1}} \cdot (B_m(2(c - c_1)) - B_m(2(c + c_1))) , \quad (5.102)$$

где

$$B_m(\beta) = \int_m^\infty h(t) dt , \quad h(t) = \frac{\cos(\beta\sqrt{t+3/4})}{t+3/4} \cdot \frac{\Gamma(t+3/2)}{\Gamma(t+2)} \quad (5.103)$$

Для вычисления интеграла $B_m(\beta)$ получим асимптотическое представление $h(t)$ при $t \rightarrow \infty$. Используя формулу Стирлинга для отношения Γ -функций и раскладывая получившийся результат в ряд по $t+3/4$, найдем

$$\begin{aligned} \frac{\Gamma(t+3/2)}{\Gamma(t+2)} &= \frac{e^{1/2}}{(t+2)^{1/2}} \cdot \left(\frac{t+3/2}{t+2} \right)^{t+1} \cdot (1 + O(t^{-2})) = \\ &= \frac{1}{(t+3/4)^{1/2}} \left(1 + \frac{3}{8} \cdot \frac{1}{t+3/4} + O((t+3/4)^{-2}) \right) \times \\ &\quad \times \left(1 - \frac{5}{8} \cdot \frac{1}{t+3/4} + O((t+3/4)^{-2}) \right), \quad t \rightarrow \infty \end{aligned} \quad (5.104)$$

Это дает

$$h(t) = \frac{\cos(\beta\sqrt{t+3/4})}{(t+3/4)^{3/2}} \cdot \left(1 - \frac{1}{4(t+3/4)} + O((t+3/4)^{-2}) \right), \quad t \rightarrow \infty \quad (5.105)$$

Подстановка (5.105) в (5.103) приводит к

$$\begin{aligned} B_m(\beta) &= 2 \left\{ \left[\frac{\cos(\beta\sqrt{m+3/4})}{\sqrt{m+3/4}} - \beta \left(\frac{\pi}{2} - Si(\beta\sqrt{m+3/4}) \right) \right] - \right. \\ &\quad - \frac{1}{4} \left[\frac{\cos(\beta\sqrt{m+3/4})}{3(m+3/4)^{3/2}} - \beta \frac{\sin(\beta\sqrt{m+3/4})}{6(m+3/4)} - \beta^2 \frac{\cos(\beta\sqrt{m+3/4})}{6\sqrt{m+3/4}} + \right. \\ &\quad \left. \left. + \beta^3 \frac{1}{6} \left(\frac{\pi}{2} - Si(\beta\sqrt{m+3/4}) \right) \right] \right\} + O(m^{-5/2}) \end{aligned} \quad (5.106)$$

Заметим, что члены в квадратных скобках вычисляются при любых значениях β и имеют порядки $O\left(\frac{1}{m}\right)$, $O\left(\frac{1}{m^2}\right)$ при $\beta \neq 0$ и $O\left(\frac{1}{\sqrt{m}}\right)$, $O\left(\frac{1}{m^{3/2}}\right)$ при $\beta = 0$, соответственно.

Второй член разложения (5.98) представим в виде

$$a_r^1 = -\frac{\exp((c^2 + c_1^2)/2)}{48\sqrt{\pi}cc_1} \cdot (d_r(c, c_1) + d_r(c_1, c)) \quad (5.107)$$

$$d_r(c, c_1) = c^3(f_r^+ - f_r^-), \quad f_r^\pm = \frac{\Gamma(r+3/2)}{\Gamma(r+2)} \cdot \frac{\sin(2\sqrt{R}(c \pm c_1))}{R^{3/2}}$$

Вклад от этого члена в интеграл будет

$$H_m^1(c, c_1) = -\frac{\exp((c^2 + c_1^2)/2)}{48\sqrt{\pi}cc_1} \cdot (c^3(F_m(2(c+c_1)) + F_m(2(c_1-c))) + c_1^3(F_m(2(c_1+c)) + F_m(2(c-c_1)))) \quad (5.108)$$

где

$$F_m(\beta) = \int_m^\infty f(t)dt, \quad f(t) = \frac{\sin(\beta\sqrt{t+3/4})}{(t+3/4)^{3/2}} \cdot \frac{\Gamma(t+3/2)}{\Gamma(t+2)} \quad (5.109)$$

Использование асимптотики (5.104) для отношения Γ -функций дает

$$f(t) = \frac{\sin(\beta\sqrt{t+3/4})}{(t+3/4)^2} \cdot \left(1 - \frac{1}{4(t+3/4)} + O((t+3/4)^{-2})\right), \quad t \rightarrow \infty, \quad (5.110)$$

При этом для интегралов $F_m(\beta)$ имеем

$$F_m(\beta) = \left\{ \left[\frac{\sin(\beta\sqrt{m+3/4})}{m+3/4} + \beta \frac{\cos(\beta\sqrt{m+3/4})}{\sqrt{m+3/4}} - \beta^2 \left(\frac{\pi}{2} - Si(\beta\sqrt{m+3/4}) \right) \right] - \frac{1}{2} \left[\frac{\sin(\beta\sqrt{m+3/4})}{4(m+3/4)^2} + \frac{\beta \cos(\beta\sqrt{m+3/4})}{12(m+3/4)^{3/2}} - \frac{\beta^2 \sin(\beta\sqrt{m+3/4})}{24(m+3/4)} - \frac{\beta^3 \cos(\beta\sqrt{m+3/4})}{24\sqrt{m+3/4}} + \frac{\beta^3}{24} \left(\frac{\pi}{2} - Si(\beta\sqrt{m+3/4}) \right) \right] \right\} + O(m^{-7/2}) \quad (5.111)$$

Члены в квадратных скобках имеют порядок $O\left(\frac{1}{m^{3/2}}\right)$, $O\left(\frac{1}{m^{5/2}}\right)$, соответственно, при $\beta \neq 0$

и обращаются в ноль при $\beta = 0$,

Для того, чтобы убедиться, что представление $H_m(c, c_1)$ в виде суммы

$$H_m(c, c_1) = H_m^0(c, c_1) + H_m^1(c, c_1) + \frac{1}{2}(a_m^0 + a_m^1) \quad (5.112)$$

дает главный вклад, необходимо оценить остаток в формуле Эйлера-Маклорена (5.80). Он

включает в себя производные от $a_r = \frac{S_{1/2}^r(c^2)S_{1/2}^r(c_1^2)(2r)!!}{(r+1)(2r+1)!!}$ по переменной r . Исследуем

порядки этих производных при большом значении индекса. Для этого запишем a_r в виде

$$a_r = \exp((c^2 + c_1^2)/2) \frac{(\Gamma(r+3/2))^2 (2r)!!}{(\Gamma(r+1))^2 (r+1)(2r+1)!!} U_r(c^2) U_r(c_1^2) =$$

$$= \exp((c^2 + c_1^2)/2) \frac{\sqrt{\pi}}{2} \frac{\Gamma(r+3/2)}{\Gamma(r+2)} U_r(c^2) U_r(c_1^2), \quad (5.113)$$

где $U_r(x) = \exp(-x/2) \frac{S'_{1/2}(x)\Gamma(r+1)}{\Gamma(r+3/2)}$, и найдем производную

$$\begin{aligned} \frac{\partial a_r}{\partial r} = \frac{\sqrt{\pi}}{2} \frac{\Gamma(r+3/2)}{\Gamma(r+2)} & \left\{ (\psi(r+3/2) - \psi(r+2)) U_r(c^2) U_r(c_1^2) + \right. \\ & \left. + \left(\frac{\partial U_r(c^2)}{\partial r} \cdot U_r(c_1^2) + \frac{\partial U_r(c_1^2)}{\partial r} \cdot U_r(c^2) \right) \right\}. \end{aligned} \quad (5.114)$$

Здесь $\psi(x) = \Gamma'(x)/\Gamma(x)$. Асимптотическая оценка $\frac{\partial U_r(x)}{\partial r}$ проведена в приложении А.

Согласно полученному там результату, порядок производной $\frac{\partial U_r(c^2)}{\partial r}$ равен $O(R^{-1})$.

Асимптотику $\frac{\partial a_r}{\partial r}$ теперь легко найти, учитывая (5.90), (5.104) и асимптотику функции

$$\psi(r) = \ln(r) - \frac{1}{2r} - \frac{1}{12r^2} + O\left(\frac{1}{r^4}\right):$$

$$\frac{\partial a_r}{\partial r} = O(R^{-2}). \quad (5.115)$$

Оценку следующих производных функции a_r можно получить, последовательно дифференцируя соотношение (5.114). Уравнения для $\frac{\partial^2 U_r(c^2)}{\partial r^2}$, $\frac{\partial^3 U_r(c^2)}{\partial r^3}$, .. будут отличаться от (А.2) только свободным членом, и их асимптотика может быть найдена по тому же алгоритму. Несложные, но громоздкие выкладки дают

$$\frac{\partial^2 U_r(c^2)}{\partial r^2} = O(R^{-3/2}), \quad \frac{\partial^3 U_r(c^2)}{\partial r^3} = O(R^{-2}) \quad (5.116)$$

При этом

$$\frac{\partial^2 a_r}{\partial r^2} = O(R^{-5/2}), \quad \frac{\partial^3 a_r}{\partial r^3} = O(R^{-3}) \quad (5.117)$$

Используя теперь оценку остатка в формуле (5.80) с $k=3$, окончательно получим

$$H_m(c, c_1) = H_m^0(c, c_1) + H_m^1(c, c_1) + \frac{1}{2} a_m^0 + O(m^{-2}) \quad (5.118)$$

На рисунках 5.10а, 5.10b представлены результаты расчетов ядра с помощью суммы конечного числа членов $H_m^f(c, c_1)$ при различных значениях величины $A = \sqrt{c^2 + c_1^2}$. Видно, что при $A=1$ значения ядра неплохо аппроксимируются суммой ряда уже начиная с $m=50$

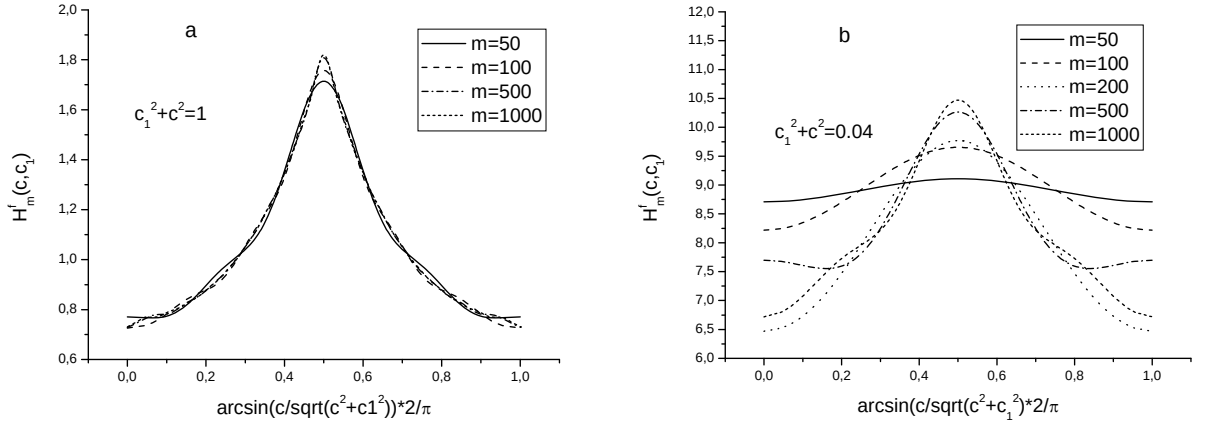


Рисунок 5.10 Вид ядра, рассчитанного с помощью суммы конечного числа членов $H_m^f(c, c_1)$ при различных значениях m в сечениях $A = \sqrt{c^2 + c_1^2} = 1$ (a) и $A = \sqrt{c^2 + c_1^2} = 0.2$ (b).

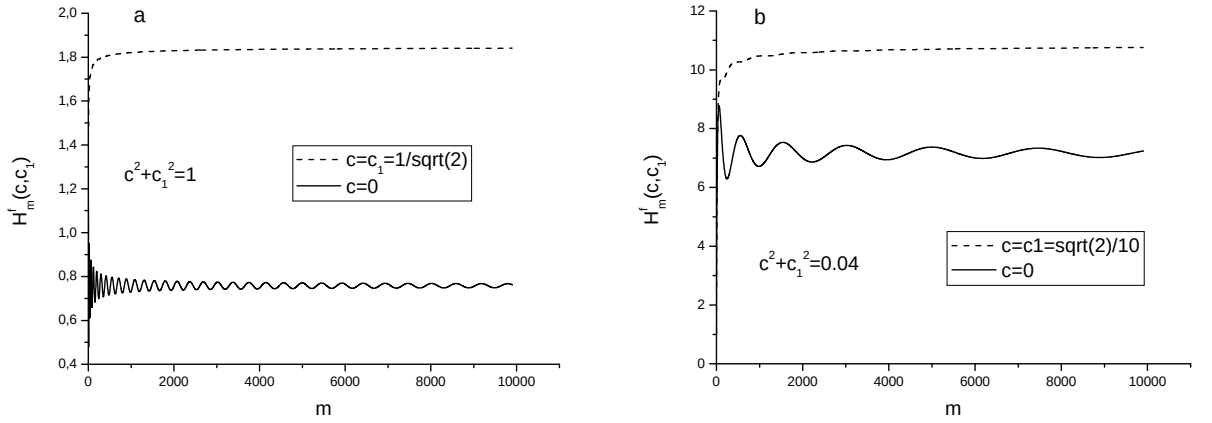


Рисунок 5.11 Зависимость суммы $H_m^f(c, c_1)$ в точках $c = c_1$, $c = 0$ от числа членов в сумме m при $A = 1$ (a) и $A = 0.2$ (b).

почти для всех скоростей за исключением окрестности точек $c = c_1$, $c = 0$, $c_1 = 0$. В случае $A = 0.2$ сходимость к предельному значению не наблюдается даже при $m = 1000$. На рисунках 5.11a, 5.11b детально прослежено поведение суммы $H_m^f(c, c_1)$ в точках $c = c_1$, $c = 0$ для $A = 1$, $A = 0.2$. При $A = 1$ в точке $c = 0$ значение суммы осциллирует и имеет амплитуду порядка 7% для $m = 10000$, а в точке $c = c_1$ значение монотонно растет с ростом m . Те же особенности имеет поведение $H_m^f(c, c_1)$ при $A = 0.2$. На рисунке 5.12 приведена зависимость суммы ряда (5.78), рассчитанного как сумма конечного числа членов и остатка, $H(c, c_1) = H_{m-1}^f(c, c_1) + H_m(c, c_1)$, от числа членов для $A = 0.2$. Видно, что так оцененная сумма ряда становится постоянной уже при $m \approx 30$. Рисунок 5.13 детально иллюстрирует выход на

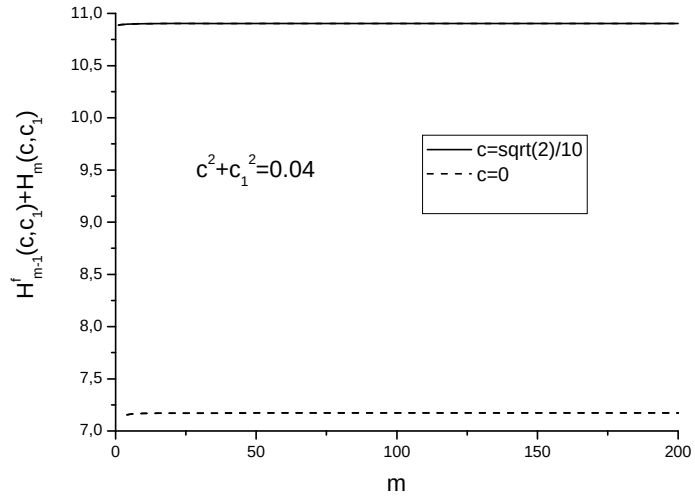


Рисунок 5.12 Зависимость значения ядра, рассчитанного как сумма конечного числа членов и остатка, $H(c, c_1) = H_{m-1}^f(c, c_1) + H_m(c, c_1)$, от числа членов в конечной сумме в точках $c = c_1$, $c = 0$ при $A = 0.2$.

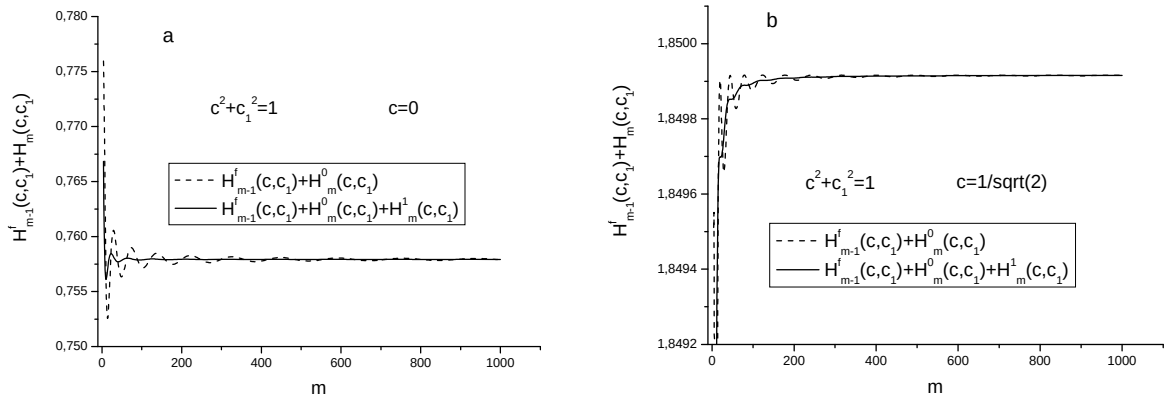


Рисунок 5.13 Зависимость значения ядра $H(c, c_1) = H_{m-1}^f(c, c_1) + H_m(c, c_1)$ от числа членов в конечной сумме в точке $c = 0$ (a) и $c = 1/\sqrt{2}$ (b) при $A = 1$. с учетом одного и двух членов асимптотики остатка.

предельные значения для $A = 1$. На нем отражено различие результатов при учете одного и двух членов асимптотики. Расчеты показывают, что для $A = 0.2$ это различие незначительно, в то время как для $A = 1$, как видно из рисунка 5.13, использование второго члена асимптотики существенно улучшает сходимость. Заметим, что использование оценки остатка при расчете суммы ряда дает три правильных знака уже при $m = 15$ во всех

рассмотренных случаях. На рисунках 5.14а, 5.14б приведены зависимости $H(c, c_1)$, рассчитанные по формуле $H(c, c_1) = H_{m-1}^f(c, c_1) + H_m(c, c_1)$ при $m = 30$, и ядра $H_m^f(c, c_1)$ при

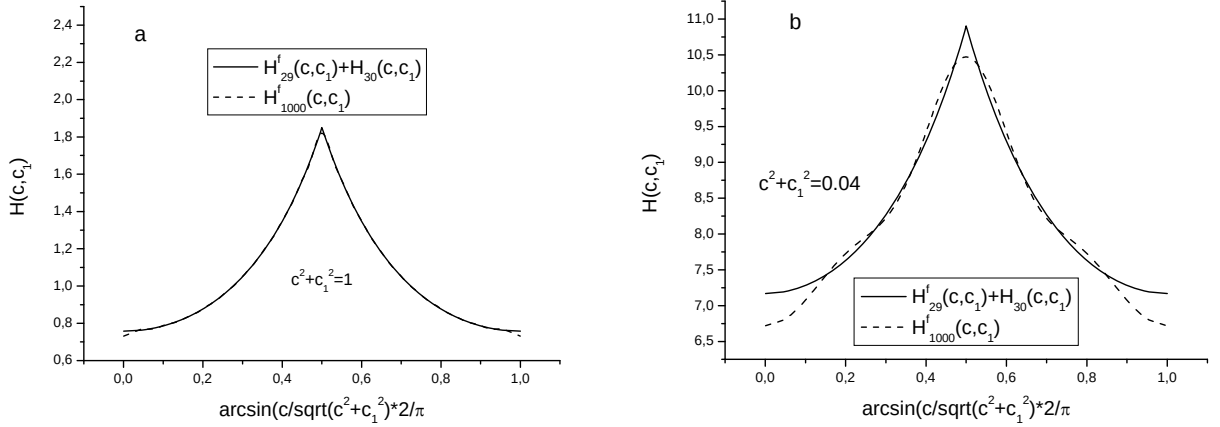


Рисунок 5.14 Сравнение ядра $H(c, c_1)$, рассчитанного по формуле $H(c, c_1) = H_{m-1}^f(c, c_1) + H_m(c, c_1)$ при $m = 30$, с конечной суммой $H_m^f(c, c_1)$ при $m = 1000$ в сечении $A = 1$ (а) и $A = 0.2$ (б).

$m = 1000$. Как следует из этих рисунков, сумма $H_{1000}^f(c, c_1)$ хорошо аппроксимирует предельную зависимость для $A = 1$ и весьма далека от предела при $A = 0.2$.

Отметим, что недавно в работе [50] были получены аналитические выражения для ядер линейного интеграла обратных столкновений в случае псевдомаксвелловских молекул. При $l = 0$ такое ядро имеет вид

$$L_0^{(+,1)}(c, c_1) = M(c) \sum_{n=0}^{\infty} \frac{S_{1/2}^n(c^2) S_{1/2}^n(c_1^2)}{\sigma_{n,0}(n+1)} = \frac{2\sqrt{\pi}}{c \cdot c_1} \exp(c_1^2) \cdot \begin{cases} \operatorname{erfc}(c) \operatorname{erf}(c_1) & c_1 < c \\ \operatorname{erfc}(c_1) \operatorname{erf}(c) & c_1 > c \end{cases} \quad (5.119)$$

Сравнение ядра, построенного с помощью оценки остатка ряда по формуле $H(c, c_1) = H_{m-1}^f(c, c_1) + H_m(c, c_1)$ при $m = 30$, с (5.119) демонстрирует полное совпадение результатов.

Таким образом, разработанный метод асимптотической оценки остатка ряда в выражении для ядра интеграла столкновений позволяет рассчитывать ядро с высокой точностью при использовании лишь нескольких десятков членов в формуле (5.79) и асимптотической оценки остатка ряда (5.119). При непосредственном суммировании для обеспечения той же точности необходимо использовать десятки тысяч членов ряда. Полученные результаты открывают перспективы использования асимптотического подхода для построения как ядер линейного интеграла столкновений по формуле (5.75), так и ядер нелинейного интеграла столкновений по формуле (4.37).

5.3 Построение ядра линейного интеграла столкновений для твердых шаров

В главе 4 и в предыдущем параграфе было показано, что ядра линейного и нелинейного интегралов столкновений могут быть представлены в виде рядов от произведений полиномов Сонина и МЭ. Преимуществом такого представления является возможность построения ядра для произвольного потенциала взаимодействия. Однако при непосредственном суммировании для некоторых значений аргументов оказывается необходимым учитывать очень большое число членов в сумме. В предыдущем параграфе на модельном примере максвелловских молекул был рассмотрен метод построения ядра линейного интеграла столкновений, основанный на использовании асимптотики матричных элементов и полиномов Сонина при больших индексах и переходе от суммирования по индексу к интегрированию. Такой подход позволил с высокой точностью рассчитывать ядро при сравнительно небольшом количестве численно найденных МЭ. В работе [117] метод асимптотической оценки остатка ряда был развит применительно к построению ядра линейного интеграла столкновений в модели твердых шаров. В этом случае сходимость ряда удастся контролировать путем сравнения с аналитическим выражением для ядра Гильберта-Гекке (4.74). В настоящем параграфе изложены основные результаты этой работы.

Мы будем рассматривать ядро линейного интеграла обратных столкновений первого рода для твердых шаров при $l = 0$. Заметим, что для псевдостепенных потенциалов имеет место равенство

$$\Lambda_{r,r_1,l}^{(+,1)} = \Lambda_{r,r_1,l}^{(+,2)} = \Lambda_{r,r_2,l}^{+} \quad (5.120)$$

В дальнейшем будем опускать индекс $l = 0$ в обозначениях для линейных матричных элементов интеграла обратных столкновений первого рода, т.е. будем писать

$$\Lambda_{r,r_1}^{+} = \Lambda_{r,r_1,0}^{+} = K_{r_1 0,00}^{+r0} \quad (5.121)$$

С учетом (5.75) ядро линейного интеграла обратных столкновений при $l = 0$ запишется

$$\begin{aligned} L_0^{(+1)}(c, c_1) &= M(c) \sum_{r=0}^{\infty} \sum_{r_1=0}^{\infty} S_{1/2}^r(c^2) \Lambda_{r,r_1}^{+} \frac{S_{1/2}^{r_1}(c_1^2)}{\sigma_{r_1 0}} = \\ &= B_1 \left(\frac{4kT_0}{m} \right)^{1/2} n_0^2 \frac{1}{\sqrt{2}} M(c) \sum_{r=0}^{\infty} \sum_{r_1=0}^{\infty} S_{1/2}^r(c^2) \bar{\Lambda}_{r,r_1}^{+} \frac{S_{1/2}^{r_1}(c_1^2)}{\sigma_{r_1 0}} \end{aligned} \quad (5.122)$$

Здесь $\bar{\Lambda}_{r,n} = K_{0,n}^r \sqrt{2} / \left(B_1 \left(\frac{4kT_0}{m} \right)^{1/2} n_0^2 \right)$ - безразмерные линейные МЭ. В случае модели

псевдомаксвелловских молекул линейные МЭ $\bar{\Lambda}_{r,r_1}^{+}$ отличны от нуля лишь на главной диагонали $r = r_1$, их асимптотика совпадает с их значением на диагонали $1/(r+1)$ и

вычисление ядра сводится к однократному суммированию. В случае твердых шаров линейные МЭ, не лежащие на главной диагонали, отличны от нуля. Обозначим расстояние от главной диагонали через Δ :

$$\Delta = r_1 - r. \quad (5.123)$$

Согласно результатам параграфа 5.1 (формула (5.26)), асимптотика МЭ при фиксированном значении Δ для модели твердых шаров имеет вид

$$\bar{\Lambda}_{r,r_1}^+ \propto 1/\sqrt{r}. \quad (5.124)$$

Сумма в (5.122) может рассчитываться по-разному. Одним из возможных способов вычисления такой суммы является расчет сумм по различным диагоналям с последующим суммированием результатов по Δ . При этом, в силу того, что МЭ достаточно быстро убывают при удалении от главной диагонали, можно было предположить, что основной вклад в сумму дают члены с небольшими значениями Δ , и остальными членами можно пренебречь. Асимптотика МЭ по r при фиксированном Δ (5.124) позволяет использовать развитый в предыдущем параграфе способ оценки «хвостов» рядов по r . Как показало сопоставление полученных результатов с расчетами ядра по (4.76), такой подход не обеспечивает необходимой точности. Во-первых, из-за более медленного асимптотического убывания МЭ, чем в случае псевдомаксвелловских молекул, сходимость при суммировании по r оказалась весьма медленной. Во-вторых, не удастся ограничиться суммированием по небольшому числу Δ . В результате исчезают преимущества предварительного суммирования по r . Необходимость учета больших Δ означает, что при больших r МЭ убывают с ростом Δ совсем не так быстро, как при малых. Следовательно, целесообразно поменять порядок суммирования, выполняя первым суммирование по Δ . При этом можно ввести обобщенный матричный элемент (ОМЭ)

$$\bar{\Lambda}_r^G(c_1) = \left(\sum_{r_1=0}^{\infty} \bar{\Lambda}_{r,r_1}^+ \frac{S_{1/2}^{r_1}(c_1^2)}{\sigma_{r_1}} \right) / \left(\frac{S_{1/2}^r(c_1^2)}{\sigma_r} \right), \quad (5.125)$$

где $\sigma_r = \sigma_{r,0} = \Gamma(r+3/2)/2\pi^{3/2}r!$. В (5.125) суммирование по r_1 распространяется по всем допустимым значениям и соответствует суммированию по Δ от $-r$ до ∞ . Такое определение обобщенного матричного элемента позволяет записать линейное ядро (5.122) в виде, формально совпадающем с формулой для ядра в случае максвелловских молекул

$$L^+(c, c_1) = M(c) \sum_{r=0}^{\infty} S_{1/2}^r(c^2) \cdot \bar{\Lambda}_r^G(c_1) S_{1/2}^r(c_1^2) / \sigma_r \quad (5.126)$$

Здесь опущен индекс 0 у ядра. Каждый ОМЭ, будучи зависимым от скорости c_1 , обращается в бесконечность в нулях полинома Сонина $S'_{1/2}(c_1^2)$. Однако, как видно из (5.126), эта особенность компенсируется при вычислении ядра.

Нетрудно показать, что при $c_1 = 0$ отношение $S'_{1/2}(c_1^2)/\sigma_r$ не зависит от r , и, следовательно, $\bar{\Lambda}_r^G(0) = \sum_{r_1} \bar{\Lambda}_{r,r_1}^+$. Было замечено, что диагональные МЭ интеграла обратных

r	A	B	C
10	0.39060	-0.33687	0.1379
100	0.12693	-0.12131	0.0442
150	0.10374	-0.09995	0.0361
200	0.08989	-0.08708	0.0313
250	0.08043	-0.07817	0.0280
300	0.07343	-0.07156	0.0256
350	0.06800	-0.06639	0.0237
390	0.06442	-0.06298	0.0224

Таблица 5.1. Положительная (A) и отрицательная (B) составляющие $\bar{\Lambda}_r^G(0)$ и отношение $C = \bar{\Lambda}_r^G(0)/\bar{\Lambda}_{r,r}^+ = (A + B)/A$

столкновений положительны, а недиагональные – отрицательны. Поэтому $\bar{\Lambda}_r^G(0)$ может быть представлен в виде суммы двух членов: $A = \bar{\Lambda}_{r,r}^+$ и $B = \sum_{r_1 \neq r} \bar{\Lambda}_{r,r_1}^+$. Были проведены расчеты величин A и B , результаты которых для нескольких значений r представлены в таблице 5.1. Из таблицы видно, что сумма недиагональных членов $|B|$ по абсолютной величине очень близка и немного меньше диагонального A . По мере увеличения r относительный вклад недиагональных членов растет. С ростом r для корректного расчета C необходимо учитывать все большее число членов в сумме по r_1 .

В результате расчетов выяснилось, что произведение $\bar{\Lambda}_r^G(0)r$ стремится к константе с ростом r , т.е. $\bar{\Lambda}_r^G(0)$ убывает гораздо быстрее, чем МЭ для твердых шаров при $\Delta = const$. Этот вывод подтверждается асимптотическим анализом поведения ОМЭ, проводимом ниже для произвольных c_1 . Для проведения этого анализа нам потребуется асимптотика МЭ и полиномов Сонина для расширяющейся области Δ .

В параграфе 5.1 была получена формула (5.19) для линейных МЭ при $l = 0$ в случае изотропного рассеяния. Эти МЭ являются суммой МЭ интегралов обратных и прямых столкновений (приходных и уходных частей). Для приходных линейных МЭ имеем

$$K_{0,n}^r = B_\gamma \left(\frac{4kT_0}{m} \right)^\mu \frac{r! n_0^2}{\Gamma(r+3/2) \cdot 2^{r+n+2}} \cdot \frac{\Gamma(\mu+1/2)\Gamma(r+n+2-\mu)}{\Gamma(-\mu)(n+1)!(r+1)!} \times \\ \times \left[\frac{((- \mu - n - r)/2 - 1)_{R+1}((\mu - n - r)/2 + R_1 + 1/2)_{R+1}}{((\mu - 1 - n - r)/2)_{R+1}((- \mu - n - r)/2 + R_1)_{R+1}} - 1 \right] \quad (5.127)$$

Из этой формулы легко получить выражение для безразмерных приходных линейных МЭ в случае твердых шаров ($\mu = 1/2$)

$$\bar{\Lambda}_{r,r+\Delta}^+ = -\frac{1}{\pi} \frac{1}{\Delta^2 - 1/4} \frac{\Gamma(r+\Delta/2+3/4)\Gamma(r+\Delta/2+5/4)}{\Gamma(r+3/2) \cdot \Gamma(r+\Delta+1)} \quad (5.128)$$

Напомним, что $K_{0,n}^r = B_1 \left(\frac{4kT_0}{m} \right)^{1/2} \frac{n_0^2}{\sqrt{2}} \bar{\Lambda}_{r,n}$. В параграфе 5.1 была получена асимптотика МЭ для $r \rightarrow \infty$ только при $\Delta = const$. Для вычисления ОМЭ требуется асимптотика МЭ при больших значениях r , вообще говоря, при произвольных соотношениях между Δ и r . Поэтому для получения асимптотического разложения $\bar{\Lambda}_{r,r+\Delta}^+$ необходимо заново рассмотреть отношение Γ -функций. Воспользуемся формулой Стирлинга

$$\Gamma(z) = \sqrt{\frac{2\pi}{z}} \cdot \exp(-z) \cdot z^z \cdot H(z), \quad H(z) = 1 + \frac{1}{12z} + \frac{1}{288z^2} + O(z^{-3}) \quad (5.129)$$

Отношение гамма-функций тогда запишется

$$\frac{\Gamma(z+\alpha)}{\Gamma(z+\beta)} = z^{\alpha-\beta} \frac{H(z+\alpha)}{H(z+\beta)} \cdot \exp(F(z, \alpha, \beta)), \quad (5.130)$$

где

$$F(z, \alpha, \beta) = -(\alpha - \beta) + (z - 1/2) \cdot [\ln(1 + \alpha/z) - \ln(1 + \beta/z)] + \\ + [\alpha \cdot \ln(1 + \alpha/z) - \beta \cdot \ln(1 + \beta/z)] \quad (5.131)$$

Как видно из (5.128), параметры z , α и β при расчете асимптотики МЭ принимают значения $z = r + 1$, $\alpha = \Delta/2 - 1/4$, $\beta = 1/2$ и $\alpha = \Delta/2 + 1/4$, $\beta = \Delta$. В Приложении В показано, что вклад в ОМЭ от членов суммы (5.125) с $|\Delta| > r^{1/2+\varepsilon}$, где ε - произвольное малое положительное число, экспоненциально убывает с ростом r . Поэтому при дальнейшем рассмотрении асимптотики линейных МЭ ограничимся интервалом $|\Delta| \leq O(r^{1/2+\varepsilon})$.

Поскольку отношения α/z , β/z малы, логарифмы в (5.131) могут быть разложены в ряд по степеням α/z , β/z . Для функции $F(z, \alpha, \beta)$ это дает

$$F(z, \alpha, \beta) = -(\alpha - \beta) + \sum_{k=1}^{\infty} (-1)^{k+1} \frac{z^{-1/2}}{kz^k} (\alpha^k - \beta^k) + \sum_{k=1}^{\infty} (-1)^{k+1} \frac{1}{kz^k} (\alpha^{k+1} - \beta^{k+1}) \quad (5.132)$$

Выделим в $F(z, \alpha, \beta)$ часть, убывающую с ростом r , т.е. представим $F(z, \alpha, \beta)$ в виде

$$F(z, \alpha, \beta) = F_0(z, \alpha, \beta) + F_1(z, \alpha, \beta), \quad (5.133)$$

где $F_1(z, \alpha, \beta)/z = o(1)$ при $r \rightarrow \infty$.

В дальнейшем будем считать, что $\varepsilon \in (0, 1/6)$. Проанализировав (5.132) при $\Delta = O(r^{1/2+\varepsilon})$, легко найти

$$F_0(z, \alpha, \beta) = \frac{\alpha^2 - \beta^2}{2z},$$

$$F_1(z, \alpha, \beta) = \sum_{k=1}^{\infty} (-1)^k \left[\frac{1}{z^{k+1}} \frac{(\alpha^{k+2} - \beta^{k+2})}{(k+1)(k+2)} + \frac{(\alpha^k - \beta^k)}{2kz^k} \right] \quad (5.134)$$

Разложив $\exp(F_1(z, \alpha, \beta))$ в ряд по F_1 , а отношение $H(z + \alpha)/H(z + \beta)$ в ряд по α/z , β/z и подставив полученные разложения в (5.130), а затем в (5.128), получим

$$\bar{\Lambda}_{r, r+\Delta}^+ = -\frac{1}{\pi} \frac{1}{\Delta^2 - 1/4} \frac{1}{\sqrt{r+1}} \exp \left(-\frac{\Delta^2}{4(r+1)} - \frac{1}{16(r+1)} \right) \left(1 + \frac{\Delta^3}{8(r+1)^2} + \frac{B(\Delta, r)}{(r+1)^4} (1 + o(1)) \right)$$

$$B(\Delta, r) = \frac{\Delta^6}{128} - \frac{7\Delta^4(r+1)}{96} - \frac{\Delta^2(r+1)^2}{8} + \frac{(r+1)^3}{4} \quad (5.135)$$

Формула (5.135) представляет собой искомую асимптотику матричного элемента $\Lambda_{r, r+\Delta}^+$ на интервале $|\Delta| \leq O(r^{1/2+\varepsilon})$ при $r \rightarrow \infty$.

Отметим, что использование описанной выше процедуры для $\Delta = \text{const}$ дает

$$F_0(z, \alpha, \beta) = 0$$

$$F_1(z, \alpha, \beta) = \sum_{k=1}^{\infty} (-1)^k \frac{1}{kz^k} \left[\frac{(\alpha^{k+1} - \beta^{k+1})}{(k+1)} - \frac{1}{2} (\alpha^k - \beta^k) \right], \quad (5.136)$$

а разложение в ряд $\exp(F_1(z, \alpha, \beta))$ приводит к той же асимптотике, что и в параграфе 5.1,

$$\bar{\Lambda}_{r, r+\Delta}^+ = -\frac{1}{\pi} \frac{1}{\Delta^2 - 1/4} \frac{1}{\sqrt{r+1}} \left(1 - \frac{\Delta^2 - 3/4}{4(r+1)} + O(\Delta^4/r^2) \right). \quad (5.137)$$

Тот же результат можно получить непосредственно разложением в ряд экспоненты в выражении (5.135).

При вычислении ОМЭ по (5.125) при больших индексах r не только МЭ $\bar{\Lambda}_{r,r+\Delta}^+$, но и величина $S_{1/2}^{r+\Delta}(x)/\sigma_{r+\Delta}$ должны быть представлены в виде асимптотического разложения на интервале $|\Delta| \leq O(r^{1/2+\varepsilon})$. Асимптотические разложения для полиномов Сонина и величин $S_{1/2}^r(x)/\sigma_r$ при больших r и фиксированных x были получены в предыдущем параграфе:

$$S_{1/2}^r(x)/\sigma_r = 2\pi \exp(x/2) \left(\frac{1}{\sqrt{(r+3/4)x}} \sin(2\sqrt{(r+3/4)x}) - \frac{x}{12(r+3/4)} \cos(2\sqrt{(r+3/4)x}) \right) + O(r^{-3/2}) \quad (5.138)$$

Асимптотику $S_{1/2}^{r+\Delta}(x)/\sigma_{r+\Delta}$ в той же области легко получить, разложив амплитуды и аргументы тригонометрических функций в (5.138) по малому параметру $\Delta/(r+3/4)$ и пользуясь формулами для синуса и косинуса от суммы аргументов

$$\begin{aligned} \frac{S_{1/2}^{r+\Delta}(x)}{\sigma_{r+\Delta}} = 2\pi \exp\left(\frac{x}{2}\right) \frac{\sin(2\sqrt{Nx})}{\sqrt{Nx}} & \left\{ \left[1 - \frac{\Delta}{2N} - \operatorname{ctg}(2\sqrt{Nx}) \frac{\Delta^2 \sqrt{x}}{4N^{3/2}} \right] \cos\left(\frac{\Delta \sqrt{x}}{\sqrt{N}}\right) + \right. \\ & \left[\frac{\Delta^2 \sqrt{x}}{4N^{3/2}} + \operatorname{ctg}(2\sqrt{Nx}) \left(1 - \frac{\Delta}{2N}\right) \right] \sin\left(\frac{\Delta \sqrt{x}}{\sqrt{N}}\right) - \frac{x^{3/2}}{12\sqrt{N}} \left[\operatorname{ctg}(2\sqrt{Nx}) \cos\left(\frac{\Delta \sqrt{x}}{\sqrt{N}}\right) - \sin\left(\frac{\Delta \sqrt{x}}{\sqrt{N}}\right) \right] + \\ & \left. + o(r^{-1/2}) \right\} \quad (5.139) \end{aligned}$$

где $N = r + 3/4$.

Рассмотрим отдельный член суммы в выражении (5.125) для обобщенного матричного элемента. Он имеет вид $(S_{1/2}^{r+\Delta}(x) \bar{\Lambda}_{r,r+\Delta})/\sigma_{r+\Delta}$, и асимптотическое выражение для него может быть получено перемножением (5.135) и (5.139). Однако очевидно, что при суммировании по симметричному интервалу изменения Δ слагаемые, нечетные по Δ , сокращаются и не дают вклада в сумму. Поэтому их можно не рассматривать уже в исходном выражении.

Введем значение $s_{r,\Delta}(x)$, четное по Δ

$$s_{r,\Delta}(x) = \frac{1}{2} \left(\frac{S_{1/2}^{r+\Delta}(x) \cdot \bar{\Lambda}_{r,r+\Delta}}{\sigma_{r+\Delta}} + \frac{S_{1/2}^{r-\Delta}(x) \cdot \bar{\Lambda}_{r,r-\Delta}}{\sigma_{r-\Delta}} \right) \frac{\sigma_r}{S_{1/2}^r(x)}. \quad (5.140)$$

Подставив в (5.140) асимптотические разложения (5.135) и (5.139), найдем

$$\begin{aligned} s_{r,\Delta}(x) = & -\frac{1}{\pi \sqrt{N}} \cdot \frac{1}{\Delta^2 - 1/4} \exp\left(-\frac{\Delta^2}{4N}\right) \times \\ & \times \left\{ \cos\left(\frac{\Delta \sqrt{x}}{\sqrt{N}}\right) + A(\sqrt{x}, N) \left[\sin\left(\frac{\Delta \sqrt{x}}{\sqrt{N}}\right) \left(\frac{\Delta^3}{8N^2} - \frac{\Delta}{2N} \right) - \cos\left(\frac{\Delta \sqrt{x}}{\sqrt{N}}\right) \frac{\Delta^2 \sqrt{x}}{4N^{3/2}} \right] \right\} (1 + O(r^{-1})) \quad (5.141) \end{aligned}$$

где

$$A(t, N) = \frac{\cos(2t\sqrt{N})}{\sin(2t\sqrt{N}) - t^3 \cos(2t\sqrt{N})/12\sqrt{N}} \quad (5.142)$$

Можно показать (см. Приложение В), что вклад в сумму (5.125) при $|\Delta| > M_2$, где $M_2 = N^{1/2+\varepsilon}$, является экспоненциально малым. Вычисление вклада от оставшегося интервала можно было бы провести с помощью формулы Эйлера-Маклорена [116], сводящей вычисление суммы к вычислению интеграла. Однако подынтегральная функция (5.141) имеет особенность при $\Delta = 1/2$, поэтому замена суммирования интегрированием на всем интервале $[-M_2, M_2]$ оказывается невозможной. В связи с этим разобьем интервал суммирования по Δ в (5.125) на области $[-r, -M_2 - 1]$, $[-M_2, -M_1 - 1]$, $[-M_1, M_1]$, $[M_1 + 1, M_2]$, $[M_2 + 1, \infty)$. Здесь $M_1 = N^{1/2-\varepsilon}$ выбирается так, чтобы аргументы тригонометрических функций в (5.141) имели порядок $o(1)$ и $s_{r,\Delta}(x)$ раскладывалась в ряд по степеням $\Delta/\sqrt{N}$. При этом конечные суммы от каждого члена ряда могут быть аналитически вычислены. Вклады от интервалов $[-r, -M_2 - 1]$, $[M_2 + 1, \infty)$ пренебрежимо малы. Вклад в ОМЭ от интервалов $[-M_2, -M_1 - 1]$ и $[M_1 + 1, M_2]$, который оказывается единственно значимым, оценим с помощью формулы Эйлера-Маклорена

$$\begin{aligned} \sum_{\Delta=M_1+1}^{M_2} z_{\Delta} = & \frac{1}{2}(h(M_1+1) - h(M_2)) + \int_{M_1+1}^{M_2} h(t)dt + \sum_{s=1}^{k-1} (-1)^s \omega_{s+1}(0)(h^{(s)}(M_1+1) - h^{(s)}(M_2)) + \\ & + (-1)^{k+1} \int_{M_1+1}^{M_2} \omega_k(t) h^{(k)}(t) dt \end{aligned} \quad (5.143)$$

Здесь $h(t)$ – гладкая функция, такая что $h(\Delta) = z_{\Delta}$ при целых значениях Δ ,

$$\omega_1(x) = x - [x] - \frac{1}{2}, \quad \omega_s(x) = \int \omega_{s-1}(x) dx, \quad \int_0^1 \omega_s(x) dx = 0.$$

В силу четности по Δ функции $s_{r,\Delta}(x)$, вклады в ОМЭ от интервалов $[-M_2, -M_1 - 1]$ и $[M_1 + 1, M_2]$ равны и могут быть вычислены с помощью (5.143). Можно показать, что все члены, кроме первых двух в (5.143), для рассматриваемого случая оказываются величинами порядка $o(r^{-3/2})$, и вклад в ОМЭ от интервала $[M_1 + 1, M_2]$ есть

$$\sum_{\Delta=M_1+1}^{M_2} s_{r,\Delta} = \frac{1}{2}(s_{r,M_1+1} - s_{r,M_2}) + \int_{M_1+1}^{M_2} h(t)dt + O(1/r^{3/2}). \quad (5.144)$$

Для вычисления интеграла, входящего в (5.144), перейдем к новой переменной $u = t/\sqrt{N}$. При этом интеграл от первого слагаемого (главного члена) в (5.141) приобретает вид

$$I_1 = -\frac{1}{\pi N} \int_{(M_1+1)/\sqrt{N}}^{M_2/\sqrt{N}} \frac{1}{u^2} \exp(-u^2/4) \cos(u\sqrt{x}) du = -\frac{1}{\pi N} J_1, \quad (5.145)$$

а интеграл от второго слагаемого (поправки первого порядка) записывается как

$$I_2 = -\frac{A(\sqrt{x}, N)}{\pi N} \int_{(M_1+1)/\sqrt{N}}^{M_2/\sqrt{N}} \frac{1}{u^2} \exp(-u^2/4) \left[\sin\left(\frac{t\sqrt{x}}{\sqrt{N}}\right) \left(\frac{t^3}{8N^2} - \frac{t}{2N} \right) - \cos\left(\frac{t\sqrt{x}}{\sqrt{N}}\right) \frac{t^2\sqrt{x}}{4N^{3/2}} \right] du. \quad (5.146)$$

Заметим, что верхний предел $u_2 = M_2/\sqrt{N}$ интегралов (5.145), (5.146) есть величина порядка $O(r^\varepsilon)$, и, следовательно, стремится к бесконечности при $r \rightarrow \infty$, в то время как нижний предел $u_1 = (M_1+1)/\sqrt{N} = O(r^{-\varepsilon}) \rightarrow 0$.

Вычисления показывают, что вклад в асимптотику ОМЭ области $-M_1 \leq \Delta \leq M_1$ компенсируется значением интегралов (5.145), (5.146) на нижнем пределе и внеинтегральным членом $s_{r, M_1+1}/2$ в (5.144). Значения интегралов (5.145), (5.146) отличаются от их значений при интегрировании до бесконечности на величину, экспоненциально убывающую с ростом r . Внеинтегральный член $s_{r, M_2}/2$ в (5.144) также экспоненциально убывает с ростом r . Таким образом, выбор величины ε не влияет на результат. Более подробно вычисление вклада в ОМЭ суммы $\sum_{\Delta=-M_2}^{M_2} s_{r, \Delta}(x)$ рассмотрено в Приложении С.

Для завершения вычисления ОМЭ необходимо оценить еще суммы

$$\frac{\sigma_r}{s_{1/2}^r(x)} \sum_{\Delta=M_2+1}^{\infty} \frac{S_{1/2}^{r+\Delta}(x) \cdot \bar{\Lambda}_{r, r+\Delta}}{\sigma_{r+\Delta}}, \quad \frac{\sigma_r}{s_{1/2}^r(x)} \sum_{\Delta=-r}^{-M_2-1} \frac{S_{1/2}^{r+\Delta}(x) \cdot \bar{\Lambda}_{r, r+\Delta}}{\sigma_{r+\Delta}}.$$

Можно показать, что и эти суммы также экспоненциально убывают с ростом индекса r (см. Приложение С). Окончательно асимптотика ОМЭ имеет вид

$$\bar{\Lambda}_r^G(c_1) = \frac{1}{(r+3/4)} F(c_1) + A(c_1, r+3/4) \frac{1}{2(r+3/4)^{3/2}} \Phi(c_1) + o(r^{-3/2}) \quad (5.147)$$

где

$$F(c_1) = \left(c_1 \Phi(c_1) + \frac{\exp(-c_1^2)}{\sqrt{\pi}} \right) \quad (5.148)$$

Еще раз отметим, что вид асимптотики ОМЭ определяется найденным нами в области $[M_1, M_2]$ асимптотическим разложением МЭ (5.135). Именно интегрирование асимптотики (5.141), полученной на основе этого разложения, приводит к формуле (5.147). При этом главный член в (5.147) определяется интегралом (5.145), а следующий член – интегралом (5.146).

Из (5.147) видно, что в отличие от МЭ, убывающего как $1/\sqrt{r}$ при $r \rightarrow \infty$ и фиксированном значении Δ , обобщенный матричный элемент убывает как $1/r$ при любом c_1 . Такое поведение совпадает с закономерностью, найденной выше при численном исследовании ОМЭ для $c_1 = 0$ (см. таблицу 5.1).

Для оценки области применимости (5.147) нами было проведено сравнение значений $\bar{\Lambda}_r^G(c_1)$, рассчитанных численно по формуле (5.125), с полученным асимптотическим разложением. Результаты сравнения численно найденных $\bar{\Lambda}_r^G(c_1)$ с их асимптотикой в нулевом и первом приближении приведены на рисунке 5.15.

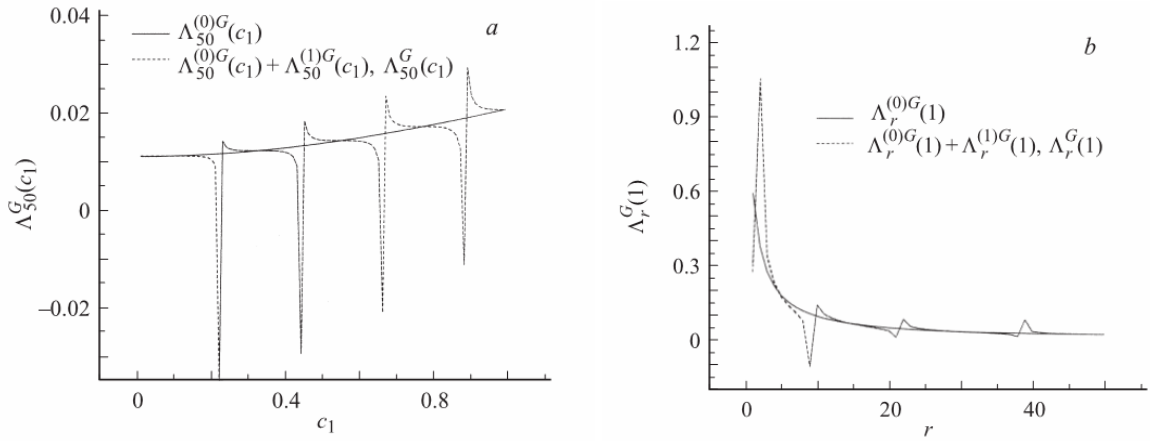


Рисунок 5.15 Сравнение численно рассчитанных ОМЭ с асимптотикой в нулевом и первом приближении: в зависимости от c_1 при $r = 50$ (a) и в зависимости от r при $c_1 = 1$ (b).

Оказалось, что асимптотика в первом приближении

$$\bar{\Lambda}_r^{(1)G}(c_1) = A(c_1, r + 3/4) \frac{1}{2(r + 3/4)^{3/2}} \Phi(c_1) \quad (5.149)$$

в точности совпадает с численно найденными ОМЭ везде, за исключением окрестностей нулей знаменателя в выражении для $A(c_1, N)$, и неотличима от них на графике.

Асимптотика в нулевом приближении

$$\bar{\Lambda}_r^{(0)G}(c_1) = \frac{1}{(r + 3/4)} F(c_1) \quad (5.150)$$

точно передает общее поведение $\bar{\Lambda}_r^G(c_1)$.

Таким образом, проведенное исследование асимптотики ОМЭ привело к удивительному результату: во-первых, зависимость от r при любом c_1 совпадает с зависимостью от r МЭ для максвелловских молекул, и, во-вторых, в качестве зависящего от

c_1 коэффициента выделяется довольно простая функция (5.148), отличающаяся от $k(c_1)$ (4.70) только слагаемым $\Phi(c_1)/2c_1$.

Расчет ядра с использованием ОМЭ

Применим найденную асимптотику ОМЭ к расчету ядра интеграла столкновений. Ряд (5.126) разбивается на конечную сумму, которая вычисляется непосредственно, и остаток. При больших значениях индекса r остаток заменяется асимптотической оценкой. Поскольку асимптотическое поведение ОМЭ совпадает с асимптотикой МЭ в случае псевдомаксвелловских молекул, многие выкладки совпадают с выкладками из предыдущего параграфа. Воспользовавшись формулой Эйлера-Маклорена (5.143), получим

$$(M(c))^{-1} L^+(c, c_1) = B_m^f(c, c_1) + B_m^0(c, c_1) + B_m^1(c, c_1) + o(B_m^1(c, c_1)). \quad (5.151)$$

Здесь

$$B_m^f(c, c_1) = \sum_{r=0}^{m-1} S_{1/2}^r(c^2) \overline{\Lambda}_r^G(c_1) S_{1/2}^r(c_1^2) / \sigma_r, \quad B_m^0(c, c_1) = \int_m^\infty a^0(c, c_1; r) dr, \\ B_m^1(c, c_1) = \int_m^\infty a^1(c, c_1; r) dr + \frac{1}{2} a^0(c, c_1; m), \quad (5.152)$$

$a^0(c, c_1; r)$, $a^1(c, c_1; r)$ - соответственно нулевой и первый члены асимптотического разложения $S_{1/2}^r(c^2) \overline{\Lambda}_r^G(c_1) S_{1/2}^r(c_1^2) / \sigma_r$ при больших индексах r , полученные с помощью (5.138), (5.147):

$$S_{1/2}^r(c^2) \overline{\Lambda}_r^G(c_1) S_{1/2}^r(c_1^2) / \sigma_r = a^0(c, c_1; r) + a^1(c, c_1; r) + o(a^1(c, c_1; r)), \\ a^0(c, c_1; r) = \frac{1}{(r+3/4)^{3/2}} [d^-(r) - d^+(r)] F(c_1), \quad (5.153)$$

$$a^1(c, c_1; r) = \frac{E(c, c_1)}{(r+3/4)^2} \left\{ [h^-(r) - h^+(r)] F(c_1) + [g^-(r) - g^+(r)] \frac{\Phi(c_1)}{2} \right\}, \quad (5.154)$$

где

$$E(c, c_1) = \sqrt{\pi} \frac{\exp((c^2 + c_1^2)/2)}{c_1 c}, \\ d^\pm(r) = \cos(2(c \pm c_1) \sqrt{r+3/4}), \quad g^\pm(r) = \sin(2(c \pm c_1) \sqrt{r+3/4}), \\ h^\pm(r) = \frac{c^3 \pm c_1^3}{12} g^\pm(r).$$

Можно показать, что величины $a^0(c, c_1; r)$, $a^1(c, c_1; r)$ имеют порядки соответственно $O(1/r^{3/2})$, $O(1/r^2)$ при $c \neq 0$, $c_1 \neq 0$ и $O(1/r)$, $O(1/r^{3/2})$ при $c = 0$ или $c_1 = 0$. Проинтегрировав (5.153), (5.154) и введя обозначения

$$\begin{aligned}
D^{\pm}(m) &= \frac{2 \cos(2(c \pm c_1) \sqrt{m+3/4})}{\sqrt{m+3/4}} + 4(c \pm c_1) si(2(c \pm c_1) \sqrt{m+3/4}), \\
G^{\pm}(m) &= \frac{\sin(2(c \pm c_1) \sqrt{m+3/4})}{m+3/4} + \frac{2(c \pm c_1) \cos(2(c \pm c_1) \sqrt{m+3/4})}{\sqrt{m+3/4}} + \\
&\quad + 4(c \pm c_1)^2 si(2(c \pm c_1) \sqrt{m+3/4}), \\
H^{\pm}(m) &= \frac{c^3 \pm c_1^3}{12} G^{\pm}(m),
\end{aligned}$$

где si - интегральный синус [73], выпишем окончательный результат для остатка суммы ряда (5.126):

$$\begin{aligned}
B_m^0(c, c_1) &= E(c, c_1) [D^-(m) - D^+(m)] F(c_1), \\
B_m^1(c, c_1) &= E(c, c_1) \left\{ [H^-(m) - H^+(m)] F(c_1) + [G^-(m) - G^+(m)] \frac{\Phi(c_1)}{2} \right\}. \quad (5.155)
\end{aligned}$$

Сравнивая полученный результат с результатом предыдущего параграфа, можно заметить, что главные члены первых слагаемых $B_m^0(c, c_1)$ в (5.155) и $H_m^0(c, c_1)$ в (5.102) отличаются только множителем $F(c_1)$. В следующем члене разложения (5.155), $B_m^1(c, c_1)$, в первом слагаемом появляется тот же множитель и добавляется второе слагаемое, которое возникает в результате перемножения первого члена асимптотики ОМЭ и главного члена асимптотики полиномов Сонина.

Проведенные оценки показывают, что нулевой и первый члены асимптотики $B_m^0(c, c_1)$, $B_m^1(c, c_1)$ остатка ряда $\sum_{r=m}^{\infty} S_{1/2}^r(c^2) \cdot \bar{\Lambda}_r^G(c_1) S_{1/2}^r(c_1^2) / \sigma_r$ имеют порядки соответственно $O(1/m)$, $O(1/m^{3/2})$ при $c \neq 0$, $c_1 \neq 0$ и $O(1/\sqrt{m})$, $O(1/m)$ при $c = 0$ или $c_1 = 0$.

Аналитическое выражение (4.74) для ядра $L^+(c, c_1)$ позволяет оценить сходимость описанной выше процедуры. На рисунке 5.16 сравниваются результаты расчета ядра с помощью конечных сумм $B_m^f(c, c_1)$ и с использованием формулы (4.74). Рассматривались аргументы, связанные соотношением $\sqrt{c^2 + c_1^2} = A$, при различных значениях параметра A . Видно, что конечные суммы наиболее медленно сходятся к точному значению ядра в окрестности точек $c = 0$ или $c_1 = 0$ и $c = c_1$. Переход от $A = 1$ к $A = 0.2$ существенно ухудшает сходимость, и аналитическое ядро плохо аппроксимируется суммой даже при $m = 1000$. Поведение конечных сумм с ростом числа слагаемых более детально прослежено на рисунке 5.17. При $A = 1$ в точке $c = 0$ значение суммы осциллирует и имеет амплитуду приблизительно 3% при $m = 1000$, а в точке $c = c_1$ монотонно приближается к значению $(M(c))^{-1} L^+(c, c_1)$, отличаясь

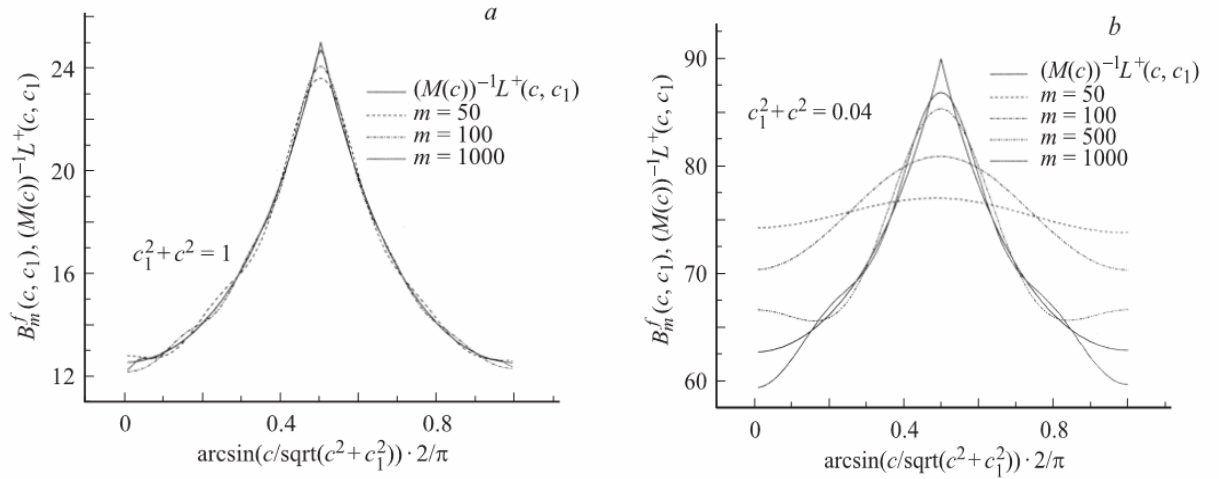


Рисунок 5.16 Ядро, рассчитанное с помощью конечного числа членов суммы (5.126), $B_m^f(c, c_1)$, при различных значениях m в сечениях $A = \sqrt{c^2 + c_1^2} = 1$ (a), $A = 0.2$ (b) и ядро Гекке (4.74), умноженное на $(M(c))^{-1}$.

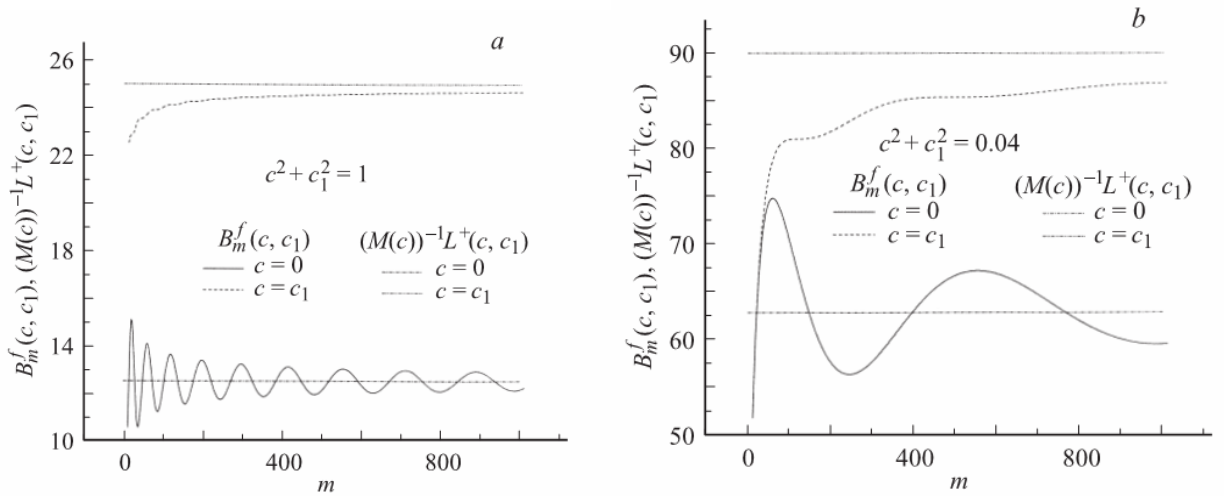


Рисунок 5.17 Зависимость суммы $B_m^f(c, c_1)$ от числа членов в сумме m в точках $c = c_1$, $c = 0$ при $A = 1$ (a) и $A = 0.2$ (b.)

от него при $m = 1000$ на 1.2%. При $A = 0.2$ и $m = 1000$ эти отличия составляют 5.6 и 3.5% соответственно. Расчеты показали, что при учете асимптотического остатка ряда $B_m^0(c, c_1) + B_m^1(c, c_1)$ даже при $A = 0.2$ погрешность практически исчезает при $m \approx 30$. В увеличенном масштабе выход ядер на точные значения с учетом одного и двух членов асимптотики продемонстрирован на рисунке 5.18. Видно, что быстрое уменьшение погрешности с ростом m происходит уже при учете нулевого члена асимптотики.

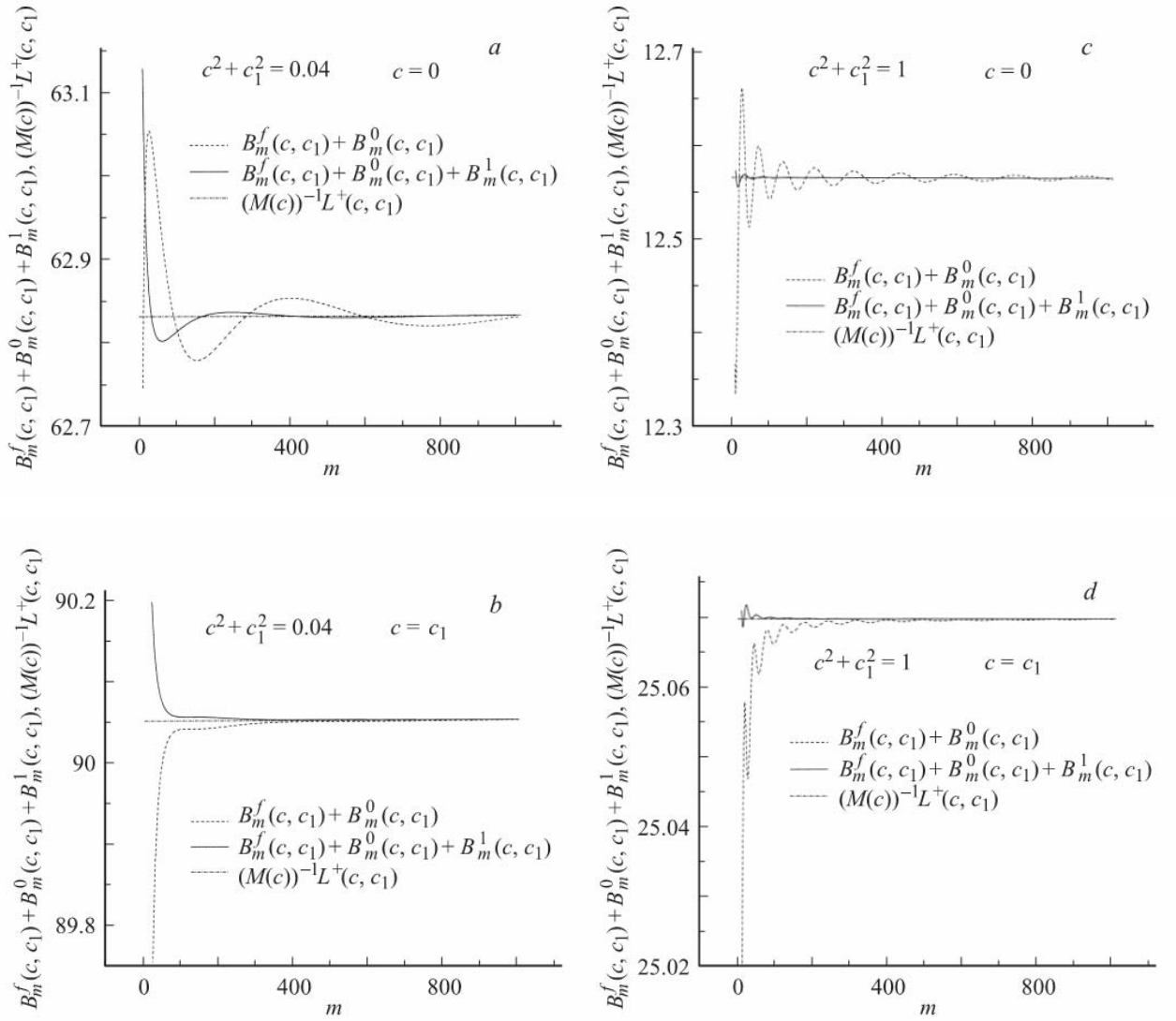


Рисунок 5.18 Зависимость значения ядра $B_m^f(c, c_1) + B_m^0(c, c_1)$, $B_m^f(c, c_1) + B_m^0(c, c_1) + B_m^1(c, c_1)$ от числа членов в конечной сумме в точках $c = 0$, $c = c_1$ при $A = 0.2$ (a, b), $A = 1$ (c, d).

Добавление первого члена асимптотики уменьшает погрешность в некоторых случаях еще примерно на порядок. Для $A = 0.2$, $c = 0$ это видно из рисунка 5.18a. Здесь расчет ядра с помощью (5.151) при $m > 30$ приводит к ошибке менее 0.05%. В точке $c = c_1$ (рисунок 5.18b) общая ошибка не превышает 0.1% при $m > 30$ и 0.02% при $m > 60$. Для $A = 1$ при $m > 30$ ошибка не превышает 0.025% для $c = 0$ и 0.01% для $c = c_1$. На рисунке 5.19 приведены относительные ошибки аппроксимации $(M(c))^{-1}L^+(c, c_1)$ зависимостями, рассчитанными по формуле (5.151) при $m = 30$, $A = 0.2$ и $A = 1$. Величина относительных ошибок не превосходит 0.025% для $A = 1$ и 0.08% для $A = 0.2$. Для больших значений параметра A приходится увеличивать число членов в конечной сумме, однако даже при $A = 4$ ошибка

аппроксимации, отнесенная к значению ядра в максимуме, при $m = 100$ не превосходит 0.003.

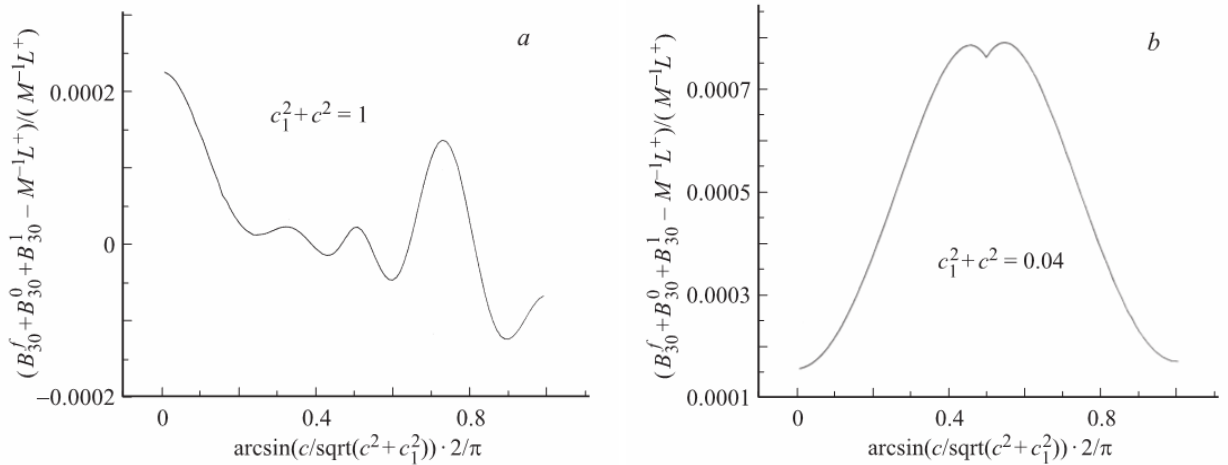


Рисунок 5.19 Относительная ошибка аппроксимации ядра Гекке, рассчитанного по формуле (4.74) (умноженного на $(M(c))^{-1}$) ядром $B_m^f(c, c_1) + B_m^0(c, c_1) + B_m^1(c, c_1)$ при $m = 30$ в сечениях $A = 1$ (a) и $A = 0.2$ (b).

На рисунке 5.20 приведена зависимость ядра от $\arcsin(c/\sqrt{c^2 + c_1^2})2/\pi$, рассчитанная по (5.151) при $A = 4$, $m = 100$. Она полностью совпадает с зависимостью, даваемой аналитическим выражением (4.74).

Таким образом, продемонстрирована высокая точность расчета ядра линейного интеграла столкновений уравнения Больцмана с использованием его разложения по матричным элементам и добавлением аналитических формул, учитывающих поведение остатка ряда.

В заключение отметим, что введение понятия обобщенных матричных элементов позволило преодолеть трудности, связанные с расчетом двойной суммы, входящей в выражение для ядра интеграла столкновений. Существенно, что асимптотическое поведение ОМЭ при больших значениях r оказалось идентичным поведению МЭ в случае псевдомаксвелловских молекул, т.е. обратно пропорционально r . Использование формулы Эйлера-Маклорена для вычисления «хвоста» ряда в выражении для ядра (5.126) позволило вычислить ядро с высокой точностью и добиться совпадения с известной аналитической формулой (5.74), полученной Гекке в [41], при суммировании сравнительно небольшого количества численно найденных ОМЭ. В большинстве случаев это количество не превышает 30. Предложенный метод представляется перспективным для расчета ядра интеграла столкновений и в случае других потенциалов взаимодействий. Более того, аналогичный подход может быть использован и для расчета ядер нелинейного интеграла столкновений.

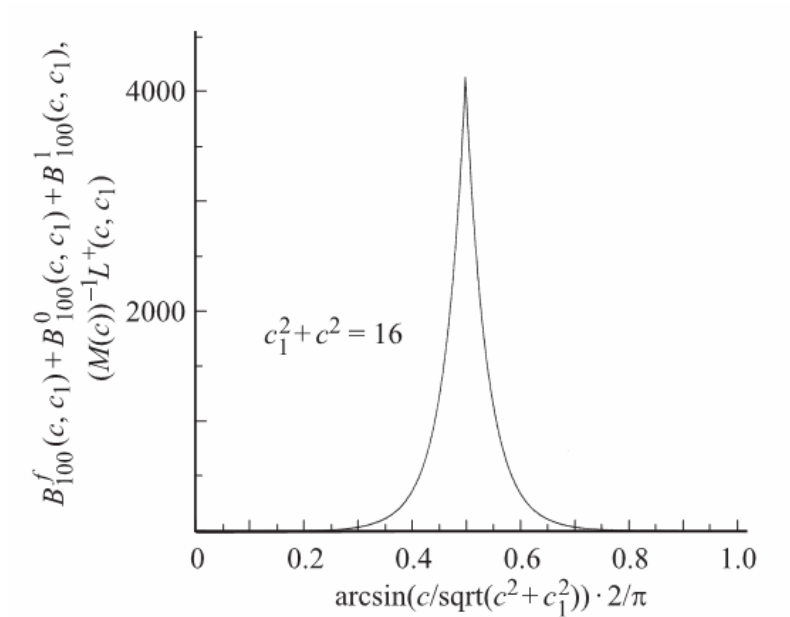


Рисунок 5.20 Ядро Гекке (4.74), умноженное на $(M(c))^{-1}$, и его аппроксимация $B_m^f(c, c_1) + B_m^0(c, c_1) + B_m^1(c, c_1)$ при $A = 4$, $m = 100$ (на графике совпадают).

Использование метода [49, 111] позволяет рассчитывать нелинейные МЭ со столь же большими индексами, что и линейные ($r = 130$ и более). С помощью формул (4.37) по этим МЭ могут строиться ядра нелинейного интеграла столкновений. Следует отметить, что формулы для расчета ядер линейного интеграла столкновений при некоторых моделях взаимодействия предлагались и ранее в работах [118, 119]. Однако никаких результатов по расчету ядер нелинейного интеграла столкновений в литературе нет.

Глава 6.

Общие свойства ядер нелинейного интеграла столкновений уравнения Больцмана и их построение

6.1 Некоторые общие свойства ядер нелинейного интеграла столкновений

В этом параграфе мы более подробно рассмотрим ядро интеграла столкновений и установим некоторые его общие свойства. Впервые ядро линеаризованного интеграла столкновений для модели твердых шаров было построено Гильбертом [34]. В [41] получено разложение этого ядра по сферическим гармоникам, или, точнее, найдены ядра для системы интегро - дифференциальных уравнений при разложении ФР по сферическим гармоникам. В дальнейшем эти результаты были переоткрыты в [120]. Понятие ядра интеграла столкновений может быть введено при рассмотрении нелинейного интеграла столкновений с произвольным потенциалом взаимодействия. Более того, по заданным МЭ можно строить ядра разложения интеграла столкновений по сферическим гармоникам [110], [115], [117]. Мы начнем с определения аналитического выражения для ядра нелинейного интеграла столкновений.

Аналитическое выражение для ядра нелинейного интеграла столкновений

Нелинейный интеграл столкновений уравнения Больцмана представляется в виде (4.3). В ряде случаев он может быть представлен в виде разности интегралов обратных ($\hat{I}^+(f, f)$) и прямых ($\hat{I}^-(f, f)$) столкновений. При этом

$$\begin{aligned}\hat{I}(f, f) &= \hat{I}^+(f, f) - \hat{I}^-(f, f) = \iint G^+(\vec{v}, \vec{v}_1, \vec{v}_2) f(\vec{v}_1) f(\vec{v}_2) d\vec{v}_1 d\vec{v}_2 - \iint G^-(\vec{v}, \vec{v}_1, \vec{v}_2) f(\vec{v}_1) f(\vec{v}_2) d\vec{v}_1 d\vec{v}_2 \\ &= \iint f(\vec{v}_1) f(\vec{v}_2) g \sigma(g, \theta) d\vec{v}' d\vec{k} - \iint f(\vec{v}) f(\vec{v}') g \sigma(g, \theta) d\vec{v}' d\vec{k}\end{aligned}\quad (6.1)$$

Первый член описывает скорость изменения функции распределения за счет появления частиц со скоростью $\vec{v}$ из за столкновений частиц со скоростями $\vec{v}_1, \vec{v}_2$. При этом $\vec{v}_1, \vec{v}_2, \vec{v}, \vec{v}'$ - скорости сталкивающихся частиц до и после взаимодействия, $\vec{g} = \vec{v}_1 - \vec{v}_2$, - вектор относительной скорости до столкновения, $g = |\vec{g}|$, $\vec{k}$ - единичный вектор, направленный вдоль вектора относительной скорости до столкновения. Второй член описывает скорость изменения функции распределения за счет исчезновения частиц со скоростью $\vec{v}$ из за столкновений с частицами со скоростями $\vec{v}'$, т.е. $\vec{v}, \vec{v}'$ - скорости сталкивающихся частиц до взаимодействия. Единичный вектор $\vec{k}$ направлен вдоль вектора относительной скорости после столкновения.

Преобразуем вначале интеграл прямых столкновений $\hat{I}^-(f, f)$. Поскольку положение вектора $\vec{k}$ в сферической системе координат, ось которой совпадает с вектором относительной скорости до столкновения, характеризуется углом рассеяния θ и азимутальным углом χ , то

$$\int \int f(\vec{v}) f(\vec{v}') g \sigma(g, \theta) d\vec{v}' d\vec{k} = f(\vec{v}) \int \int \int f(\vec{v}') g \sigma(g, \theta) d\vec{v}' \sin \theta d\theta d\chi$$

Учитывая, что $g = |\vec{v} - \vec{v}'|$ и вводя $\delta(\vec{v}_1 - \vec{v})$, запишем

$$\hat{I}^-(f, f) = \int \int f(\vec{v}_1) f(\vec{v}') \delta(\vec{v}_1 - \vec{v}) |\vec{v} - \vec{v}'| \int \int \sigma(|\vec{v} - \vec{v}'|, \theta) \sin \theta d\theta d\chi d\vec{v}' d\vec{v}_1$$

Обозначим полное сечение рассеяния $\int \int \sigma(|\vec{v} - \vec{v}'|, \theta) \sin \theta d\theta d\chi$ через $\Sigma(|\vec{v} - \vec{v}'|)$ и заменим переменную интегрирования $\vec{v}'$ на $\vec{v}_2$. Тогда

$$\hat{I}^-(f, f) = \int \int f(\vec{v}_1) f(\vec{v}_2) \delta(\vec{v}_1 - \vec{v}) |\vec{v} - \vec{v}_2| \Sigma(|\vec{v} - \vec{v}_2|) d\vec{v}_1 d\vec{v}_2 \quad (6.2)$$

Таким образом,

$$G^-(\vec{v}, \vec{v}_1, \vec{v}_2) = \delta(\vec{v}_1 - \vec{v}) |\vec{v} - \vec{v}_2| \Sigma(|\vec{v} - \vec{v}_2|) \quad (6.3)$$

Рассмотрим теперь интеграл обратных столкновений

$$\hat{I}^+(f, f) = \int \int f(\vec{v}_1) f(\vec{v}_2) g \sigma(g, \theta) d\vec{v}' d\vec{k} \quad (6.4)$$

Здесь вследствие закона сохранения импульса

$$\vec{v}_1 + \vec{v}_2 = \vec{v} + \vec{v}' \quad (6.5)$$

Закон сохранения энергии дает

$$v_1^2 + v_2^2 = v^2 + v'^2 \quad (6.6)$$

Из (6.5), (6.6) следует, что

$$2(\vec{v}_1 \cdot \vec{v}_2) = 2(\vec{v} \cdot \vec{v}') \quad (6.7)$$

Пусть $\vec{g}' = \vec{v} - \vec{v}'$ - относительная скорость частиц после столкновения. Вычитая (6.7) из (6.6), найдем, что модуль относительной скорости не меняется в процессе столкновения:

$$g' = g \quad (6.8)$$

Добавим в (6.4) интегрирование по g , учитывая равенство (6.8):

$$\begin{aligned} \int \int f(\vec{v}_1) f(\vec{v}_2) g \sigma(g, \theta) d\vec{v}' d\vec{k} &= \int \int \int f(\vec{v}_1) f(\vec{v}_2) g \sigma(g, \theta) \frac{\delta(g - g')}{g^2} d\vec{v}' d\vec{k} g^2 dg = \\ &= \int \int f(\vec{v}_1) f(\vec{v}_2) g \sigma(g, \theta) \frac{\delta(g - g')}{g^2} d\vec{v}' d\vec{g} \end{aligned} \quad (6.9)$$

Скорости частиц до столкновения $\vec{v}_1$, $\vec{v}_2$ в системе центра масс представляются как $+\frac{\vec{g}}{2}$, $-\frac{\vec{g}}{2}$, поэтому

$$\vec{v}_1 = \frac{\vec{v}_1 + \vec{v}_2}{2} + \frac{\vec{g}}{2}, \quad \vec{v}_2 = \frac{\vec{v}_1 + \vec{v}_2}{2} - \frac{\vec{g}}{2}, \quad (6.10)$$

или, вследствие (6.5),

$$\vec{v}_1 = \frac{\vec{v} + \vec{v}'}{2} + \frac{\vec{g}}{2}, \quad \vec{v}_2 = \frac{\vec{v} + \vec{v}'}{2} - \frac{\vec{g}}{2} \quad (6.11)$$

Выразим теперь скорости $\vec{v}'$, $\vec{g}$ через $\vec{v}_1$, $\vec{v}_2$. Это дает

$$\vec{v}' = \vec{v}_1 + \vec{v}_2 - \vec{v}, \quad \vec{g} = \vec{v}_1 - \vec{v}_2 \quad (6.12)$$

Переходя от переменных $\vec{v}'$, $\vec{g}$ к переменным $\vec{v}_1$, $\vec{v}_2$ в интеграле (6.9), и учитывая, что $|\vec{v} - \vec{v}'| = |\vec{v} - \vec{v}_1 - \vec{v}_2 + \vec{v}|$, найдем

$$\begin{aligned} \hat{I}^+(f, f) = \\ = \iint f(\vec{v}_1) f(\vec{v}_2) \sigma \left(|\vec{v}_1 - \vec{v}_2|, \arccos \left(\frac{((\vec{v}_1 - \vec{v}_2)(2\vec{v} - \vec{v}_1 - \vec{v}_2))}{|\vec{v}_1 - \vec{v}_2| |2\vec{v} - \vec{v}_1 - \vec{v}_2|} \right) \right) \frac{\delta(|\vec{v}_1 - \vec{v}_2| - |2\vec{v} - \vec{v}_1 - \vec{v}_2|)}{|\vec{v}_1 - \vec{v}_2|} 8 d\vec{v}_1 d\vec{v}_2 \end{aligned} \quad (6.13)$$

Это означает, что

$$G^+(\vec{v}, \vec{v}_1, \vec{v}_2) = 8\sigma \left(|\vec{v}_1 - \vec{v}_2|, \arccos \left(\frac{((\vec{v}_1 - \vec{v}_2)(2\vec{v} - \vec{v}_1 - \vec{v}_2))}{|\vec{v}_1 - \vec{v}_2| |2\vec{v} - \vec{v}_1 - \vec{v}_2|} \right) \right) \frac{\delta(|\vec{v}_1 - \vec{v}_2| - |2\vec{v} - \vec{v}_1 - \vec{v}_2|)}{|\vec{v}_1 - \vec{v}_2|}. \quad (6.14)$$

Таким образом, ядро $G^+(\vec{v}, \vec{v}_1, \vec{v}_2)$ зависит лишь от величины относительной скорости $g = |\vec{v}_1 - \vec{v}_2| = |2\vec{v} - \vec{v}_1 - \vec{v}_2|$ и скалярного произведения относительных скоростей до и после столкновения.

Отметим, что ядро $G^+(\vec{v}, \vec{v}_1, \vec{v}_2)$ тесно связано с введенной в [121] функцией $W(\vec{v}_1, \vec{v}_2 | v, v')$ и может быть получено из нее интегрированием по v' .

Полученные ядра $G^+(\vec{v}, \vec{v}_1, \vec{v}_2)$, $G^-(\vec{v}, \vec{v}_1, \vec{v}_2)$ являются ортогонально инвариантными, т.е. для любого ортогонального преобразования A выполняется равенство

$$G^\pm(A\vec{v}, A\vec{v}_1, A\vec{v}_2) = G^\pm(\vec{v}, \vec{v}_1, \vec{v}_2) \quad (6.15)$$

Введенные в главе 4 ядра $G_{i,j_2}^l(v, v_1, v_2)$ можно рассматривать как проекцию ядра $G(\vec{v}, \vec{v}_1, \vec{v}_2)$ на полиномы Лежандра:

$$G_{i,j_2}^l(v, v_1, v_2) = \frac{1}{y_{i0}^0} \iiint Y_{i0}^0(\vartheta, \varphi) G(\vec{v}, \vec{v}_1, \vec{v}_2) Y_{i0}^0(\vartheta_1, \varphi_1) Y_{j_2 0}^0(\vartheta_2, \varphi_2) d\vec{\Omega} d\vec{\Omega}_1 d\vec{\Omega}_2 \quad (6.16)$$

Формула (6.16), естественно, согласуется с (4.36), (4.37). Это легко показать, учитывая ортогональность сферических гармоник, полноту полиномов Сонина и тот факт, что $\tilde{Z}_{l_1,0,0,l_2,0,0}^{l,0,0} = 1$.

Отметим, наконец, что ядро $G^+(\vec{v}, \vec{v}_1, \vec{v}_2)$ симметрично относительно перестановки второго и третьего аргументов

$$G^+(\vec{v}, \vec{v}_1, \vec{v}_2) = G^+(\vec{v}, \vec{v}_2, \vec{v}_1) \quad (6.17)$$

Поэтому

$$\begin{aligned} G_{l_1, l_2}^{+l}(v, v_1, v_2) &= \frac{1}{y_{l_0}^0} \int \int \int Y_{l_0}^0(\vartheta, \varphi) G(\vec{v}, \vec{v}_2, \vec{v}_1) Y_{l_1}^0(\vartheta_1, \varphi_1) Y_{l_2}^0(\vartheta_2, \varphi_2) d\vec{\Omega} d\vec{\Omega}_1 d\vec{\Omega}_2 = \\ &= \frac{1}{y_{l_0}^0} \int \int \int Y_{l_0}^0(\vartheta, \varphi) G(\vec{v}, \vec{v}_2, \vec{v}_1) Y_{l_2}^0(\vartheta_2, \varphi_2) Y_{l_1}^0(\vartheta_1, \varphi_1) d\vec{\Omega} d\vec{\Omega}_2 d\vec{\Omega}_1 = G_{l_2, l_1}^{+l}(v, v_2, v_1) \end{aligned} \quad (6.18)$$

Ядра интеграла прямых столкновений $G_{l_1, l_2}^{-l}(v, v_1, v_2)$ такой симметрией не обладают.

Инвариантность ядра при изменении температуры базисного максвеллиана

Будем рассматривать ФР и ядро интеграла столкновений в системах отсчета, движущихся с одинаковой средней скоростью. Скорость $\vec{v}$ при этом будем измерять относительно этих систем отсчета. В этом случае базисы могут различаться лишь температурами, и переходу от одного базиса к другому соответствует только изменение единицы измерения скорости, т.е. масштаба. Действительно, безразмерные скорости $\vec{c}_i$ связаны с $\vec{v}_i$ соотношениями

$$\vec{v}_i = \vec{c}_i \sqrt{\frac{2k}{m}} \sqrt{T} \quad (6.19)$$

Обозначим ядро, записанное в базисе с температурой T , через $G_T(\vec{c}, \vec{c}_1, \vec{c}_2)$:

$$G_T(\vec{c}, \vec{c}_1, \vec{c}_2) = G\left(\vec{c} \sqrt{\frac{2k}{m}} \sqrt{T}, \vec{c}_1 \sqrt{\frac{2k}{m}} \sqrt{T}, \vec{c}_2 \sqrt{\frac{2k}{m}} \sqrt{T}\right) \quad (6.20)$$

Рассмотрим ядра в двух базисах с температурами T_0 и T_1 . Безразмерные скорости в базисе T_0 обозначим через $\vec{c}$, а в базисе T_1 - через $\vec{w}$. Обозначим

$$\frac{T_1}{T_0} = \kappa^2 \quad (6.21)$$

Тогда фиксированным скоростям $\vec{v}_i$ ($\vec{v}, \vec{v}_1, \vec{v}_2$) соответствуют такие безразмерные скорости $\vec{c}_i$ и $\vec{w}_i$, что

$$\vec{c}_i = \kappa \vec{w}_i. \quad (6.22)$$

Из (6.20) следует, что ядра в базисах T_0 и T_1 в точках, связанных соотношением (6.22), равны

$$G_{T_0}(\vec{c}, \vec{c}_1, \vec{c}_2) = G_{T_1}(\vec{w}, \vec{w}_1, \vec{w}_2). \quad (6.23)$$

Очевидно, что ядра $G_{l_1, l_2}^l(v, v_1, v_2)$ при заданном сечении рассеяния и фиксированных l, l_1, l_2 зависят только от абсолютных величин скоростей v, v_1, v_2 . Они также могут быть построены в любом температурном базисе с использованием (6.20), (6.16) и, вследствие (6.16), (6.23), оказываются равными,

$$G_{l_1, l_2, T_0}^l(c, c_1, c_2) = G_{l_1, l_2, T_1}^l(w, w_1, w_2), \quad (6.24)$$

при выполнении соотношений

$$c_i = \kappa w_i. \quad (6.25)$$

При построении линейных ядер с помощью суммы (5.75) по алгоритмам, изложенным в 5.2, 5.3 было установлено, что при больших значениях скоростей c_i возникает проблема вычисления ядер. Это связано со сложностью асимптотики по r полиномов Сонина при больших значениях аргументов. При построении ядер $G_{l_1, l_2, T_0}^l(c, c_1, c_2)$ в случае больших значений c, c_1, c_2 эту сложность можно обойти, если использовать свойство (6.24), (6.25). Пусть строится ядро для точки, в которой $c^2 + c_1^2 + c_2^2 \gg 1$. Перейдем в базис T_1 и выберем κ так, чтобы $w^2 + w_1^2 + w_2^2 \approx 1$. Теперь аргументы всех полиномов Сонина в (4.37) не велики и проблем со сходимостью не должно возникнуть. Далее, построив ядро $G_{l_1, l_2, T_1}^l(w, w_1, w_2)$ в базисе T_1 , с помощью (6.24) найдем ядро $G_{l_1, l_2, T_0}^l(c, c_1, c_2)$ в точках $c_i = \kappa \cdot w_i$. Следует подчеркнуть, что при вычислении ядра в новом базисе T_1 необходимо знать МЭ в этом базисе. В некоторых случаях зависимость МЭ от температуры известна аналитически и тогда этот вопрос решается просто. Это верно, например, для степенных потенциалов (см. следующий раздел). В общем случае для построения МЭ в каждом из базисов необходимо вычислить в этом базисе Ω -интегралы, а затем, воспользовавшись рекуррентными соотношениями для коэффициентов разложения МЭ по Ω -интегралам [49], построить все необходимые МЭ.

Таким образом, основное свойство нелинейных ядер, вытекающее из инвариантности интеграла столкновений при изменении температуры базиса, описывается соотношениями (6.23), (6.22) или более детальными соотношениями (6.24), (6.25).

В следующем разделе будет показано, как использовать свойство (6.23), (6.22) в случае степенных потенциалов.

Степенные потенциалы

В случае степенной зависимости потенциала взаимодействия сталкивающихся частиц V от расстояния r ($V \propto 1/r^\kappa$) сечение рассеяния представляется в виде

$$g\sigma(g, z) = g^\gamma F_\gamma(z), \quad z = \sin^2(\theta/2), \quad \gamma = (\kappa - 4)/\kappa \quad (6.26)$$

Здесь θ - угол рассеяния, а g - величина относительной скорости. Для степенных потенциалов зависимость сечения от угла и скорости расщепляется и зависимость от скорости оказывается степенной. Можно рассмотреть модели квазистепенного потенциала, когда угловая зависимость сечения рассеяния выбирается произвольной, но не зависящей от g , а зависимость сечения от g полагается степенной. Частный случай таких моделей - псевдостепенные потенциалы, в которых рассеяние полагается изотропным, $F_\gamma(z) = \text{const}$.

Для всех этих моделей ядра $G_{T_0}(\vec{c}, \vec{c}_1, \vec{c}_2)$ имеют вид

$$G_{T_0}(\vec{c}, \vec{c}_1, \vec{c}_2) = 8 \left(|\vec{c}_1 - \vec{c}_2| \sqrt{2k/m} \sqrt{T_0} \right)^{\gamma-1} F_\gamma(\sin^2(\theta/2)) \frac{\delta \left(|\vec{c}_1 - \vec{c}_2| \sqrt{2k/m} \sqrt{T_0} - |2\vec{c} - \vec{c}_1 - \vec{c}_2| \sqrt{2k/m} \sqrt{T_0} \right)}{|\vec{c}_1 - \vec{c}_2| \sqrt{2k/m} \sqrt{T_0}} - \\ - \delta \left((|\vec{c}_1 - \vec{c}| \sqrt{2k/m} \sqrt{T_0}) \left(|\vec{c} - \vec{c}_2| \sqrt{2k/m} \sqrt{T_0} \right) \right) 2\pi \int F_\gamma(\sin^2(\theta/2)) \sin \theta d\theta, \quad (6.27)$$

где

$$\cos \theta = \frac{((\vec{c}_1 - \vec{c}_2)(2\vec{c} - \vec{c}_1 - \vec{c}_2))}{|\vec{c}_1 - \vec{c}_2| |2\vec{c} - \vec{c}_1 - \vec{c}_2|}. \quad (6.28)$$

Выражение для $G_{T_1}(\vec{w}, \vec{w}_1, \vec{w}_2)$ может быть получено из (6.27), (6.28) заменой $\vec{c}_i$ на $\vec{w}_i$ и T_0 на T_1 . Подставляя $\vec{w}_i = \vec{c}_i / \kappa$ и $\sqrt{T_1} = \kappa \sqrt{T_0}$ в $G_{T_1}(\vec{w}, \vec{w}_1, \vec{w}_2)$, найдем

$$G_{T_1}(\vec{w}, \vec{w}_1, \vec{w}_2) = \kappa^{\gamma-3} \left\{ 8 \left(\left| \frac{\vec{c}_1}{\kappa} - \frac{\vec{c}_2}{\kappa} \right| \sqrt{2k/m} \sqrt{T_0} \right)^{\gamma-1} F_\gamma(\sin^2(\theta/2)) \times \right. \\ \times \frac{\delta \left(\left| \frac{\vec{c}_1}{\kappa} - \frac{\vec{c}_2}{\kappa} \right| \sqrt{2k/m} \sqrt{T_0} - \left| 2 \frac{\vec{c}}{\kappa} - \frac{\vec{c}_1}{\kappa} - \frac{\vec{c}_2}{\kappa} \right| \sqrt{2k/m} \sqrt{T_0} \right)}{\left| \frac{\vec{c}_1}{\kappa} - \frac{\vec{c}_2}{\kappa} \right| \sqrt{2k/m} \sqrt{T_0}} - \\ \left. - \delta \left(\left(\left| \frac{\vec{c}_1}{\kappa} - \frac{\vec{c}}{\kappa} \right| \sqrt{2k/m} \sqrt{T_0} \right) \left(\left| \frac{\vec{c}}{\kappa} - \frac{\vec{c}_2}{\kappa} \right| \sqrt{2k/m} \sqrt{T_0} \right) \right) 2\pi \int F_\gamma(\sin^2(\theta/2)) \sin \theta d\theta \right\} = \\ = \kappa^{\gamma-3} G_{T_0} \left(\frac{\vec{c}}{\kappa}, \frac{\vec{c}_1}{\kappa}, \frac{\vec{c}_2}{\kappa} \right) \quad (6.29)$$

Учитывая (6.23) и переходя от κ к параметру подобия $s = 1/\kappa$, получим

$$G_{T_0}(s\vec{c}, s\vec{c}_1, s\vec{c}_2) = s^{\gamma-3} G_{T_0}(\vec{c}, \vec{c}_1, \vec{c}_2) \quad (6.30)$$

Вследствие произвольности отношения T_1/T_0 параметр s принимает любые значения ($0 < s < \infty$), а в силу произвольности температуры базиса T_0 соотношение (6.30) выполнено в любом базисе. Таким образом, ядро нелинейного интеграла столкновений является однородной функцией своих аргументов.

Очевидно, что вследствие (6.16), (6.20) такие же соотношения имеют место и для ядер $G_{l_1, l_2; T}^l(c, c_1, c_2)$:

$$G_{l_1, l_2; T}^l(sc, sc_1, sc_2) = s^{\gamma-3} G_{l_1, l_2; T}^l(c, c_1, c_2) \quad (6.31)$$

Если ядро $G_{l_1, l_2; T}^l(c, c_1, c_2)$ задано на некоторой поверхности в пространстве (c, c_1, c_2) , то оно легко находится на подобной ей поверхности, получаемой из исходной умножением всех координат на параметр s . Равенство (6.31) будем называть соотношением подобия для ядра $G_{l_1, l_2; T}^l(c, c_1, c_2)$.

Отметим, что для моделей квазистепенного потенциала матричные элементы степенным образом зависят от температуры, причем для фиксированного k все матричные элементы зависят от температуры одинаково, а именно как T^μ , где $\mu = \gamma/2$ [49]. При этом для модели твердых шаров $\mu = 0.5$, а для максвелловских молекул $\mu = 0$. Соотношения подобия (6.30), (6.31) могут быть получены при использовании температурной зависимости МЭ и выражений для ядер $G_{l_1, l_2; T}^l(c, c_1, c_2)$ через МЭ (4.37). Это подробно проделано в [122].

Возвращаясь к ядрам $G_{l_1, l_2; T}^l(c, c_1, c_2)$, рассмотрим ядро на поверхности сферы в пространстве (c, c_1, c_2) . Обозначим

$$Al = \sqrt{c^2 + c_1^2 + c_2^2} \quad (6.32)$$

На сфере радиуса Al ядро задано на участке поверхности, определяемой условием $c \geq 0$, $c_1 \geq 0$, $c_2 \geq 0$. Для точки на поверхности удобно использовать относительные координаты, например, c/Al , c_1/Al , c_2/Al , или угловые переменные ω , ω_1 , ω_2 :

$$\cos \omega = c/Al, \quad \cos \omega_1 = c_1/Al, \quad \cos \omega_2 = c_2/Al \quad (6.33)$$

Из (6.32) следует, что $\cos^2 \omega + \cos^2 \omega_1 + \cos^2 \omega_2 = 1$, и точка на поверхности задается двумя координатами, например, ω и ω_1 . Из соотношения (6.31) следует, что

$$G_{l_1, l_2; T}^l(c, c_1, c_2) = Al^{-3+2\mu} \Psi(\omega, \omega_1), \quad (6.34)$$

$$0 \leq \omega \leq \pi/2, \quad 0 \leq \omega_1 \leq \pi/2$$

Конечно, могут быть использованы и другие координаты точки на поверхности. Здесь у функции Ψ опущены индексы l , l_1 , l_2 и μ .

Итак, благодаря соотношениям подобия, для степенных потенциалов зависимость G от трех переменных c, c_1, c_2 расщепляется на простую зависимость от Al и зависимость Ψ от двух переменных. Искать по формуле (4.37) надо именно эту последнюю, т.е. Ψ . При этом для определенных значений ω и ω_1 можно выбирать Al так, чтобы аргументы у полиномов Сонина были не очень велики и сходимость при вычислении сумм была наилучшей. После построения $\Psi(\omega, \omega_1)$ можно легко найти ядро для любых, сколь угодно больших значений скорости c используя (6.34). Теперь, интегрируя нелинейное ядро G с максвеллианом, мы легко находим линейное ядро при любых скоростях, т.е. легко решаем проблему построения линейного ядра в области больших скоростей.

Отметим, что в случае степенных потенциалов можно определить безразмерное ядро, которое оказывается независимым от базиса. Чтобы показать это, перейдем к безразмерному уравнению Больцмана, выбирая в качестве масштаба скорости тепловую скорость, $v_{T_0} = \sqrt{2kT_0/m}$, а в качестве масштаба времени – обратную частоту столкновений $\tau_{T_0} = 1/(n_0 v_{T_0} \Sigma(v_{T_0}))$. В результате справа выделится безразмерное ядро

$$\begin{aligned} \bar{G}(\bar{c}, \bar{c}_1, \bar{c}_2) &= G_{T_0}(\bar{c}, \bar{c}_1, \bar{c}_2) (v_{T_0})^{3-\gamma} (A_\gamma)^{-1} = \\ &= 8(|\bar{c}_1 - \bar{c}_2|)^{\gamma-1} \bar{F}_\gamma(\sin^2(\theta/2)) \frac{\delta(|\bar{c}_1 - \bar{c}_2| - |2\bar{c} - \bar{c}_1 - \bar{c}_2|)}{|\bar{c}_1 - \bar{c}_2|} - \delta(\bar{c}_1 - \bar{c}) (|\bar{c} - \bar{c}_2|)^\gamma, \end{aligned} \quad (6.35)$$

где $A_\gamma = 2\pi \int F_\gamma(\sin^2(\theta/2)) \sin \theta d\theta$, $\bar{F}_\gamma(\sin^2(\theta/2)) = F_\gamma(\sin^2(\theta/2)) / A_\gamma$. При обезразмеривании уравнения Больцмана в базисе с температурой T_1 (т.е. при использовании в качестве масштабов скорости и времени величин v_{T_1} , τ_{T_1}) получим выражение, отличное от (6.35) только тем, что вместо скоростей $\bar{c}_i$ в него входят скорости $\bar{w}_i$. Таким образом, безразмерные ядра в различных базисах равны, если

$$\bar{w} = \bar{c}, \quad \bar{w}_1 = \bar{c}_1, \quad \bar{w}_2 = \bar{c}_2. \quad (6.36)$$

Это свойство позволяет для любого степенного потенциала построить безразмерное ядро в каком-нибудь одном базисе, ядра во всех других базисах совпадают с ним.

Поскольку ядро $\bar{G}(\bar{c}, \bar{c}_1, \bar{c}_2)$, зависящее от векторных переменных, пропорционально $G\left(\bar{c} \sqrt{\frac{2k}{m}} \sqrt{T_0}, \bar{c}_1 \sqrt{\frac{2k}{m}} \sqrt{T_0}, \bar{c}_2 \sqrt{\frac{2k}{m}} \sqrt{T_0}\right)$, то оно может быть представлено в виде разложения по сферическим гармоникам

$$\bar{G}(\bar{c}, \bar{c}_1, \bar{c}_2) = \sum_{l,m} \sum_{i l_1, m_1, i_1 l_2, m_2, i_2} Y_{l,m}^i(\theta, \varphi) \bar{Z}_{l_1, m_1, i_1 l_2, m_2, i_2}^{l, m, i} \bar{G}_{l_1, l_2}^l(c, c_1, c_2) \frac{Y_{l_1, m_1}^{i_1}(\theta_1, \varphi_1) Y_{l_2, m_2}^{i_2}(\theta_2, \varphi_2)}{y_{l_1, m_1}^{i_1} y_{l_2, m_2}^{i_2}}, \quad (6.37)$$

где

$$\bar{G}_{i,j}^l(c, c_1, c_2) = \frac{1}{y_{i0}^0} \int \int \int Y_{i0}^0(\vartheta, \varphi) \bar{G}(\vec{c}, \vec{c}_1, \vec{c}_2) Y_{i0}^0(\vartheta_1, \varphi_1) Y_{j0}^0(\vartheta_2, \varphi_2) d\vec{\Omega}_2 d\vec{\Omega}_1 d\vec{\Omega}_2. \quad (6.38)$$

Пользуясь безразмерными аналогами формул (4.60), (4.65), можно построить и безразмерные ядра линейного интеграла столкновений первого и второго рода для любого степенного потенциала. Эти ядра будут иметь вид

$$\bar{L}^{(1)}(\vec{c}, \vec{c}_1) = \int \bar{G}(\vec{c}, \vec{c}_1, \vec{c}_2) M(c_2) d\vec{c}_2, \quad \bar{L}^{(2)}(\vec{c}, \vec{c}_2) = \int \bar{G}(\vec{c}, \vec{c}_1, \vec{c}_2) M(c_1) d\vec{c}_1. \quad (6.39)$$

По формулам (4.63), (4.66) могут быть найдены и безразмерные ядра, зависящие от модулей скоростей

$$\bar{L}_l^{(1)}(c, c_1) = \int_0^\infty \bar{G}_{l,0}^l(c, c_1, c_2) M(c_2) c_2^2 dc_2, \quad \bar{L}_l^{(2)}(c, c_2) = \int_0^\infty \bar{G}_{0,l}^l(c, c_1, c_2) M(c_1) c_1^2 dc_1. \quad (6.40)$$

В случае модели твердых шаров аналитические формулы для ядра от векторных скоростей получены в [34], а для ядер, зависящих от модулей скоростей - в [41]. Ядра, полученные Гекке, переписаны в используемых нами обозначениях в параграфе 4.2. Ядра $\bar{L}_l^{(1)}(c, c_1)$, $\bar{L}_l^{(2)}(c, c_1)$ для максвелловских молекул получены в [50] и также приведены в 4.2 (формулы (4.76), (4.77)). С использованием формулы (5.75) такие ядра изучались в [115] (максвелловские молекулы) и [117] (твердые шары).

Таким образом, в случае степенных потенциалов ядра как линейного, так и нелинейного интеграла столкновений являются универсальными функциями безразмерных скоростей. При этом для ядер нелинейного интеграла столкновений выполнены еще и соотношения подобия.

6.2 Общие свойства ядер интеграла прямых столкновений и их построение

Рассмотрим теперь более подробно свойства ядра интеграла прямых столкновений (6.3). Запишем ядро $G^-(\vec{v}, \vec{v}_1, \vec{v}_2)$ в виде

$$G^-(\vec{v}, \vec{v}_1, \vec{v}_2) = \delta(\vec{v}_1 - \vec{v}) L_G(\vec{v}, \vec{v}_2), \quad (6.41)$$

где ядро

$$L_G(\vec{v}, \vec{v}_2) = |\vec{v} - \vec{v}_2| \Sigma(|\vec{v} - \vec{v}_2|) \quad (6.42)$$

ортогонально инвариантно, т.е. инвариантно относительно поворота системы координат. Функции, обладающие таким свойством, зависят лишь от трех переменных - $v = |\vec{v}|$, $v_2 = |\vec{v}_2|$ и $\cos \vartheta = (\vec{v} \cdot \vec{v}_2) / (v \cdot v_2)$. Представляя $L_G(\vec{v}, \vec{v}_2)$ в виде

$$L_G(\vec{v}, \vec{v}_2) = L_G(v, v_2, \cos \vartheta) = \sum_{l=0}^{\infty} \frac{2l+1}{4\pi} L_G^l(v, v_2) P_l(\cos \vartheta) \quad (6.43)$$

и используя теорему сложения

$$\begin{aligned}
P_l(\cos \theta \cos \theta_2 + \sin \theta \sin \theta_2 \cos(\varphi - \varphi_2)) = \\
= P_l(\cos \theta) P_l(\cos \theta_2) + 2 \sum_{m=1}^l \frac{(l-m)!}{(l+m)!} P_l^m(\cos \theta) P_l^m(\cos \theta_2) \cos m(\varphi - \varphi_2), \quad (6.44)
\end{aligned}$$

найдем

$$L_G(\vec{v}, \vec{v}_2) = \sum_{l,m,i} Y_{l,m}^i(\theta, \varphi) L_G^l(v, v_2) \frac{Y_{l,m}^i(\theta_2, \varphi_2)}{y_{l,m}^i}. \quad (6.45)$$

Очевидно, что собственными функциями интегрального оператора $L_G(F) = \int L_G(\vec{v}, \vec{v}_2) F(\vec{\Omega}_2) d\vec{\Omega}_2$ являются сферические гармоники $Y_{l,m}^i(\theta, \varphi)$, а соответствующими собственными значениями - $L_G^l(v, v_2)$.

В случае степенных потенциалов ядро $L_G(\vec{v}, \vec{v}_2)$, естественно, обладает подобием. Согласно (6.26), имеем

$$L_G(s\vec{v}, s\vec{v}_2) = s^\gamma |\vec{v} - \vec{v}_2|^\gamma \iint F_\gamma(\sin^2(\theta/2)) \sin \theta d\theta d\varphi = s^\gamma L_G(\vec{v}, \vec{v}_2). \quad (6.46)$$

Понятно, что такое же свойство подобия справедливо и для $L_G^l(v, v_2)$:

$$L_G^l(sv, sv_2) = s^\gamma L_G^l(v, v_2). \quad (6.47)$$

Рассмотрим ядро $G_{l_1, l_2}^{-l}(v, v_1, v_2)$. Подставляя в (6.16) выражение для $G^-(\vec{v}, \vec{v}_1, \vec{v}_2)$ (6.41), получим

$$\begin{aligned}
G_{l_1, l_2}^{-l}(v, v_1, v_2) &= \frac{1}{y_{l_0}^0} \iiint Y_{l_0}^0(\vartheta, \varphi) \delta(\vec{v}_1 - \vec{v}) L_G(\vec{v}, \vec{v}_2) Y_{l_1}^0(\vartheta_1, \varphi_1) Y_{l_2}^0(\vartheta_2, \varphi_2) d\vec{\Omega} d\vec{\Omega}_1 d\vec{\Omega}_2 = \\
&= \frac{2l+1}{4\pi} \frac{\delta(v_1 - v)}{v_1^2} \iint P_l(\cos \theta) P_{l_1}(\cos \theta) L_G(\vec{v}, \vec{v}_2) P_{l_2}(\cos \theta_2) d\vec{\Omega} d\vec{\Omega}_2 \quad (6.48)
\end{aligned}$$

Поскольку $\int L_G(\vec{v}, \vec{v}_2) P_{l_2}(\cos \theta_2) d\vec{\Omega}_2 = L_G^{l_2}(v, v_2) P_{l_2}(\cos \theta)$, то выражение для $G_{l_1, l_2}^{-l}(v, v_1, v_2)$ запишется

$$G_{l_1, l_2}^{-l}(v, v_1, v_2) = \frac{\delta(v_1 - v)}{v_1^2} C_{l_1 l_2}^l L_G^{l_2}(v, v_2), \quad (6.49)$$

где

$$C_{l_1 l_2}^l = \frac{2l+1}{2} \int P_l(\cos \theta) P_{l_1}(\cos \theta) P_{l_2}(\cos \theta) d \cos \theta. \quad (6.50)$$

Получим теперь выражение для МЭ интеграла прямых столкновений. Обозначим $c^l S_{l+1/2}^r(c^2) = s_l^r(c)$. Используя (4.37) и ортогональность полиномов Сонина, найдем

$$K_{r_1, l_1, r_2, l_2}^{(-)r, l} = \iiint \frac{s_l^r(c)}{\sigma_{rl}} G_{l_1, l_2}^{(-)l}(v, v_1, v_2) M_T(c_1) s_{l_1}^{r_1}(c_1) M_T(c_2) s_{l_2}^{r_2}(c_2) v^2 dv v_1^2 dv_1 v_2^2 dv_2 \quad (6.51)$$

Учтем теперь, что ядра интеграла прямых столкновений имеют вид (6.49). Это дает

$$\begin{aligned}
K_{r_1, l_1, r_2, l_2}^{(-)r, l} &= C_{l_1 l_2}^l \int \int \frac{s_l^r(c)}{\sigma_{rl}} L_G^{l_2}(v, v_2) M_T(c) s_{l_1}^{r_1}(c) M_T(c_2) s_{l_2}^{r_2}(c_2) v^2 dv v_2^2 dv_2 = \\
&= C_{l_1 l_2}^l \frac{1}{\sigma_{rl}} \int \int \int M_T(c) s_l^r(c) s_{l_1}^{r_1}(c) \frac{\delta(v' - v)}{v'^2} L_G^{l_2}(v', v_2) M_T(c_2) s_{l_2}^{r_2}(c_2) v'^2 dv' v^2 dv v_2^2 dv_2 \quad (6.52)
\end{aligned}$$

Пользуясь свойством полноты полиномов Сонина,

$$M_T(c') \sum_{r_3} s_{l_2}^{r_3}(c') \frac{s_{l_2}^{r_3}(c)}{\sigma_{r_3 l_2}} = \frac{\delta(v' - v)}{v'^2}, \quad (6.53)$$

последнее выражение можно записать

$$\begin{aligned}
K_{r_1, l_1, r_2, l_2}^{(-)r, l} &= C_{l_1 l_2}^l \sum_{r_3} \int M_T(c) s_l^r(c) s_{l_1}^{r_1}(c) s_{l_2}^{r_3}(c) v^2 dv \frac{1}{\sigma_{rl}} \times \\
&\times \int \int M_T(c') \frac{s_{l_2}^{r_3}(c')}{\sigma_{r_3 l_2}} L_G^{l_2}(v', v_2) M_T(c_2) s_{l_2}^{r_2}(c_2) v'^2 dv' v_2^2 dv_2 \quad (6.54)
\end{aligned}$$

Заметим, что, согласно (6.52),

$$\int \int M_T(c') \frac{s_{l_2}^{r_3}(c')}{\sigma_{r_3 l_2}} L_G^{l_2}(v', v_2) M_T(c_2) s_{l_2}^{r_2}(c_2) v'^2 dv' v_2^2 dv_2 = K_{0, 0, r_2, l_2}^{(-)r_3, l_2}. \quad (6.55)$$

Вводя обозначение $b_{r_3 l_2 r_1 l_1}^{rl} = \frac{1}{\sigma_{rl}} \int M_T(c) s_l^r(c) s_{l_1}^{r_1}(c) s_{l_2}^{r_3}(c) v^2 dv$, получаем

$$K_{r_1, l_1, r_2, l_2}^{(-)r, l} = C_{l_1 l_2}^l \sum_{r_3} b_{r_3 l_2 r_1 l_1}^{rl} K_{0, 0, r_2, l_2}^{(-)r_3, l_2} \quad (6.56)$$

Соотношение (6.55) дает возможность найти выражение для ядра $L_G^l(v, v_2)$ через МЭ.

Действительно, умножая (6.55) на $s_{l_2}^{r_3}(c) \frac{s_{l_2}^{r_2}(c')}{\sigma_{r_2 l_2}}$, суммируя результат по r_2, r_3 и принимая во внимание полноту полиномов Сонина (6.53), получим

$$L_G^l(v, v_2') = \sum_{r_2, r_3} s_{l_2}^{r_3}(c) K_{0, 0, r_2, l_2}^{(-)r_3, l_2} \frac{s_{l_2}^{r_2}(c')}{\sigma_{r_2 l_2}}. \quad (6.57)$$

Используя (6.49), можно получить связь между ядрами линейного интеграла прямых столкновений первого и второго рода и ядром $L_G^l(v, v_2)$. Согласно (4.63) и (6.49) имеем

$$L_l^{(-, 1)}(v, v_1) = C_{l_0}^l \int_0^\infty \frac{\delta(v_1 - v)}{v_1^2} L_G^0(v, v_2) M_T(v_2) v_2^2 dv_2 = \frac{\delta(v_1 - v)}{v_1^2} \int_0^\infty L_G^0(v, v_2) M_T(v_2) v_2^2 dv_2 \quad (6.58)$$

Сопоставляя (6.58) с (4.64), получаем выражение для функции $k(v)$, описывающей уходящую часть линейного интеграла столкновений:

$$k(v) = \int_0^\infty L_G^0(v, v_2) M_T(v_2) v_2^2 dv_2 \quad (6.59)$$

Переходя к безразмерным переменным и выбирая, как и выше, в качестве масштаба скорости тепловую скорость, $v_T = \sqrt{2kT/m}$, а в качестве масштаба времени – обратную частоту столкновений $\tau_T = 1/(n_0 v_T \Sigma(v_T))$, найдем

$$\bar{k}(c) = \int \bar{L}_G^0(c, c_2) M(c_2) c_2^2 dc_2 \quad (6.60)$$

$$\text{Здесь } \bar{L}_G^l(c, c_2) = \frac{1}{v_T \Sigma(v_T)} L_G^l(c \cdot v_T, c_2 \cdot v_T), \quad \bar{k}(c) = k(v_T c) \cdot \frac{1}{v_T \Sigma(v_T)}.$$

Из (4.66) и (6.49) легко получить связь между ядром линейного интеграла прямых столкновений второго рода и ядром $L_G^l(v, v_2)$:

$$L_l^{(-,2)}(v, v_2) = C_{0l}^l \int_0^\infty \frac{\delta(v_1 - v)}{v_1^2} L_G^l(v, v_2) M_T(v_1) v_1^2 dv_1 = M_T(v) L_G^l(v, v_2). \quad (6.61)$$

В безразмерных переменных это соотношение запишется в виде

$$\bar{L}_l^{(-,2)}(c, c_2) = M(c) \bar{L}_G^l(c, c_2) \quad (6.62)$$

Для модели твердых шаров ядро $\bar{L}_l^{(-,2)}(c, c_2)$ задается формулой (4.73), поэтому $\bar{L}_G^l(c, c_2)$ в этом случае имеет вид

$$\bar{L}_G^l(c, c_2) = 4\pi \left[\frac{1}{(2l+1)(2l+3)} \frac{c_{\min}^{2l+3}}{(cc_2)^{l+1}} - \frac{1}{(2l+1)(2l-1)} \frac{c_{\min}^{2l-1}}{(cc_2)^{l-1}} \right], \quad (6.63)$$

$$c_{\min} = \min(c, c_2)$$

Нетрудно проверить, что $\bar{L}_G^l(c, c_2)$ удовлетворяет свойству подобия (6.47) с $\mu = 1/2$, т.е. что выполняется равенство

$$\bar{L}_G^l(sc, sc_2) = s \bar{L}_G^l(c, c_2). \quad (6.64)$$

Отметим, что ядро $\bar{L}_l^{(-,2)}(c, c_2)$ таким свойством не обладает.

В случае максвелловских молекул сечение рассеяния имеет вид

$$\sigma(g, z) = g^{-1} F_0(z). \quad (6.65)$$

Для полного сечения получаем

$$\Sigma(g) = g^{-1} \int \int F_0(\sin^2(\theta/2)) \sin \theta d\theta d\chi = g^{-1} A_0. \quad (6.66)$$

Легко показать, что в безразмерных переменных $\bar{L}_G(\vec{c}, \vec{c}_2) = 1$, и, следовательно, $\bar{L}_G^l(c, c_2) = 4\pi \delta_{l,0}$. Поэтому $\bar{L}_G^l(c, c_2)$ обладает свойством подобия с $\mu = 0$.

Рассмотрим теперь выражение для $\bar{L}_G^l(c, c_2)$ в общем случае. Согласно (6.42), (6.43) имеем

$$\bar{L}_G(\vec{c}, \vec{c}_2) = |\vec{c} - \vec{c}_2| \frac{\Sigma(v_T |\vec{c} - \vec{c}_2|)}{\Sigma(v_T)}, \quad (6.67)$$

$$\bar{L}_G^l(c, c_2) = \iint \bar{L}_G(\vec{c}, \vec{c}_2) P_l(\cos \theta) \sin \theta d\theta d\varphi = 2\pi \int_{-1}^1 g \frac{\Sigma(v_T g)}{\Sigma(v_T)} P_l(x) dx, \\ g = \sqrt{c^2 + c_2^2 - 2cc_2x}.$$

Таким образом, ядра $\bar{L}_G^l(c, c_2)$ выражаются через полное сечение с помощью одной квадратуры, и их построение не вызывает особых затруднений. Заметим, что, как следует из (6.67), ядро $\bar{L}_G(\vec{c}, \vec{c}_2)$ симметрично относительно перестановки аргументов. Очевидно, что этим же свойством обладают и ядра $\bar{L}_G^l(c, c_2)$.

Для степенных потенциалов

$$\bar{L}_G^l(c, c_2) = 2\pi \int_{-1}^1 g^{2\mu} P_l(x) dx \quad (6.68)$$

Интеграл в (6.68) берется для любых значений μ и l . В частности, для $\mu = -0.5$ имеем

$$\bar{L}_G^l(c, c_2) = \frac{4\pi}{2l+1} \frac{(\min(c, c_2))^l}{(\max(c, c_2))^{l+1}}. \quad (6.69)$$

Для $\mu = 0.5$ результат интегрирования в (6.68) совпадает с (6.63).

Свойство подобия (6.47) позволяет представить $\bar{L}_G^l(c, c_2)$ в виде произведения степени от $\sqrt{c^2 + c_2^2}$ и функции, зависящей от одной переменной ω ($\cos \omega = c / \sqrt{c^2 + c_2^2}$):

$$\bar{L}_G^l(c, c_2) = 4\pi \left(\sqrt{c^2 + c_2^2} \right)^{2\mu} \Psi_\mu^l(\omega), \quad \Psi_\mu^l(\omega) = \frac{1}{4\pi} \bar{L}_G^l(\cos \omega, \sin \omega) \quad (6.70)$$

Функцию $\Psi_\mu^l(\omega)$ будем называть приведенным ядром. Подчеркнем, что зависимость приведенных ядер от ω оказывается различной для разных потенциалов взаимодействия, что отражено в наличии индекса μ .

Используя определение $\Psi_\mu^l(\omega)$ и (6.68), найдем

$$\Psi_\mu^l(\omega) = \frac{1}{2} \int_{-1}^1 (1 - x \cdot \sin 2\omega)^\mu P_l(x) dx. \quad (6.71)$$

Очевидно, что $\Psi_\mu^l(\omega) = \Psi_\mu^l(\pi/2 - \omega)$ (это является отражением симметрии ядра), и приведенное ядро можно рассматривать только на одном из промежутков $0 \leq \omega \leq \pi/4$ или $\pi/4 \leq \omega \leq \pi/2$. Для приведенных ядер при $\mu = -0.5$ и $\mu = 0.5$ из (6.69), (6.63) получим

$$\Psi_{-0.5}^l(\omega) = \frac{1}{2l+1} \frac{\sin^l \omega}{\cos^{l+1} \omega}, \quad 0 \leq \omega \leq \pi/4 \quad (6.72)$$

$$\Psi_{0.5}^l(\omega) = \frac{\cos \omega}{2l+1} \left(\frac{tg^{l+2} \omega}{2l+3} - \frac{tg^l \omega}{2l-1} \right), \quad 0 \leq \omega \leq \pi/4 \quad (6.73)$$

Как уже отмечалось, интеграл (6.71) может быть найден аналитически при любых μ, l . Заметим прежде всего, что в случае $l = 0$ он легко вычисляется и дает

$$\Psi_{\mu}^0(\omega) = \frac{(1 + \sin 2\omega)^{\mu+1} - (1 - \sin 2\omega)^{\mu+1}}{2(\mu+1)\sin 2\omega} \quad (6.74)$$

Предположим, что вычисляются аналитически все интегралы вида $\int_{-1}^1 (1 - x \cdot \sin 2\omega)^{\mu} x^i dx$ для всех $i \leq l-1$. Покажем, что тогда и $\int_{-1}^1 (1 - x \cdot \sin 2\omega)^{\mu} x^l dx$ может быть вычислен аналитически.

Действительно,

$$\begin{aligned} \int_{-1}^1 (1 - x \cdot \sin 2\omega)^{\mu} x^l dx &= \frac{(-1)^{l+1}}{(\sin 2\omega)^{l+1}} \int_{-1}^1 (1 - x \cdot \sin 2\omega)^{\mu+l} d(1 - x \cdot \sin 2\omega) + \int_{-1}^1 (1 - x \cdot \sin 2\omega)^{\mu} Q_{l-1}(x) dx = \\ &= \frac{(-1)^{l+1}}{(\sin 2\omega)^{l+1}} \frac{(1 - \sin 2\omega)^{\mu+l+1} - (1 + \sin 2\omega)^{\mu+l+1}}{(\mu+l+1)} + \int_{-1}^1 (1 - x \cdot \sin 2\omega)^{\mu} Q_{l-1}(x) dx \end{aligned} \quad (6.75)$$

Здесь $Q_{l-1}(x)$ - некоторый полином порядка $l-1$. Поскольку по предположению интеграл в последней строке вычисляется аналитически, то и $\int_{-1}^1 (1 - x \cdot \sin 2\omega)^{\mu} x^l dx$ вычисляется аналитически. Следовательно, это утверждение справедливо для всех интегралов вида $\int_{-1}^1 (1 - x \cdot \sin 2\omega)^{\mu} x^l dx$ при произвольных значениях μ, l , а, значит, и для интегралов (6.71).

Ясно, что при больших значениях индекса l аналитическое выражение для (6.71) может оказаться достаточно громоздким. В этих случаях интеграл (6.71) может быть оценен либо численно, либо с помощью асимптотического подхода.

Для оценки интеграла (6.71) при $\sin 2\omega < 1 - \delta$, где δ - некоторое малое положительное число, разложим $(1 - x \cdot \sin 2\omega)^{\mu}$ в ряд. Используя выражение для $\int_0^1 x^k P_l(x) dx$, приведенное в [73], найдем

$$\Psi_{\mu}^l(\omega) = \frac{1}{2} \sum_{m=l/2}^{\infty} \frac{\sqrt{\pi} \Gamma(2m - \mu)}{2^{2m} \Gamma(-\mu) \Gamma(m + l/2 + 3/2) \Gamma(m - l/2 + 1)} (\sin 2\omega)^{2m}, \quad l = 2k \quad (6.76)$$

$$\Psi_{\mu}^l(\omega) = \frac{1}{2} \sum_{m=(l-1)/2}^{\infty} \frac{\sqrt{\pi} \Gamma(2m + 1 - \mu)}{2^{2m+1} \Gamma(-\mu) \Gamma(m + (l-1)/2 + 5/2) \Gamma(m - (l-1)/2 + 1)} (\sin 2\omega)^{2m+1}, \quad l = 2k + 1$$

Первые члены этих разложений совпадают с результатом, полученным в [123], и определяют поведение приведенного ядра в окрестности $\omega = 0$:

$$\Psi_{\mu}^l(\omega) = \frac{\sqrt{\pi}\Gamma(l-\mu)}{2\Gamma(-\mu)\Gamma(l+3/2)}\omega^l + O(\omega^{l+2}), \quad \omega \rightarrow 0 \quad (6.77)$$

При $l=0$ приведенное ядро, как следует из (6.78), обращается в единицу при $\omega=0$, что согласуется с (6.74). Это означает, что $\bar{L}_G^0(c,0) = \bar{L}_G^0(0,c) = 4\pi c^{2\mu}$.

При $l \neq 0$ коэффициент в (6.77) отличен от нуля для всех μ , удовлетворяющих условию $0 < |\mu| < 1$, и равен нулю при $\mu=0$. Точка $\mu=0$ соответствует максвелловским молекулам. В этом случае $\Psi_0^l(\omega) = \delta_{l,0}$. При переходе через $\mu=0$ коэффициент в (6.77) меняет знак.

В том случае, когда $\sin 2\omega \approx 1$, интеграл $\frac{1}{2} \int_{-1}^1 (1-x \cdot \sin 2\omega)^\mu P_l(x) dx$ перепишем в виде

$$\Psi_{\mu}^l(\omega) = \frac{1}{2} \left(\frac{\varepsilon}{1+\varepsilon} \right)^\mu \int_{-1}^1 \left(1 + \frac{1-x}{\varepsilon} \right)^\mu P_l(x) dx, \quad (6.78)$$

где $\varepsilon = 1/\sin 2\omega - 1$. Переходя в интеграле (6.78) к переменной $u = 1-x$ и обозначая $\xi = u/\varepsilon$, получим

$$\begin{aligned} \Psi_{\mu}^l(\omega) &= \frac{1}{2} \left(\frac{\varepsilon}{1+\varepsilon} \right)^\mu \mathcal{J}(\varepsilon), \\ \mathcal{J}(\varepsilon) &= \frac{1}{\varepsilon} \int_0^2 \eta_0(\xi) f(u) du, \quad \eta_0(\xi) = (1+\xi)^\mu, \quad f(u) = P_l(1-u) \end{aligned} \quad (6.79)$$

При $\mu < 0$ ядро $\eta_0(\xi)$ в интеграле (6.79) убывает степенным образом при удалении от пика. Его асимптотика при $\xi \rightarrow \infty$ имеет вид

$$\eta_0(\xi) = \sum_{k=1}^n \frac{q_k(\xi)}{\xi^k} + \bar{\eta}_{n+1}(\xi), \quad \bar{\eta}_{n+1}(\xi) = o(\xi^n), \quad \xi \rightarrow \infty \quad (6.80)$$

Для асимптотической оценки интегралов подобного типа в [124, 53] был предложен прием «последовательного разложения ядра и функции нагрузки». Применение такого приема позволяет найти асимптотическое разложение интеграла (6.79) в виде

$$\mathcal{J}(\varepsilon) = \left(f(0) \int_0^{2/\varepsilon} \eta_0(\xi) d\xi + \int_0^2 q_1\left(\frac{u}{\varepsilon}\right) F_1(u) du \right) + \varepsilon \left(f'(0) \int_0^{2/\varepsilon} \eta_1(\xi) d\xi + \int_0^2 q_2\left(\frac{u}{\varepsilon}\right) F_2(u) du \right) + o(\varepsilon). \quad (6.81)$$

Здесь $\eta_1(\xi) = \xi \eta_0(\xi) - q_1(\xi)$, $F_1(u) = (f(u) - f(0))/u$, $F_2(u) = (f(u) - f(0) - f'(0)u)/u^2$.

Вычисляя коэффициенты разложения $\mathcal{J}(\varepsilon)$, для $\Psi_{\mu}^l(\omega)$ найдем

$$\Psi_{\mu}^l(\omega) = A + B\varepsilon^{1+\mu} + C\varepsilon + D\varepsilon^{2+\mu} + O(\varepsilon^2),$$

$$A = \frac{2^\mu}{1+\mu} + \frac{1}{2} \int_0^2 \frac{P_l(1-u)-1}{u^{-\mu}} du, \quad B = -\frac{1}{2(1+\mu)}, \quad (6.82)$$

$$C = -\mu A + 2^{-1+\mu} - \frac{2^\mu \mu}{1+\mu} P'_l(1) + \frac{\mu}{2} \int_0^2 \frac{P_l(1-u)-1 + P'_l(1)u}{u^{1-\mu}} du, \quad D = \frac{1}{2(1+\mu)} \left(\mu - \frac{P'_l(1)}{2+\mu} \right)$$

$$\varepsilon = \varepsilon(\omega) = 1/\sin 2\omega - 1$$

На рисунках 6.1a, 6.1b демонстрируется качество аппроксимации $\Psi_\mu^l(\omega)$ (сплошная кривая) для $l=0$ тремя членами разложения (6.76) (точки) и разложением (6.82) (пунктир) при $\mu = -0.1$ и $\mu = -0.5$. Видно, что значение параметра μ не оказывает влияния на точность аппроксимации. С ростом параметра l ситуация меняется, и трех членов

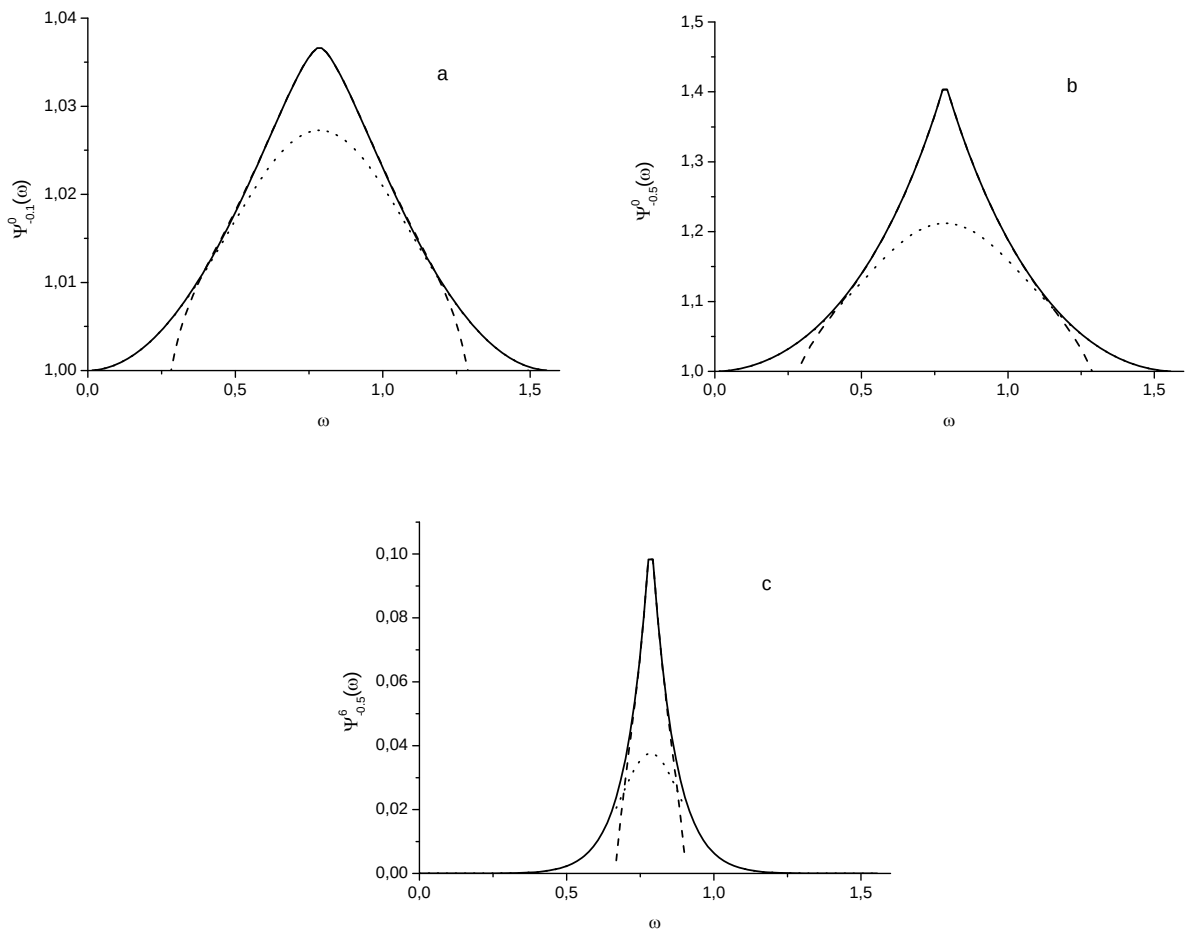


Рисунок 6.1 Ядра $\Psi_\mu^l(\omega)$, рассчитанные по аналитическим формулам (6.72), (6.74) (сплошная кривая) и найденные с помощью разложений (6.76) (точки), (6.82) (пунктир) : a - $\mu = -0.1$, $l = 0$; b - $\mu = -0.5$, $l = 0$; c - $\mu = -0.5$, $l = 6$

разложения (6.76) оказывается недостаточно для описания поведения $\Psi_\mu^l(\omega)$ вне окрестностей $\omega = 0$, $\omega = \pi/2$. На рисунке 6.1c представлено приведенное ядро и его

аппроксимация 20 членами разложения (6.76) и разложением (6.82).

На рисунке 6.2 приведены зависимости $\Psi_{\mu}^l(\omega)$ для $\mu = -0.5$ и различных значений l , найденные по формуле (6.72). Видно, что с ростом l ядра уменьшаются и на концах интервала изменения ω быстро стремятся к нулю. Рисунки 6.3а, 6.3б иллюстрируют зависимость $\Psi_{\mu}^0(\omega)$ от μ , задаваемую формулой (6.74). При $\mu > 0$ ядро $\Psi_{\mu}^0(\omega)$ не превосходит единицы, с ростом μ значение в минимуме уменьшается. Для $\mu < 0$ ядра больше единицы и максимум растет с ростом $|\mu|$.

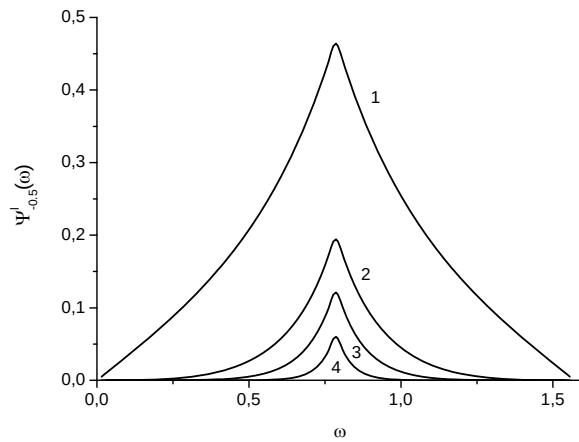


Рисунок 6.2. Ядра $\Psi_{\mu}^l(\omega)$, рассчитанные по аналитическим формулам (6.72) для $\mu = -0.5$ и различных значений l : 1 - $l=1$; 2 - $l=3$; 3 - $l=5$; 4 - $l=10$

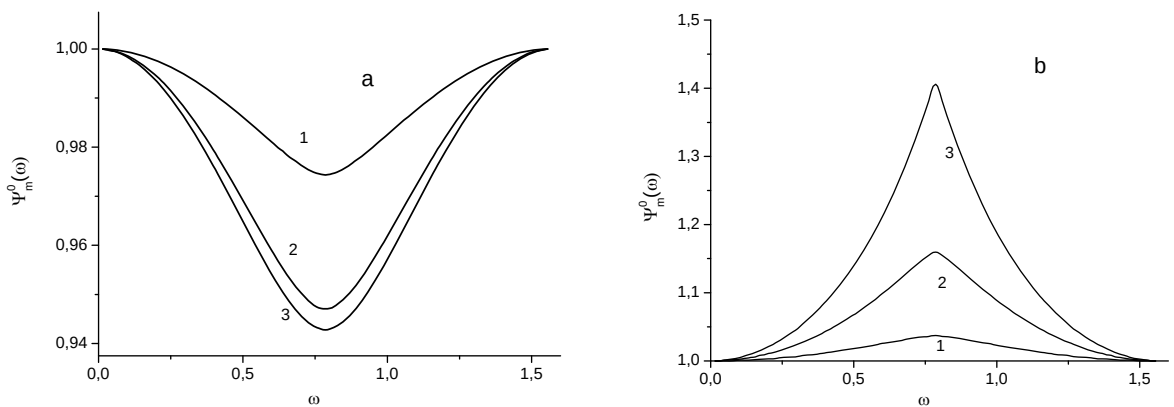


Рисунок 6.3 Ядра $\Psi_{\mu}^0(\omega)$, рассчитанные по аналитическим формулам (6.74) для различных значений μ : а - $\mu=0.1$ (1), $\mu=0.3$ (2), $\mu=0.5$ (3); б - $\mu=-0.1$ (1), $\mu=-0.3$ (2), $\mu=-0.5$ (3).

Полученное выражение (6.74) для $\Psi_\mu^0(\omega)$ позволяет вычислить функцию $\bar{k}(c)$ по формуле (6.60). Заметим, что используя (6.57) можно выразить $\bar{k}(c)$ и через МЭ в виде ряда

$$\bar{k}(c) = \sum_{r=0}^{\infty} S_{1/2}^r(c^2) K_{0,0,0,0}^{(-)r,0} \quad (6.83)$$

Из (6.60), (6.83) следует, что $\bar{k}(c)$ зависит только от скалярной величины (модуля скорости c) и определяется линейными изотропными МЭ. Для модели твердых шаров аналитическая формула для $\bar{k}(c)$ была получена еще Гильбертом в [34] и хорошо известна в кинетической теории. Интересно отметить, что численный расчет $\bar{k}(c)$ с помощью разложения по полиномам Сонина (6.83) показал, что даже при сохранении в разложении пятисот членов удается вычислить $\bar{k}(c)$ только в диапазоне $0 \leq c \leq 9.85$. Численное интегрирование по формуле (6.60) позволяет вычислить эту функцию до $c = 100$.

Подстановка (6.74), (6.70) в (6.60) дает

$$\bar{k}(c) = \frac{1}{\sqrt{\pi}(\mu+1)c} \int_0^\infty \left[(c^2 + c_2^2 + 2cc_2)^{\mu+1} - (c^2 + c_2^2 - 2cc_2)^{\mu+1} \right] e^{-c_2^2} c_2 dc_2 \quad (6.84)$$

Эта формула была использована нами для вычисления $\bar{k}(c)$ для ряда псевдостепенных потенциалов. На рисунке 6.4 приведены зависимости $\bar{k}(c)$ для различных μ , полученные численным интегрированием (6.84). Из рисунка видно, что при положительных μ функции $\bar{k}(c)$ возрастают, а при отрицательных – убывают. Из (6.84) легко получить значение $\bar{k}(0)$, которое оказывается равным

$$\bar{k}(0) = \frac{4}{\sqrt{\pi}} \int_0^\infty c_2^{2\mu+2} e^{-c_2^2} dc_2 \quad (6.85)$$

Интересно отметить, что значения $\bar{k}(0)$ при $\mu = 0.5$ и $\mu = -0.5$ совпадают и равны $2/\sqrt{\pi}$.

Таким образом, на примере исследования интеграла прямых столкновения показано, что использование общих свойств ядер позволяет существенно упростить их вычисление. В случае степенных потенциалов для ядер нелинейного интеграла прямых столкновений выполнено соотношение подобия. Эти ядра выражаются через ядра линейного интегрального оператора $L_G(\vec{v}, \vec{v}_2)$, которые также обладают свойством подобия. При этом ядро линейного интеграла столкновений свойством подобия не обладает. Свойство подобия позволяет представить ядро $L_G(\vec{v}, \vec{v}_2)$ в виде произведения степени от суммы квадратов аргументов на функцию одной переменной. Это существенно упрощает расчет ядра интеграла прямых столкновений. Этот расчет сводится, по существу, к вычислению одной квадратуры, которая в некоторых случаях может быть найдена аналитически, а в остальных

хорошо аппроксимируется полученными разложениями. Показано, что уходящая часть линейного интеграла столкновений описывается функцией

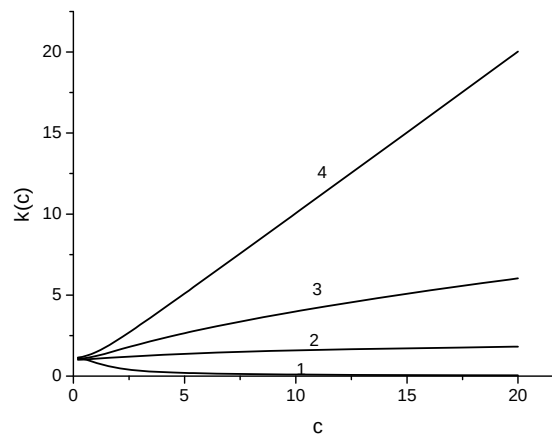


Рисунок 6.4 Зависимости $\bar{k}(c)$, рассчитанные по формуле (6.84) для различных значений μ : 1 - $\mu = -0.5$, 2 - $\mu = 0.1$, 3 - $\mu = 0.3$, 4 - $\mu = 0.5$

$k(v)$, которая может быть найдена интегрированием ядра $\bar{L}_G^0(c, c_2)$ с максвелловским распределением. Ядро $\bar{L}_G^0(c, c_2)$ в случае степенных потенциалов находится аналитически, а выражение для $k(v)$ сводится к одной квадратуре.

6.3 Связи между ядрами нелинейного интеграла столкновений

В предыдущем параграфе были подробно рассмотрены ядра интеграла прямых столкновений. Показано, что построение этих ядер не представляет особых затруднений, поскольку они выражаются через ядра некоторых линейных операторов, просто связанных с полным сечением рассеяния. При этом отыскание ядер интеграла прямых столкновений сводится к вычислению одной квадратуры. Отыскание ядер нелинейного интеграла обратных столкновений представляет гораздо большую трудность. Как показано в параграфе 4.2, такие ядра могут быть найдены, если известны МЭ интеграла обратных столкновений. Построение ядер тогда осуществляется вычислением трехкратной суммы от произведения МЭ на полиномы Сонина в соответствии с формулой (4.37). Реализация такого расчета для произвольных индексов l, l_1, l_2 является непростой задачей. В связи с этим представляет интерес отыскание альтернативных способов расчета ядер. Сложившаяся ситуация весьма напоминает ситуацию с расчетом МЭ, когда прямое построение МЭ сводилось к вычислению многократных сумм, и было практически нереализуемо при больших значениях индексов. При этом оказалось возможным находить МЭ из рекуррентных соотношений,

полученных на основе инвариантности интеграла столкновений по отношению к выбору базиса. Поскольку ядра нелинейного интеграла столкновений связаны с МЭ, то есть надежда, что инвариантность интеграла столкновений позволит установить и некоторые связи между ядрами. Выводу этих связей и посвящен настоящий параграф.

Рассмотрим ФР в системе отсчета, движущейся со скоростью u в направлении $\vec{e}_z$. В качестве единицы скорости выберем тепловую скорость, $v_T = \sqrt{2kT/m}$, соответствующую некоторой температуре T . Тогда безразмерная скорость $\vec{c}$ запишется в виде $\vec{c} = \sqrt{\alpha}(\vec{v} - u\vec{e}_z)$, $\alpha = m/(2kT)$ ($\vec{v}$ - скорость частицы в неподвижной системе отсчета). Интеграл столкновений, описывающий скорость изменения ФР частиц сорта «а» за счет взаимодействия с частицами «б», в безразмерных скоростях принимает вид

$$\left(\frac{\partial f^a(\vec{c})}{\partial t} \right)_{col}^{(a,b)} = \bar{I}(f^a, f^b) = \iint G(\vec{c}, \vec{c}_1, \vec{c}_2) f^a(\vec{c}_1) f^b(\vec{c}_2) d\vec{c}_1 d\vec{c}_2 \quad (6.86)$$

Здесь $f^a(\vec{c})$, $f^b(\vec{c})$ - функции распределения частиц «а» и «б». Как показано в параграфе 4.2, не умаляя общности изучение ядер можно проводить для осесимметричного случая (см. (4.36), (4.37)). Сферические гармоники при этом переходят в полиномы Лежандра, и разложение ФР имеет вид

$$f^{a,b}(\vec{c}) = \sum_l f_l^{a,b}(c) P_l(x) \quad (6.87)$$

Здесь коэффициенты разложения $f_l^{a,b}(c)$ зависят только от модуля скорости, $x = \cos \theta$, θ - угол между скоростью $\vec{c}$ и осью $\vec{e}_z$. Подставляя (6.87) в (6.86) и раскладывая интеграл столкновений по полиномам Лежандра, получим

$$\left(\frac{\partial f^a(\vec{c})}{\partial t} \right)_{col}^{(a,b)} = \sum_{l, l_1, l_2} P_l(x) \left(\int_0^\infty \int_0^\infty G_{l, l_1, l_2}^l(c, c_1, c_2) f_{l_1}^a(c_1) f_{l_2}^b(c_2) c_1^2 c_2^2 dc_1 dc_2 \right) \quad (6.88)$$

В том случае, когда сечение рассеяния зависит только от модуля относительной скорости сталкивающихся частиц и угла рассеяния, в силу обобщенной теоремы Гекке ядра $G_{l, l_1, l_2}^l(c, c_1, c_2)$ могут быть отличны от нуля только при значениях индексов

$$l + l_1 + l_2 = 2k \quad \text{и} \quad |l_1 - l_2| \leq l \leq l_1 + l_2. \quad (6.89)$$

Рассмотрим теперь ФР в двух различных системах отсчета, движущихся со скоростями u_0 , u_1 вдоль оси $\vec{e}_z$. Переход от одной системы отсчета к другой меняет вектор безразмерной скорости. В системе со скоростью u_0 модуль скорости обозначим c , а косинус угла между $\vec{c}$ и $\vec{e}_z$ - x . В другой системе отсчета те же величины принимают значение c' , x' . Величины c , x и c' , x' связаны между собой:

$$c^2 = c_z^2 + c_\rho^2, \quad c'^2 = c_z'^2 + c_\rho'^2, \quad c'_z = c_z - \chi, \quad c_z = cx, \quad c'_z = c'x' \quad (6.90)$$

Здесь $\chi = u_1 - u_0$. Поскольку в системе со скоростью u_0 разложение ведется по полиномам Лежандра $P_l(x)$, а в системе со скоростью u_1 - по $P_l(x')$, то переходу от одной системы отсчета к другой соответствует переход к другому базису. Приравнивая представления ФР в разных базисах, имеем

$$\sum_l f_l(c) P_l(x) = \sum_\lambda F_\lambda(c') P_\lambda(x'). \quad (6.91)$$

Умножим равенство (6.91) скалярно на

$$p_\lambda(x') = P_\lambda(x') / \pi_\lambda, \quad (6.92)$$

где $\pi_\lambda = 2/(2\lambda + 1)$. Это дает связь между коэффициентами разложения ФР в разных базисах

$$F_\lambda(c') = \sum_{l=0}^{\infty} \hat{\Psi}_{\lambda,l}(\chi; c') f_l(c). \quad (6.93)$$

Оператор перехода $\hat{\Psi}_{\lambda,l}(\chi; c')$ представляет собой интегральный оператор

$$\hat{\Psi}_{\lambda,l}(\chi; c') f_l(c) = \int_{-1}^1 p_\lambda(x') P_l(x) f_l(c) dx'. \quad (6.94)$$

Его действие на коэффициенты разложения $f_l(c)$ вычисляется при подстановке зависимости c и x от c' , x'

$$c = \sqrt{(c')^2 + 2\chi c'x' + \chi^2} \quad (6.95)$$

$$x = (c'x' + \chi) / \sqrt{(c')^2 + 2\chi c'x' + \chi^2} \quad (6.96)$$

в интеграл (6.94). Заметим, что когда скорости систем отсчета совпадают, действие оператора $\hat{\Psi}_{\lambda,l}(\chi; c')$ на коэффициенты разложения $f_l(c)$ сводится к умножению на символ Кронекера

$$\hat{\Psi}_{\lambda,l}(\chi; c') f_l(c) \Big|_{\chi=0} = \delta_{\lambda,l} f_l(c). \quad (6.97)$$

Из (6.91) легко определить и обратный оператор, действие которого записывается в виде

$$f_l(c) = \sum_{\lambda=0}^{\infty} \hat{\Psi}_{l,\lambda}(-\chi; c) F_\lambda(c'), \quad (6.98)$$

$$\hat{\Psi}_{l,\lambda}(-\chi; c) F_\lambda(c') = \int_{-1}^1 p_l(x) P_\lambda(x') F_\lambda(c') dx. \quad (6.99)$$

Очевидно, что

$$\hat{\Psi}_{l,\lambda}(-\chi; c) F_\lambda(c') \Big|_{\chi=0} = \delta_{l,\lambda} F_\lambda(c'). \quad (6.100)$$

В дальнейшем нам понадобится производная от оператора перехода по разности скоростей χ . Используя определение оператора перехода (6.94), имеем

$$\begin{aligned} \left. \frac{\partial}{\partial \chi} (\hat{\Psi}_{\lambda,l}(\chi; c') f_l(c)) \right|_{\chi=0} &= \\ &= \int_{-1}^1 p_{\lambda}(x') \left(\frac{dP_l(x)}{dx} \frac{\partial x}{\partial \chi} \right) \bigg|_{\chi=0} f_l(c) \bigg|_{\chi=0} dx' + \int_{-1}^1 p_{\lambda}(x') \left(P_l(x) \frac{\partial c}{\partial \chi} \right) \bigg|_{\chi=0} \frac{df_l(c)}{dc} \bigg|_{\chi=0} dx'. \end{aligned} \quad (6.101)$$

Частные производные $\partial c / \partial \chi$, $\partial x / \partial \chi$ вычисляются из (6.95), (6.96) и дают

$$\frac{\partial x}{\partial \chi} = \frac{c'^2 (1 - x'^2)}{(c'^2 + 2\chi c'x' + \chi^2)^{3/2}}, \quad (6.102)$$

$$\frac{\partial c}{\partial \chi} = \frac{c'x' + \chi}{\sqrt{c'^2 + 2\chi c'x' + \chi^2}}. \quad (6.103)$$

Подстановка этих выражений в (6.101) приводит к заключению, что производная оператора перехода представляет собой дифференциальный оператор первого порядка

$$\left. \frac{\partial}{\partial \chi} (\hat{\Psi}_{\lambda,l}(\chi; c')) \right|_{\chi=0} = A_{\lambda,l}^{(1)} + A_{\lambda,l}^{(2)} \frac{d}{dc}. \quad (6.104)$$

Коэффициенты $A_{\lambda,l}^{(1)}$, $A_{\lambda,l}^{(2)}$ выражаются через полиномы Лежандра

$$A_{\lambda,l}^{(1)} = -\frac{1}{c} \left(\int_{-1}^1 p_{\lambda}(x') (x'^2 - 1) \frac{dP_l(x')}{dx'} dx' \right), \quad (6.105)$$

$$A_{\lambda,l}^{(2)} = \int_{-1}^1 p_{\lambda}(x') x' P_l(x') dx'. \quad (6.106)$$

Пользуясь свойствами полиномов Лежандра [73]

$$(x^2 - 1) \frac{dP_l(x)}{dx} = \frac{(l+1)l}{2l+1} (P_{l+1}(x) - P_{l-1}(x)), \quad (6.107)$$

$$xP_l(x) = \frac{l+1}{2l+1} P_{l+1}(x) + \frac{l}{2l+1} P_{l-1}(x), \quad (6.108)$$

можно легко вычислить интегралы в (6.105), (6.106) и найти окончательное выражение для производной от оператора перехода

$$\left. \frac{\partial \hat{\Psi}_{\lambda,l}(\chi; c')}{\partial \chi} \right|_{\chi=0} = \delta_{l,\lambda-1} \hat{B}_{\lambda}^{(1)}(c) + \delta_{l,\lambda+1} \hat{B}_{\lambda}^{(2)}(c). \quad (6.109)$$

Здесь операторы $\hat{B}_{\lambda}^{(1)}(c)$, $\hat{B}_{\lambda}^{(2)}(c)$ задаются выражениями

$$\hat{B}_{\lambda}^{(1)}(c) = \frac{\lambda}{2\lambda-1} \left(\frac{d}{dc} - \frac{\lambda-1}{c} \right), \quad (6.110)$$

$$\hat{B}_{\lambda}^{(2)}(c) = \frac{\lambda+1}{2\lambda+3} \left(\frac{d}{dc} + \frac{\lambda+2}{c} \right). \quad (6.111)$$

Таким образом, производная от оператора перехода $\left(\partial \hat{\Psi}_{\lambda,l}(\chi; c') / \partial \chi \right)_{\chi=0}$ представляет собой линейную комбинацию линейных дифференциальных операторов, один из которых увеличивает, а другой уменьшает индекс на единицу.

Найдем теперь связи между ядрами в разных базисах. Интеграл столкновений, как и ФР, может быть представлен в разных базисах. Приравнивая его представления в разных базисах, найдем

$$\sum_{l=0}^{\infty} \left(\frac{\partial f_l^a(c)}{\partial t} \right) \Big|_{col}^{(a,b)} P_l(x) = \sum_{\lambda=0}^{\infty} \left(\frac{\partial F_{\lambda}^a(c')}{\partial t} \right) \Big|_{col}^{(a,b)} P_{\lambda}(x'). \quad (6.112)$$

Коэффициенты разложения в разных базисах связаны оператором перехода, поэтому

$$\left(\frac{\partial F_{\lambda}^a(c')}{\partial t} \right) \Big|_{col}^{(a,b)} = \sum_{l=0}^{\infty} \hat{\Psi}_{\lambda,l}(\chi; c') \left(\frac{\partial f_l^a(c)}{\partial t} \right) \Big|_{col}^{(a,b)}. \quad (6.113)$$

В каждом из базисов интеграл столкновений выражается через ядра, т.е. имеют место равенства

$$\left(\frac{\partial F_{\lambda}^a(c')}{\partial t} \right) \Big|_{col}^{(a,b)} = \sum_{\lambda_1, \lambda_2} \int_0^{\infty} \int_0^{\infty} G_{\lambda_1, \lambda_2}^{\lambda}(c', c'_1, c'_2) F_{\lambda_1}^a(c'_1) F_{\lambda_2}^b(c'_2) (c'_1)^2 dc'_1 (c'_2)^2 dc'_2 \quad (6.114)$$

$$\left(\frac{\partial f_l^a(c)}{\partial t} \right) \Big|_{col}^{(a,b)} = \sum_{l_1, l_2} \int_0^{\infty} \int_0^{\infty} G_{l_1, l_2}^l(c, c_1, c_2) f_{l_1}^a(c_1) f_{l_2}^b(c_2) (c_1)^2 dc_1 (c_2)^2 dc_2 \quad (6.115)$$

Найдем теперь выражение для коэффициентов разложения интеграла столкновений в базисе u_1 через ядра $G_{l_1, l_2}^l(c, c_1, c_2)$. Для этого подставим связь представлений ФР в базисах u_0 и u_1 (6.98)

$$f_l^a(c) = \sum_{\lambda=0}^{\infty} \hat{\Psi}_{l, \lambda}(-\chi; c) F_{\lambda}^a(c') \quad (6.116)$$

в (6.115), а (6.115) в (6.113). Это дает

$$\begin{aligned} \left(\frac{\partial F_{\lambda}^a(c')}{\partial t} \right) \Big|_{col}^{(a,b)} &= \\ &= \sum_{l, l_1, l_2} \int_0^{\infty} \int_0^{\infty} \hat{\Psi}_{\lambda, l}(\chi; c') G_{l_1, l_2}^l(c, c_1, c_2) \sum_{\lambda_1, \lambda_2} \hat{\Psi}_{l_1, \lambda_1}(-\chi; c_1) F_{\lambda_1}^a(c'_1) \hat{\Psi}_{l_2, \lambda_2}(-\chi; c_2) F_{\lambda_2}^b(c'_2) c_1^2 dc_1 c_2^2 dc_2 \end{aligned} \quad (6.117)$$

Рассмотрим интеграл по c_1 . Пользуясь определением оператора перехода, запишем

$$\int_0^{\infty} G_{l_1, l_2}^l(c, c_1, c_2) \hat{\Psi}_{l_1, \lambda_1}(-\chi; c_1) F_{\lambda_1}^a(c'_1) c_1^2 dc_1 = \int_{-1}^1 \int_0^1 G_{l_1, l_2}^l(c, c_1, c_2) (p_{l_1}(x_1) P_{\lambda_1}(x'_1)) F_{\lambda_1}^a(c'_1) c_1^2 dc_1 dx_1 =$$

$$= \int_0^1 \int_{-1}^1 G_{l_1, l_2}^l(c, c_1, c_2) (p_{l_1}(x_1) P_{\lambda_1}(x'_1)) F_{\lambda_1}^a(c'_1) c_1'^2 dc'_1 dx'_1 \quad (6.118)$$

В последнем равенстве учтено, что элементы объема $c_1^2 dc_1 dx_1$ и $c_1'^2 dc'_1 dx'_1$ равны. Заметим, что интегрирование по x'_1 в (6.118) можно представить как действие оператора перехода на ядро $G_{l_1, l_2}^l(c, c_1, c_2)$, рассматриваемое как функция переменной c_1

$$\int_{-1}^1 G_{l_1, l_2}^l(c, c_1, c_2) (p_{l_1}(x_1) P_{\lambda_1}(x'_1)) dx'_1 = \frac{\pi_{\lambda_1}}{\pi_{l_1}} \hat{\Psi}_{\lambda_1, l_1}(\chi; c'_1) G_{l_1, l_2}^l(c, c_1, c_2). \quad (6.119)$$

Аналогичным образом преобразуем и интеграл по c_2 в (6.117). Приравнявая исходное и преобразованное выражения для коэффициентов разложения интеграла столкновений в базисе u_1 , найдем

$$\sum_{\lambda_1, \lambda_2} \int_0^\infty \int_0^\infty \left(G_{\lambda_1, \lambda_2}^\lambda(c', c'_1, c'_2) - \sum_{l, l_1, l_2} \hat{\Psi}_{\lambda, l}(\chi; c') \frac{\pi_{\lambda_1}}{\pi_{l_1}} \hat{\Psi}_{\lambda_1, l_1}(\chi; c'_1) \frac{\pi_{\lambda_2}}{\pi_{l_2}} \hat{\Psi}_{\lambda_2, l_2}(\chi; c'_2) G_{l_1, l_2}^l(c, c_1, c_2) \right) \times \\ F_{\lambda_1}^a(c'_1) F_{\lambda_2}^b(c'_2) c_1'^2 dc'_1 c_2'^2 dc'_2 = 0 \quad (6.120)$$

Вследствие произвольности ФР ядра в базисах u_1 и u_0 оказываются связанными соотношением

$$G_{\lambda_1, \lambda_2}^\lambda(c', c'_1, c'_2) = \sum_{l, l_1, l_2} \hat{\Psi}_{\lambda, l}(\chi; c') \frac{\pi_{\lambda_1}}{\pi_{l_1}} \hat{\Psi}_{\lambda_1, l_1}(\chi; c'_1) \frac{\pi_{\lambda_2}}{\pi_{l_2}} \hat{\Psi}_{\lambda_2, l_2}(\chi; c'_2) G_{l_1, l_2}^l(c, c_1, c_2) \quad (6.121)$$

Это соотношение является следствием инвариантности интеграла столкновений по отношению к выбору базиса.

Рассмотрим теперь связи между ядрами в одном базисе. Левая часть в (6.121) не зависит от разности скоростей базисов χ , в то время как правая часть зависит от нее через операторы перехода. Дифференцируя по χ и полагая $\chi = 0$, найдем

$$\sum_l \frac{\partial \hat{\Psi}_{\lambda, l}(\chi; c')}{\partial \chi} \Big|_{\chi=0} G_{\lambda_1, \lambda_2}^l(c, c'_1, c'_2) + \sum_{l_1} \frac{\pi_{\lambda_1}}{\pi_{l_1}} \frac{\partial \hat{\Psi}_{\lambda_1, l_1}(\chi; c'_1)}{\partial \chi} \Big|_{\chi=0} G_{l_1, \lambda_2}^\lambda(c', c_1, c'_2) + \\ \sum_{l_2} \frac{\pi_{\lambda_2}}{\pi_{l_2}} \frac{\partial \hat{\Psi}_{\lambda_2, l_2}(\chi; c'_2)}{\partial \chi} \Big|_{\chi=0} G_{\lambda_1, l_2}^\lambda(c', c'_1, c_2) = 0. \quad (6.122)$$

Подставляя в (6.122) выражение для производной оператора перехода (6.109), получим соотношение, связывающее ядра в одном базисе

$$\hat{B}_l^{(1)}(c) G_{l_1, l_2}^{l-1}(c, c_1, c_2) + \hat{B}_l^{(2)}(c) G_{l_1, l_2}^{l+1}(c, c_1, c_2) + \hat{B}_{l_1}^{(3)}(c_1) G_{l_1+1, l_2}^l(c, c_1, c_2) + \\ + \hat{B}_{l_1}^{(4)}(c_1) G_{l_1-1, l_2}^l(c, c_1, c_2) + \hat{B}_{l_2}^{(3)}(c_2) G_{l_1, l_2+1}^l(c, c_1, c_2) + \hat{B}_{l_2}^{(4)}(c_2) G_{l_1, l_2-1}^l(c, c_1, c_2) = 0 \quad (6.123)$$

Здесь $\hat{B}_{l_i}^{(k)}(c_i)$ - линейные дифференциальные операторы, действующие на переменную c_i и имеющие вид

$$\begin{aligned}\hat{B}_l^{(1)}(c) &= \frac{l}{2l-1} \left(\frac{\partial}{\partial c} - \frac{l-1}{c} \right), \quad \hat{B}_l^{(2)}(c) = \frac{l+1}{2l+3} \left(\frac{\partial}{\partial c} + \frac{l+2}{c} \right), \\ \hat{B}_l^{(3)}(c) &= \frac{l+1}{2l+1} \left(\frac{\partial}{\partial c} + \frac{l+2}{c} \right), \quad \hat{B}_l^{(4)}(c) = \frac{l}{2l+1} \left(\frac{\partial}{\partial c} - \frac{l-1}{c} \right).\end{aligned}\quad (6.124)$$

Система уравнений (6.123) представляет собой аналог алгебраических связей, полученных для МЭ в [49].

6.4 Рекуррентная процедура

На основе полученных соотношений оказывается возможным построить рекуррентную процедуру последовательного определения ядер. Заменим в (6.123) $l_2 + 1$ на l_2 и переупорядочим члены следующим образом

$$\begin{aligned}\hat{B}_{l_2-1}^{(3)}(c_2)G_{l_1, l_2}^l(c, c_1, c_2) + \hat{B}_l^{(2)}(c)G_{l_1, l_2-1}^{l+1}(c, c_1, c_2) + \hat{B}_{l_1}^{(3)}(c_1)G_{l_1+1, l_2-1}^l(c, c_1, c_2) = \\ = -\hat{B}_l^{(1)}(c)G_{l_1, l_2-1}^{l-1}(c, c_1, c_2) - \hat{B}_{l_1}^{(4)}(c_1)G_{l_1-1, l_2-1}^l(c, c_1, c_2) - \hat{B}_{l_2-1}^{(4)}(c_2)G_{l_1, l_2-2}^l(c, c_1, c_2)\end{aligned}\quad (6.125)$$

Для построения рекуррентной процедуры удобно перейти от индексов l, l_1, l_2 к параметрам

$$\lambda = (l + l_1 + l_2)/2, \quad \tau = (l - l_1 + l_2)/2, \quad \nu = l_2. \quad (6.126)$$

В силу обобщенной теоремы Гекке сумма индексов у ненулевых ядер четная, поэтому параметры λ и τ целые. Остальные утверждения обобщенной теоремы Гекке эквивалентны неравенствам $0 \leq \tau \leq \nu \leq \lambda$. Ясно, что каждая тройка параметров λ, τ, ν однозначно определяет индексы l, l_1, l_2 :

$$l = \lambda - \nu + \tau, \quad l_1 = \lambda - \tau, \quad l_2 = \nu. \quad (6.127)$$

Выпишем значения параметров λ, τ, ν для всех ядер, входящих в соотношение (6.125)

i	1	2	3	4	5	6
λ_i	λ	λ	λ	$\lambda - 1$	$\lambda - 1$	$\lambda - 1$
τ_i	τ	τ	$\tau - 1$	$\tau - 1$	τ	$\tau - 1$
ν_i	ν	$\nu - 1$	$\nu - 1$	$\nu - 1$	$\nu - 1$	$\nu - 2$

Таблица 6.1. Значения параметров λ, τ, ν для всех ядер, входящих в соотношение (6.125).

(таблица 6.1). Поскольку обобщенная теорема Гекке справедлива для каждого ядра, то при фиксированном λ индекс τ меняется в пределах

$$0 \leq \tau \leq \lambda, \quad (6.128)$$

а индекс ν принимает значения

$$\begin{aligned} 1 \leq \nu \leq \lambda & \quad \text{при } \tau = 0 \\ \tau \leq \nu \leq \lambda + 1 & \quad \text{при } \tau \neq 0 \end{aligned} \quad (6.129)$$

Таким образом, может быть получен набор соотношений, связывающий ядра с параметром λ (и различными τ и ν) и ядра с параметром $\lambda - 1$. Это может служить основой для построения рекуррентной процедуры.

Подсчитаем, прежде всего, количество неизвестных ядер на слое λ , т.е. ядер с индексами l, l_1 и l_2 такими, что $l + l_1 + l_2 = 2\lambda$. Пусть $l = 0$. Тогда сумма индексов l_1 и l_2 должна быть равна 2λ и число пар таких индексов есть $2\lambda + 1$. Для $l = 1$ число пар l_1 и l_2 , таких, что $l_1 + l_2 = 2\lambda - 1$, есть 2λ , и т.д. Таким образом, полное число ядер на слое λ , $N_k(\lambda)$, есть сумма чисел всех пар индексов l_1 и l_2 для всех возможных значений l , т.е.

$$N_k(\lambda) = \sum_{i=1}^{2\lambda+1} i = \frac{(2\lambda+2)(2\lambda+1)}{2}. \text{ Согласно обобщенной теореме Гекке, ядра могут быть}$$

отличны от нуля только если $|l_1 - l_2| \leq l \leq l_1 + l_2$. Следовательно, при $l > l_1 + l_2$ и $l < |l_1 - l_2|$ ядра обращаются в ноль. Поскольку $l = 2\lambda - l_1 - l_2$, то первое неравенство дает $\lambda > l_1 + l_2$.

Суммируя числа пар индексов l_1 и l_2 , составляющих в сумме величину $\alpha < \lambda$, находим

$$N_{kn1}(\lambda) = \sum_{\alpha=0}^{\lambda-1} (\alpha+1) = \frac{(\lambda+1)\lambda}{2}.$$

Определим теперь число ядер, удовлетворяющих второму неравенству. Пусть $l_1 > l_2$, тогда $l < l_1 - l_2$ или $2l_1 > l + l_1 + l_2 = 2\lambda$. Для каждого значения l_1 , удовлетворяющего этому неравенству, имеется $2\lambda - l_1 + 1$ пар индексов l и l_2 , в сумме дающих $2\lambda - l_1$. Поэтому для

всех $l_1 > \lambda$ сумма чисел таких пар будет $N_{kn2}(\lambda) = \sum_{l_1=\lambda+1}^{2\lambda} (2\lambda - l_1 + 1) = \frac{(\lambda+1)\lambda}{2}$. Аналогичная

оценка справедлива и для случая $l_2 > l_1$: $N_{kn3}(\lambda) = \frac{(\lambda+1)\lambda}{2}$. Следовательно, полное число

нулевых ядер есть $N_{kn}(\lambda) = N_{kn1}(\lambda) + N_{kn2}(\lambda) + N_{kn3}(\lambda) = \frac{3(\lambda+1)\lambda}{2}$. Число ненулевых ядер

тогда есть $N_k(\lambda) - N_{kn}(\lambda) = N_{nonk}(\lambda) = \frac{(\lambda+1)(\lambda+2)}{2}$.

Для определения числа соотношений введем, прежде всего, их нумерацию. Будем считать, что соотношению (6.125) соответствует набор параметров $(l, l_1, l_2 - 1)$. В левую часть соотношений (6.125) входят ядра, сумма индексов которых на единицу больше суммы $l + l_1 + l_2 - 1$. Поэтому, если эти ядра соответствуют слою λ , то соотношения соответствуют слою $\lambda - 1/2$. Их число будет таким же, как и число ядер на слое $\lambda - 1/2$, т.е. $N_{rel}(\lambda) = N_k(\lambda - 1/2) = \frac{2\lambda(2\lambda + 1)}{2}$. Среди этих соотношений есть «нулевые» соотношения, т.е.

тождества, в правых и левых частях которых стоят нули. Число «ненулевых» соотношений можно найти из диапазонов изменения параметров τ и ν (6.128), (6.129). Это дает

$$N_{nonrel}(\lambda) = \lambda + \sum_{\tau=1}^{\lambda} (\lambda + 2 - \tau) = \frac{\lambda(\lambda + 5)}{2}.$$

Итак,

$$\text{полное число ядер} \quad N_k(\lambda) = \frac{(2\lambda + 2)(2\lambda + 1)}{2},$$

$$\text{число нулевых (по ОТГ) ядер} \quad N_{kn}(\lambda) = \frac{3(\lambda + 1)\lambda}{2},$$

$$\text{число ненулевых ядер} \quad N_{nonk}(\lambda) = \frac{(\lambda + 1)(\lambda + 2)}{2},$$

$$\text{полное число соотношений} \quad N_{rel}(\lambda) = \frac{2\lambda(2\lambda + 1)}{2},$$

$$\text{число «ненулевых» соотношений} \quad N_{nonrel}(\lambda) = \frac{\lambda(\lambda + 5)}{2}.$$

Таким образом, число соотношений для определения ядер на слое λ оказывается больше, чем число неизвестных, на $\lambda - 1$. Причиной появления дополнительных соотношений является ОТГ, согласно которой ядра с индексами, не удовлетворяющими неравенству $|l_1 - l_2| \leq l \leq l_1 + l_2$, обращаются в ноль.

Оставляя пока в стороне вопрос об анализе дополнительных соотношений, опишем процедуру построения ядер на слое λ , при условии, что ядра на предыдущих слоях известны. Эта процедура похожа на соответствующую процедуру построения МЭ, изложенную в [49]. Прежде чем переходить к непосредственному описанию алгоритма отметим, что, в отличие от алгебраических связей, найденных для МЭ из условия инвариантности интеграла столкновений, связи для ядер, полученные в предыдущем параграфе, носят дифференциальный характер. Поэтому для однозначного определения ядер необходимо дополнить соотношения (6.125) граничными условиями. Граничные условия для ядер $G_{l_1, l_2}^l(c, c_1, c_2)$ можно получить из следующих соображений. Заметим, что ядро от

векторных аргументов $G(\vec{c}, \vec{c}_1, \vec{c}_2)$ при $\vec{c} = c\vec{\Omega} = 0$ не зависит от $\vec{\Omega}$, поэтому при вычислении $G_{l_1, l_2}^l(c, c_1, c_2)$ согласно (6.16) скалярное произведение $G(0, \vec{c}_1, \vec{c}_2)$ на полином Лежандра $P_l(\cos \theta)$ оказывается равным нулю для $l \neq 0$. Отсюда следует, что

$$G_{l_1, l_2}^l(0, c_1, c_2) = 0 \text{ при } l \neq 0. \quad (6.130)$$

Аналогичным образом можно показать, что

$$G_{l_1, l_2}^l(c, 0, c_2) = 0 \text{ при } l_1 \neq 0, \quad (6.131)$$

$$G_{l_1, l_2}^l(c, c_1, 0) = 0 \text{ при } l_2 \neq 0. \quad (6.132)$$

Перейдем теперь к описанию процедуры построения ядер по соотношению (6.125). Будем считать, что ядра с индексами l, l_1, l_2 , удовлетворяющими неравенству $l + l_1 + l_2 < 2\lambda$, известны. Перепишем соотношения (6.125), заменяя индексы l, l_1, l_2 параметрами λ, τ и ν :

$$\begin{aligned} \hat{B}_{\nu-1}^{(3)}(c_2)G_{\lambda-\tau, \nu}^{\lambda+\tau-\nu}(c, c_1, c_2) + \hat{B}_{\lambda+\tau-\nu}^{(2)}(c)G_{\lambda-\tau, \nu-1}^{\lambda+\tau-\nu+1}(c, c_1, c_2) + \hat{B}_{\lambda-\tau}^{(3)}(c_1)G_{\lambda-\tau+1, \nu-1}^{\lambda+\tau-\nu}(c, c_1, c_2) = \\ = -\hat{B}_{\lambda+\tau-\nu}^{(1)}(c)G_{\lambda-\tau, \nu-1}^{\lambda+\tau-\nu-1}(c, c_1, c_2) - \hat{B}_{\lambda-\tau}^{(4)}(c_1)G_{\lambda-\tau-1, \nu-1}^{\lambda+\tau-\nu}(c, c_1, c_2) - \hat{B}_{\nu-1}^{(4)}(c_2)G_{\lambda-\tau, \nu-2}^{\lambda+\tau-\nu}(c, c_1, c_2) \end{aligned} \quad (6.133)$$

Покажем, прежде всего, что рассматривая связи (6.133), соответствующие $\tau = 0$ и $\tau = 1$ и перебирая все возможные ν , получим замкнутую систему $2\lambda + 1$ уравнений для определения $2\lambda + 1$ неизвестных ядер. При $\tau = 0$, в соответствии с (6.129), параметр ν меняется в диапазоне $1 \leq \nu \leq \lambda$. Перебирая все значения ν из этого диапазона, находим

$$\begin{aligned} B_0^{(3)}(c_2)G_{\lambda, 1}^{\lambda-1} &= -B_{\lambda-1}^{(2)}(c)G_{\lambda, 0}^{\lambda} - B_{\lambda}^{(4)}(c_1)G_{\lambda-1, 0}^{\lambda-1} \\ B_1^{(3)}(c_2)G_{\lambda, 2}^{\lambda-2} &= -B_{\lambda-2}^{(2)}(c)G_{\lambda, 1}^{\lambda-1} - B_{\lambda}^{(4)}(c_1)G_{\lambda-1, 1}^{\lambda-2} \\ &\dots\dots\dots \\ B_{i-1}^{(3)}(c_2)G_{\lambda, i}^{\lambda-i} &= -B_{\lambda-i}^{(2)}(c)G_{\lambda, i-1}^{\lambda-i+1} - B_{\lambda}^{(4)}(c_1)G_{\lambda-1, i-1}^{\lambda-i} \\ &\dots\dots\dots \\ B_{\lambda-1}^{(3)}(c_2)G_{\lambda, \lambda}^0 &= -B_0^{(2)}(c)G_{\lambda, \lambda-1}^1 - B_{\lambda}^{(4)}(c_1)G_{\lambda-1, \lambda-1}^0 \end{aligned} \quad (6.134)$$

Каждое из этих соотношений связывает ядро $G_{\lambda, i}^{\lambda-i}$ с ядром $G_{\lambda, i-1}^{\lambda-i+1}$ (поскольку вторые члены справа известны). Отметим, что для ядер $G_{\lambda, i}^{\lambda-i}$ при $1 \leq i \leq \lambda$, как отмечалось выше, выполняется граничное условие

$$G_{\lambda, i}^{\lambda-i}(c, c_1, c_2) \Big|_{c_2=0} = 0. \quad (6.135)$$

Операторы $B_{i-1}^{(3)}(c_2)$, рассматриваемые на классе функций, обращающихся в ноль при $c_2 = 0$, обратимы. Обозначим обратные к $B_{i-1}^{(3)}(c_2)$ операторы через $(B_{i-1}^{(3)}(c_2))^{-1}$ и подействуем ими на

Запишем первое уравнение получившейся цепочки в виде

$$G_{\lambda,1}^{\lambda-1} = L_{\lambda}(0,1)G_{\lambda,0}^{\lambda} + M_{\lambda}(0,1) \quad (6.136)$$

Здесь

$$L_\lambda(0,1) = -(B_0^{(3)}(c_2))^{-1} B_{\lambda-1}^{(2)}(c), \quad M_\lambda(0,1) = -(B_0^{(3)}(c_2))^{-1} B_\lambda^{(4)}(c_1) G_{\lambda-1,0}^{\lambda-1} \quad (6.137)$$

Подставляя (6.136) во второе уравнение цепочки, найдем

$$G_{\lambda,2}^{\lambda-2} = L_{\lambda}(0,2)G_{\lambda,0}^{\lambda} + M_{\lambda}(0,2) \quad (6.138)$$

$$L_2(0,2) = (-B_1^{(3)}(c_2))^{-1} B_{2-2}^{(2)}(c) L_2(0,1),$$

$$M_{\lambda}(0,2)=(-B_1^{(3)}(c_2))^{-1}B_{\lambda-2}^{(2)}(c)M_{\lambda}(0,1)+B_{\lambda}^{(4)}(c_1)G_{\lambda-1,1}^{\lambda-2} \quad (6.139)$$

Продолжая процесс, получим выражение ядер $G_{\lambda,i}^{\lambda-i}$, $1 \leq i \leq \lambda$, через $G_{\lambda,0}^{\lambda}$. При этом

$$G_{\lambda i}^{\lambda-i} = L_{\lambda}(0, i) G_{\lambda 0}^{\lambda} + M_{\lambda}(0, i), \quad (6.140)$$

а операторы $L_{\lambda}(0, i)$, $M_{\lambda}(0, i)$ определяются рекуррентными соотношениями

$$L_{\lambda}(0,i) = -(B_{i-1}^{(3)}(c_{\gamma}))^{-1} B_{\lambda-i}^{(2)}(c) L_{\lambda}(0,i-1),$$

$$M_{\lambda}(0,i) = (-B_{i-1}^{(3)}(c_2))^{-1} [B_{\lambda-i}^{(2)}(c)M_{\lambda}(0,i-1) + B_{\lambda}^{(4)}(c_1)G_{\lambda-1,i-1}^{\lambda-i}], \quad i = 2, 3, \dots, \lambda \quad (6.141)$$

Заметим, что обратные операторы $(B_{i-1}^{(3)}(c_2))^{-1}$ коммутируют с операторами $B_{i-i-1}^{(2)}(c)$,

вследствие чего оператор $L_2(0, i)$ может быть записан в виде

$$L_i(0, i) = (-1)^i (B_{i-1}^{(3)}(c_2))^{-1} (B_{i-2}^{(3)}(c_2))^{-1} \dots (B_0^{(3)}(c_2))^{-1} B_{-i}^{(2)}(c) B_{-i+1}^{(2)}(c) \dots B_{-1}^{(2)}(c) \quad (6.142)$$

Таким образом, последовательная подстановка предыдущего уравнения цепочки (6.134) в последующее позволяет выразить λ неизвестных ядер вида $G_{\lambda,i}^{\lambda-i}, i=1,2,\dots,\lambda$ через ядро $G_{\lambda,0}^{\lambda}$.

Рассмотрим теперь соотношения (6.133) при $\tau=1$. Индекс ν в этом случае изменяется, согласно (6.129), в диапазоне $1 \leq \nu \leq \lambda+1$. Последовательно подставляя $\nu=1, \nu=2, \dots, \nu=\lambda$ в (6.133), получим

$$\begin{aligned}
B_0^{(3)}(c_2)G_{\lambda-1,1}^\lambda &= -B_{\lambda-1}^{(3)}(c_1)G_{\lambda,0}^\lambda - B_\lambda^{(1)}(c)G_{\lambda-1,0}^{\lambda-1} \\
B_1^{(3)}(c_2)G_{\lambda-1,2}^{\lambda-1} &= -B_{\lambda-1}^{(2)}(c)G_{\lambda-1,1}^\lambda - B_{\lambda-1}^{(3)}(c_1)G_{\lambda,1}^{\lambda-1} - \\
&\quad - \left(B_{\lambda-1}^{(1)}(c)G_{\lambda-1,1}^{\lambda-2} + B_{\lambda-1}^{(4)}(c_1)G_{\lambda-2,1}^{\lambda-1} + B_1^{(4)}(c_2)G_{\lambda-1,0}^{\lambda-1} \right) \\
&\quad \dots \dots \dots \\
B_{i-1}^{(3)}(c_2)G_{\lambda-1,i}^{\lambda-i+1} &= -B_{\lambda-i+1}^{(2)}(c)G_{\lambda-1,i-1}^{\lambda-i+2} - B_{\lambda-1}^{(3)}(c_1)G_{\lambda,i-1}^{\lambda-i+1} - \\
&\quad - \left(B_{\lambda-i+1}^{(1)}(c)G_{\lambda-1,i-1}^{\lambda-i} + B_{\lambda-1}^{(4)}(c_1)G_{\lambda-2,i-1}^{\lambda-i+1} + B_{i-1}^{(4)}(c_2)G_{\lambda-1,i-2}^{\lambda-i+1} \right)
\end{aligned} \tag{6.143}$$

$$B_{\lambda-1}^{(3)}(c_2)G_{\lambda-1,\lambda}^1 = -B_1^{(2)}(c)G_{\lambda-1,\lambda-1}^2 - B_{\lambda-1}^{(3)}(c_1)G_{\lambda,\lambda-1}^1 - \\ - \left(B_1^{(1)}(c)G_{\lambda-1,\lambda-1}^0 + B_{\lambda-1}^{(4)}(c_1)G_{\lambda-2,\lambda-1}^1 + B_{\lambda-1}^{(4)}(c_2)G_{\lambda-1,\lambda-2}^1 \right)$$

При $\nu = \lambda + 1$ ядро в первом члене, стоящем в левой части (6.133), по теореме Гекке обращается в нуль. Поэтому последнее уравнение цепочки принимает вид

$$0 = -B_0^{(2)}(c)G_{\lambda-1,\lambda}^1 - B_{\lambda-1}^{(3)}(c_1)G_{\lambda,\lambda}^0 - B_{\lambda}^{(4)}(c_2)G_{\lambda-1,\lambda-1}^0. \quad (6.144)$$

Во всех уравнениях цепочки, за исключением первого, второй член в правой части содержит ядро вида $G_{\lambda,i}^{\lambda-i}$, которое, как показано выше, выражается через $G_{\lambda,0}^{\lambda}$ с помощью первой цепочки уравнений при $\tau = 0$. Первый член в правой части представляет собой результат действия оператора $-B_{\lambda-i+1}^{(2)}(c)$ на ядро, содержащееся в левой части предыдущего уравнения. Последовательно исключая ядра вида $G_{\lambda-1,i}^{\lambda-i+1}$ из уравнений цепочки (6.143), можно выразить ядро $G_{\lambda-1,\lambda}^1$ через ядро $G_{\lambda,0}^{\lambda}$.

Поскольку ядра $G_{\lambda-1,i}^{\lambda-i+1}$ удовлетворяют нулевым граничным условиям при $c_2 = 0$, то оператор $B_0^{(3)}(c_2)$ обратим, и из первого уравнения цепочки (6.143), по аналогии с предыдущим, следует

$$G_{\lambda-1,1}^{\lambda} = L_{\lambda}(1,1)G_{\lambda,0}^{\lambda} + M_{\lambda}(1,1) \quad (6.145)$$

$$L_{\lambda}(1,1) = -(B_0^{(3)}(c_2))^{-1}B_{\lambda-1}^{(3)}(c_1), \quad M_{\lambda}(1,1) = -(B_0^{(3)}(c_2))^{-1}B_{\lambda}^{(1)}(c)G_{\lambda-1,0}^{\lambda-1} \quad (6.146)$$

Подставляя (6.136), (6.145) во второе уравнение цепочки (6.143), найдем

$$G_{\lambda-1,2}^{\lambda-1} = L_{\lambda}(1,2)G_{\lambda,0}^{\lambda} + M_{\lambda}(1,2) \quad (6.147)$$

$$L_{\lambda}(1,2) = -(B_1^{(3)}(c_2))^{-1} \left[B_{\lambda-1}^{(2)}(c)L_{\lambda}(1,1) + B_{\lambda-1}^{(3)}(c_1)L_{\lambda}(0,1) \right],$$

$$M_{\lambda}(1,2) = -(B_1^{(3)}(c_2))^{-1} \left[B_{\lambda-1}^{(2)}(c)M_{\lambda}(1,1) + B_{\lambda-1}^{(3)}(c_1)M_{\lambda}(0,1) + \right. \\ \left. + B_{\lambda-1}^{(1)}(c)G_{\lambda-1,1}^{\lambda-2} + B_{\lambda-1}^{(4)}(c_1)G_{\lambda-2,1}^{\lambda-1} + B_1^{(4)}(c_2)G_{\lambda-1,0}^{\lambda-1} \right] \quad (6.148)$$

Продолжая этот процесс, получим

$$G_{\lambda-1,i}^{\lambda-i+1} = L_{\lambda}(1,i)G_{\lambda,0}^{\lambda} + M_{\lambda}(1,i) \quad (6.149)$$

$$L_{\lambda}(1,i) = -(B_{i-1}^{(3)}(c_2))^{-1} \left[B_{\lambda-i+1}^{(2)}(c)L_{\lambda}(1,i-1) + B_{\lambda-1}^{(3)}(c_1)L_{\lambda}(0,i-1) \right],$$

$$M_{\lambda}(1,i) = -(B_{i-1}^{(3)}(c_2))^{-1} \left[B_{\lambda-i+1}^{(2)}(c)M_{\lambda}(1,i-1) + B_{\lambda-1}^{(3)}(c_1)M_{\lambda}(0,i-1) + \right. \\ \left. + B_{\lambda-i+1}^{(1)}(c)G_{\lambda-1,i-1}^{\lambda-i} + B_{\lambda-1}^{(4)}(c_1)G_{\lambda-2,i-1}^{\lambda-i+1} + B_{i-1}^{(4)}(c_2)G_{\lambda-1,i-2}^{\lambda-i+1} \right] \quad (6.150)$$

Можно показать, что

$$L_{\lambda}(1,i) = (-1)^i \cdot (B_{i-1}^{(3)}(c_2))^{-1} (B_{i-2}^{(3)}(c_2))^{-1} \dots (B_0^{(3)}(c_2))^{-1} \times \\ \times B_{\lambda-i+1}^{(2)}(c) B_{\lambda-i+2}^{(2)}(c) \dots B_{\lambda-1}^{(2)}(c) B_{\lambda-1}^{(3)}(c_1) \quad (6.151)$$

Последнее уравнение цепочки (6.143) дает

$$G_{\lambda-1,\lambda}^1 = L_\lambda(1,\lambda)G_{\lambda,0}^\lambda + M_\lambda(1,\lambda) \quad (6.152)$$

Подставляя (6.152) и (6.140) для $i = \lambda$ в замыкающее соотношение (6.144), найдем уравнение для определения ядра $G_{\lambda,0}^\lambda$:

$$\begin{aligned} (B_0^{(2)}(c)L_\lambda(1,\lambda) + B_{\lambda-1}^{(3)}(c_1)L_\lambda(0,\lambda))G_{\lambda,0}^\lambda = \\ = -B_0^{(2)}(c)M_\lambda(1,\lambda) - B_{\lambda-1}^{(3)}(c_1)M_\lambda(0,\lambda) - B_\lambda^{(4)}(c_2)G_{\lambda-1,\lambda-1}^0 \end{aligned} \quad (6.153)$$

Выражение для оператора в левой части можно вычислить с использованием (6.151), (6.142):

$$\begin{aligned} B_0^{(2)}(c)L_\lambda(1,\lambda) + B_{\lambda-1}^{(3)}(c_1)L_\lambda(0,\lambda) = (-1)^\lambda(\lambda+1)(B_{\lambda-1}^{(3)}(c_2))^{-1}(B_{\lambda-2}^{(3)}(c_2))^{-1}...(B_0^{(3)}(c_2))^{-1} \times \\ \times B_0^{(2)}(c)B_1^{(2)}(c)...B_{\lambda-1}^{(2)}(c)B_{\lambda-1}^{(3)}(c_1) \end{aligned} \quad (6.154)$$

Действуя на обе части (6.153) оператором $B_0^{(3)}(c_2)...B_{\lambda-2}^{(3)}(c_2)B_{\lambda-1}^{(3)}(c_2)$ найдем, что ядро $G_{\lambda,0}^\lambda$ является решением дифференциального уравнения порядка $(\lambda+1)$, которое имеет вид

$$\begin{aligned} (-1)^{\lambda+1}(\lambda+1)(B_{\lambda-1}^{(3)}(c_1)B_0^{(2)}(c)B_1^{(2)}(c)...B_{\lambda-1}^{(2)}(c))G_{\lambda,0}^\lambda = (B_0^{(3)}(c_2)...B_{\lambda-2}^{(3)}(c_2)B_{\lambda-1}^{(3)}(c_2)) \times \\ \times (B_0^{(2)}(c)M_\lambda(1,\lambda) + B_{\lambda-1}^{(3)}(c_1)M_\lambda(0,\lambda) + B_\lambda^{(4)}(c_2)G_{\lambda-1,\lambda-1}^0). \end{aligned} \quad (6.155)$$

Для однозначного решения уравнение (6.155) должно быть дополнено граничными условиями. Эти условия могут быть получены из (6.130), (6.131) и соотношений (6.140). Действительно, полагая $c_1 = 0$ и учитывая (6.131), имеем

$$G_{\lambda,0}^\lambda \Big|_{c_1=0} = 0 \quad (6.156)$$

При $c = 0$ согласно (6.130) получим

$$G_{\lambda,0}^\lambda \Big|_{c=0} = 0 \quad (6.157)$$

Из соотношений (6.140) с учетом явного вида оператора $L_\lambda(0,i)$ следует

$$\begin{aligned} B_0^{(3)}(c_2)...B_{i-2}^{(3)}(c_2)B_{i-1}^{(3)}(c_2)G_{\lambda,i}^{\lambda-i} = \\ = (-1)^i B_{\lambda-i}^{(2)}(c)B_{\lambda-i+1}^{(2)}(c)...B_{\lambda-1}^{(2)}(c)G_{\lambda,0}^\lambda + B_0^{(3)}(c_2)...B_{i-2}^{(3)}(c_2)B_{i-1}^{(3)}(c_2)M_\lambda(0,i), \quad i=1,...,\lambda-1 \end{aligned} \quad (6.158)$$

Как показано в приложении D, функции $B_0^{(3)}(c_2)...B_{i-2}^{(3)}(c_2)B_{i-1}^{(3)}(c_2)M_\lambda(0,i)$, $i=1,...,\lambda-1$ обращаются в ноль при $c = 0$. Кроме того, как видно из (6.130), левая часть (6.158) в этом случае также равна нулю, и мы имеем

$$\begin{aligned} B_{\lambda-i}^{(2)}(c)B_{\lambda-i+1}^{(2)}(c)...B_{\lambda-1}^{(2)}(c)G_{\lambda,0}^\lambda \Big|_{c=0} = 0, \\ i=1,...,\lambda-1 \end{aligned} \quad (6.159)$$

Условия (6.156), (6.157), (6.159) в совокупности и дают необходимое количество граничных условий для однозначного решения уравнения (6.155).

Заметим, что условия (6.159) позволяют записать решение (6.155) через обратные операторы $(B_0^{(2)}(c))^{-1}, (B_1^{(2)}(c))^{-1}, \dots, (B_{\lambda-1}^{(2)}(c))^{-1}, (B_{\lambda-1}^{(2)}(c_1))^{-1}$. Действительно, поскольку из (6.156) следует, что $(B_0^{(2)}(c)B_1^{(2)}(c)\dots B_{\lambda-1}^{(2)}(c))G_{\lambda,0}^\lambda|_{c_1=0} = 0$, то неизвестную функцию $(B_0^{(2)}(c)B_1^{(2)}(c)\dots B_{\lambda-1}^{(2)}(c))G_{\lambda,0}^\lambda$ можно найти, действуя обратным оператором $(B_{\lambda-1}^{(3)}(c_1))^{-1}$ на правую часть (6.155). Используя далее последовательно (6.159) при $i = \lambda - 1, i = \lambda - 2, \dots, i = 1$ и условие (6.157), и применяя обратные операторы $(B_0^{(2)}(c))^{-1}, (B_1^{(2)}(c))^{-1}, \dots, (B_{\lambda-1}^{(2)}(c))^{-1}$, получим

$$G_{\lambda,0}^\lambda = \frac{(-1)^{\lambda+1}}{(\lambda+1)} (B_{\lambda-1}^{(2)}(c))^{-1} \dots (B_1^{(2)}(c))^{-1} (B_0^{(2)}(c))^{-1} (B_{\lambda-1}^{(3)}(c_1))^{-1} (B_0^{(3)}(c_2) \dots B_{\lambda-2}^{(3)}(c_2) B_{\lambda-1}^{(3)}(c_2)) \times \\ \times (B_0^{(2)}(c)M_\lambda(1, \lambda) + B_{\lambda-1}^{(3)}(c_1)M_\lambda(0, \lambda) + B_\lambda^{(4)}(c_2)G_{\lambda-1, \lambda-1}^0) \quad (6.160)$$

Таким образом, подмножество соотношений (6.133) для $\tau = 0$ и $\tau = 1$ представляет собой замкнутую систему для неизвестных ядер вида $G_{\lambda,i}^{\lambda-i}, G_{\lambda-1,i}^{\lambda-i+1}$. Методом последовательного исключения эта система может быть сведена к одному уравнению в частных производных для ядра $G_{\lambda,0}^\lambda$. Решение этого уравнения представляется в виде (6.160), т.е. расчет ядра $G_{\lambda,0}^\lambda$ сводится к выполнению конечного числа дифференцирований и интегрирований известных функций. Зная ядро $G_{\lambda,0}^\lambda$ можно определить 2λ ядер $G_{\lambda-\tau,i}^{\lambda+\tau-i}$, где $i = 1, \dots, \lambda$ при $\tau = 0$ и $\tau = 1$.

Опишем теперь процедуру получения остальных ядер в слое $l + l_1 + l_2 = 2\lambda$. Вернемся к основному соотношению (6.133) и рассмотрим его последовательно при $\tau = 2, \tau = 3, \dots, \tau = \lambda$ и $\nu = \tau$. В этом случае (6.133) приобретает вид

$$B_{\tau-1}^{(3)}(c_2)G_{\lambda-\tau,\tau}^\lambda = -(B_{\lambda-\tau}^{(3)}(c_1)G_{\lambda-\tau+1,\tau-1}^\lambda + B_\lambda^{(1)}(c)G_{\lambda-\tau,\tau-1}^{\lambda-1}) \quad (6.161)$$

Для $\tau = 2$ ядро $G_{\lambda-1,1}^\lambda$, входящее в первый член справа и соответствующее $\tau = 1, \nu = 1$, получено на предыдущем этапе решения, а ядро $G_{\lambda-2,1}^{\lambda-1}$ принадлежит слою $l + l_1 + l_2 = 2\lambda - 2$, и поэтому известно. Аналогичная ситуация имеет место и для следующих значений τ : ядро, входящее в первый член, определено на предыдущем шаге по τ , второй член относится к предыдущему слою. Следовательно, правая часть (6.161) известна. Поскольку ядро $G_{\lambda-\tau,\tau}^\lambda$ относится к классу функций, обращающихся в ноль при $c_2 = 0$, то решение уравнения (6.161) может быть записано через обратный оператор $(B_{\tau-1}^{(3)}(c_2))^{-1}$ и имеет вид

$$G_{\lambda-\tau,\tau}^\lambda = -(B_{\tau-1}^{(3)}(c_2))^{-1} (B_{\lambda-\tau}^{(3)}(c_1)G_{\lambda-\tau+1,\tau-1}^\lambda + B_\lambda^{(1)}(c)G_{\lambda-\tau,\tau-1}^{\lambda-1}) \quad (6.162)$$

Для следующих значений $\nu = 3, \dots, \lambda$ соотношение (6.133) дает

$$\begin{aligned} \hat{B}_{\nu-1}^{(3)}(c_2)G_{\lambda-\tau,\nu}^{\lambda+\tau-\nu}(c, c_1, c_2) = & -\left(\hat{B}_{\lambda+\tau-\nu}^{(2)}(c)G_{\lambda-\tau,\nu-1}^{\lambda+\tau-\nu+1}(c, c_1, c_2) + \hat{B}_{\lambda-\tau}^{(3)}(c_1)G_{\lambda-\tau+1,\nu-1}^{\lambda+\tau-\nu}(c, c_1, c_2) + \right. \\ & \left. + \hat{B}_{\lambda+\tau-\nu}^{(1)}(c)G_{\lambda-\tau,\nu-1}^{\lambda+\tau-\nu-1}(c, c_1, c_2) + \hat{B}_{\lambda-\tau}^{(4)}(c_1)G_{\lambda-\tau-1,\nu-1}^{\lambda+\tau-\nu}(c, c_1, c_2) + \hat{B}_{\nu-1}^{(4)}(c_2)G_{\lambda-\tau,\nu-2}^{\lambda+\tau-\nu}(c, c_1, c_2)\right) \end{aligned} \quad (6.163)$$

Ядро в первом члене справа определено на предыдущем шаге по ν , а ядро во втором члене – на предыдущем шаге по τ . Остальные члены справа известны, поскольку относятся к предыдущему слою $l + l_1 + l_2 = 2\lambda - 2$. Ядро $G_{\lambda-\tau,\nu}^{\lambda+\tau-\nu}(c, c_1, c_2)$ удовлетворяет условию (6.132), поэтому

$$\begin{aligned} G_{\lambda-\tau,\nu}^{\lambda+\tau-\nu}(c, c_1, c_2) = & -\left(\hat{B}_{\nu-1}^{(3)}(c_2)\right)^{-1}\left(\hat{B}_{\lambda+\tau-\nu}^{(2)}(c)G_{\lambda-\tau,\nu-1}^{\lambda+\tau-\nu+1}(c, c_1, c_2) + \hat{B}_{\lambda-\tau}^{(3)}(c_1)G_{\lambda-\tau+1,\nu-1}^{\lambda+\tau-\nu}(c, c_1, c_2) + \right. \\ & \left. + \hat{B}_{\lambda+\tau-\nu}^{(1)}(c)G_{\lambda-\tau,\nu-1}^{\lambda+\tau-\nu-1}(c, c_1, c_2) + \hat{B}_{\lambda-\tau}^{(4)}(c_1)G_{\lambda-\tau-1,\nu-1}^{\lambda+\tau-\nu}(c, c_1, c_2) + \hat{B}_{\nu-1}^{(4)}(c_2)G_{\lambda-\tau,\nu-2}^{\lambda+\tau-\nu}(c, c_1, c_2)\right) \end{aligned} \quad (6.164)$$

$$\nu = 3, \dots, \lambda$$

При $\nu = \lambda + 1$ ядро, входящее в первый член левой части (6.133) обращается в ноль по теореме Гекке и само соотношение приобретает вид

$$\hat{B}_{\tau-1}^{(2)}(c)G_{\lambda-\tau,\lambda}^{\tau}(c, c_1, c_2) + \hat{B}_{\lambda-\tau}^{(3)}(c_1)G_{\lambda-\tau+1,\lambda}^{\tau-1}(c, c_1, c_2) + \hat{B}_{\lambda}^{(4)}(c_2)G_{\lambda-\tau,\lambda-1}^{\tau-1}(c, c_1, c_2) = 0 \quad (6.165)$$

Все ядра, входящие в (6.165), уже определены на предыдущих шагах рекуррентной процедуры, и это соотношение представляет собой дополнительную связь между ядрами. Соотношения (6.165) имеют место при всех $\tau = 2, 3, \dots, \lambda$, и их общее число равно $\lambda - 1$. Это находится в соответствии с проведенной в начале параграфа оценкой числа соотношений и числа неизвестных ядер на слое $l + l_1 + l_2 = 2\lambda$. Отметим, что, поскольку рекуррентная процедура связывает ядра на слое 2λ с ядрами на слое $l + l_1 + l_2 = 2\lambda - 2$, а эти ядра, в свою очередь, с ядрами на слое $l + l_1 + l_2 = 2\lambda - 4$, и т.д., то связи (6.165), в сущности, являются дифференциальными условиями на ядро $G_{0,0}^0$.

Таким образом, рекуррентная процедура, заключающаяся в расчете ядер G_{l_1,l_2}^l с индексами $l + l_1 + l_2 = 2\lambda$ через ядра с индексами $l + l_1 + l_2 = 2\lambda - 2$, сводится к выполнению конечного числа дифференцирований и интегрирований известных функций по формулам (6.160), (6.140), (6.149), (6.162), (6.164). В том случае, когда ядро $G_{\lambda,0}^{\lambda}$ оказывается известным из каких-либо дополнительных соображений, рекуррентная процедура упрощается – для отыскания ядер на слое $l + l_1 + l_2 = 2\lambda$ оказывается необходимым использовать формулы (6.140), (6.149), (6.162), (6.164).

Глава 7.

Расчет ядер интеграла столкновений для некоторых моделей взаимодействия и решение задач релаксации

В этой главе будут прежде всего построены ядра нелинейного интеграла столкновений для случая твердых шаров и псевдомаксвелловских молекул. Ядра интеграла прямых столкновений были получены в предыдущей главе. Для отыскания ядер нелинейного интеграла обратных столкновений $G_{l_1, l_2}^{+l}(c, c_1, c_2)$ можно использовать формулы рекуррентной процедуры, используя в качестве стартового ядро $G_{0,0}^{+0}$. В ряде случаев ядро $G_{0,0}^{+0}(c, c_1, c_2)$ может быть найдено аналитически, что позволяет получить аналитические выражения для $G_{l_1, l_2}^{+l}(c, c_1, c_2)$, и, таким образом, полностью определить ядро $G_{l_1, l_2}^l(c, c_1, c_2)$. Исследование этих случаев проведено в параграфах 7.1, 7.2.

Поскольку не всегда оказывается возможным найти аналитические выражения для $G_{0,0}^{+0}(c, c_1, c_2)$, в параграфе 7.3 рассмотрен метод построения $G_{0,0}^{+0}(c, c_1, c_2)$ с использованием матричных элементов на основе формулы (4.37). Эта формула позволяет рассчитывать ядра для произвольного закона взаимодействия. Тем не менее, ее использование сталкивается с определенными трудностями – при некоторых значениях аргументов ряд сходится плохо и для расчета суммы оказывается необходимым учитывать очень большое число членов. Подобные трудности возникали и при отыскании линейных ядер интеграла столкновений. Способ их преодоления заключался в отыскании асимптотики остатка ряда и учете его при расчете полной суммы. Реализация такого подхода к построению $G_{0,0}^{+0}(c, c_1, c_2)$ продемонстрирована в 7.3 для случая максвелловских молекул.

В параграфе 7.4 проведено решение задач однородной нелинейной релаксации с помощью полученных ядер нелинейного интеграла столкновений. Для случаев твердых шаров и псевдомаксвелловских молекул рассмотрена эволюция ФР с различными начальными условиями.

Наконец, в параграфе 7.5 метод разложения по сферическим гармоникам применяется к решению линейного кинетического уравнения для электронов средних энергий. Расчет ядер интеграла столкновений в этом случае сводится к вычислению коэффициентов разложения дифференциального сечения рассеяния по полиномам Лежандра. В этом же параграфе проводится численное решение задачи об угловой релаксации электронов в пограничном слое эффективной изотропизации. При этом используется модифицированный метод дискретных ординат и представление интеграла столкновений через ядра.

7.1 Ядра $G_{0,0}^{+0}(c, c_1, c_2)$ для псевдомаксвелловских молекул и твердых шаров

Разработанная в предыдущей главе рекуррентная процедура последовательного отыскания ядер позволяет строить ядра G_{l_1, l_2}^l с индексами l_1, l_1, l_1 такими, что $l + l_1 + l_2 = 2\lambda$, если известны ядра, сумма индексов которых равна $2\lambda - 2$. Заметим, что все рассуждения, проведенные в параграфах 6.3 и 6.4, справедливы для интеграла прямых и обратных столкновений по отдельности. Как было показано в параграфе 6.2, ядра интеграла прямых столкновений могут быть выражены через ядра некоторого линейного оператора. Для степенных потенциалов расчет ядер этого оператора, $\bar{L}_G^l(c, c_2)$, сводится к вычислению одной квадратуры. В частности, для моделей твердых шаров и псевдомаксвелловских молекул выражения для $\bar{L}_G^l(c, c_2)$ найдены в [123]. Для получения ядер нелинейного интеграла обратных столкновений $G_{l_1, l_2}^{+l}(c, c_1, c_2)$ можно использовать формулы рекуррентной процедуры, заменяя полные ядра ядрами обратных столкновений. Стартовым для такой процедуры является ядро $G_{0,0}^{+0}$, поэтому задача его отыскания приобретает особую важность. В ряде случаев ядро $G_{0,0}^{+0}(c, c_1, c_2)$ может быть найдено аналитически, что позволяет получить аналитические выражения для G_{l_1, l_2}^l .

Связь ядер линейного и нелинейного интегралов столкновений

Чтобы получить аналитическое выражение для $G_{0,0}^{+0}(c, c_1, c_2)$ рассмотрим более подробно связь между ядрами линейного и нелинейного интегралов столкновений. Как показано в параграфе 4.2, эти ядра связаны соотношением (7.63). Запишем это соотношение для ядер обратных столкновений:

$$L_t^+(v, v_1; T) = \int_0^\infty G_{l,0}^{+l}(v, v_1, v_2) M_T(v_2) v_2^2 dv_2 \quad (7.1)$$

Здесь $M_T(v_2) = (m/(2kT\pi))^{3/2} \exp(-mv_2^2/(2kT))$ - максвеллиан, T - фоновая температура. Помимо ядер (7.1), которые мы называем линейными ядрами первого рода, существуют линейные ядра второго рода (см. параграф 4.2, (7.65)). Как показано в параграфе 6.1, для сечений рассеяния, зависящих лишь от модуля относительной скорости и угла рассеяния, ядра нелинейного интеграла обратных столкновений симметричны (см. (6.18)), т.е. $G_{l,0}^{+l}(v, v_1, v_2) = G_{0,l}^{+l}(v, v_2, v_1)$, и линейные ядра первого и второго рода равны. Отметим, что в формулу (7.1) входят только нелинейные ядра с индексами $l = l_1, l_2 = 0$.

Для дальнейших выкладок удобно перейти к безразмерным переменным. С этой целью зафиксируем некоторую фоновую температуру T_0 и выберем в качестве масштаба скорости тепловую скорость, $v_{T_0} = \sqrt{2kT_0/m}$, а в качестве масштаба времени – обратную частоту столкновений $\tau_{T_0} = 1/(n_0 v_{T_0} \Sigma(v_{T_0}))$. Деля (7.1) на $R(T_0) = (n_0 v_{T_0} \Sigma(v_{T_0})) / (v_{T_0})^3$, получим

$$\bar{L}_l^+(c, c_1; \alpha) = \int_0^\infty \bar{G}_{l,0}^{+l}(c, c_1, c_2) \left(\frac{\alpha}{\pi}\right)^{3/2} \exp(-\alpha c_2^2) c_2^2 dc_2 \quad (7.2)$$

Здесь $c = v/v_{T_0}$, $c_1 = v_1/v_{T_0}$, $c_2 = v_2/v_{T_0}$, $\alpha = \sqrt{T_0/T}$, а

$$\bar{L}_l^+(c, c_1; \alpha) = \frac{(v_{T_0})^3}{(n_0 v_{T_0} \Sigma(v_{T_0}))} L_l^+(v_{T_0} c, v_{T_0} c_1; T), \quad (7.3)$$

$$\bar{G}_{l,0}^{+l}(c, c_1, c_2) = \frac{(v_{T_0})^3}{(n_0 v_{T_0} \Sigma(v_{T_0}))} G_{l,0}^{+l}(v_{T_0} c, v_{T_0} c_1, v_{T_0} c_2) \quad (7.4)$$

- безразмерные ядра линейного и нелинейного интеграла обратных столкновений. Перейдем в (7.2) к новым переменным

$$u = c^2, \quad u_1 = c_1^2, \quad t = c_2^2 \quad (7.5)$$

Это дает

$$2\left(\frac{\pi}{\alpha}\right)^{3/2} \bar{L}_l^+(\sqrt{u}, \sqrt{u_1}; \alpha) = \int_0^\infty \bar{G}_{l,0}^{+l}(\sqrt{u}, \sqrt{u_1}, \sqrt{t}) \exp(-\alpha t) t^{1/2} dt \quad (7.6)$$

Интеграл, стоящий в правой части (7.6), можно рассматривать как преобразование Лапласа $\hat{\mathbf{L}}_{\alpha,t}$ от переменной t к переменной α

$$2\left(\frac{\pi}{\alpha}\right)^{3/2} \bar{L}_l^+(\sqrt{u}, \sqrt{u_1}; \alpha) = \hat{\mathbf{L}}_{\alpha,t} [\bar{G}_{l,0}^{+l}(\sqrt{u}, \sqrt{u_1}, \sqrt{t}) t^{1/2}]. \quad (7.7)$$

Если функция $2\left(\frac{\pi}{\alpha}\right)^{3/2} \bar{L}_l^+(\sqrt{u}, \sqrt{u_1}; \alpha)$ известна, то ядро $\bar{G}_{l,0}^{+l}(\sqrt{u}, \sqrt{u_1}, \sqrt{t})$ может быть получено с помощью обратного преобразования Лапласа:

$$\bar{G}_{l,0}^{+l}(\sqrt{u}, \sqrt{u_1}, \sqrt{t}) = \frac{2\pi^{3/2}}{t^{1/2}} \hat{\mathbf{L}}_{\alpha,t}^{-1} [\alpha^{-3/2} \bar{L}_l^+(\sqrt{u}, \sqrt{u_1}; \alpha)] \quad (7.8)$$

Для отыскания зависимости $\bar{L}_l^+(\sqrt{u}, \sqrt{u_1}; \alpha)$ от α рассмотрим ядро в температурном базисе, соответствующем температуре T . Обозначим безразмерные скорости в этом базисе через w , w_1 и w_2 . Очевидно, что

$$w = v/v_T = v/v_{T_0} \cdot v_{T_0}/v_T = \sqrt{\alpha} c, \quad w_1 = v_1/v_T = \sqrt{\alpha} c_1, \quad w_2 = v_2/v_T = \sqrt{\alpha} c_2 \quad (7.9)$$

Для степенных потенциалов безразмерное ядро (7.4) может быть преобразовано следующим образом

$$\begin{aligned}\bar{G}_{l,0}^{+l}(c, c_1, c_2) &= \frac{1}{R(T_0)} G_{l,0}^{+l}(v_{T_0} c, v_{T_0} c_1, v_{T_0} c_2) = \\ &= \frac{R(T)}{R(T_0)} \frac{1}{R(T)} G_{l,0}^{+l}\left(v_T \left(\frac{v_{T_0} c}{v_T}\right), v_T \left(\frac{v_{T_0} c_1}{v_T}\right), v_T \left(\frac{v_{T_0} c_2}{v_T}\right)\right) = \frac{R(T)}{R(T_0)} \bar{G}_{l,0}^{+l}(w, w_1, w_2)\end{aligned}\quad (7.10)$$

Здесь учтено, что вид безразмерного ядра для степенного потенциала не зависит от базиса (см. (6.35)). Подставляя (7.10) в интеграл (7.2), учитывая связи (7.9) и переходя от переменной интегрирования c_2 к w_2 , найдем

$$\begin{aligned}\int_0^\infty \bar{G}_{l,0}^{+l}(c, c_1, c_2) \left(\frac{\alpha}{\pi}\right)^{3/2} \exp(-\alpha c_2^2) c_2^2 dc_2 = \\ = \frac{R(T)}{R(T_0)} \int_0^\infty \bar{G}_{l,0}^{+l}(\sqrt{\alpha} c, \sqrt{\alpha} c_1, w_2) \left(\frac{1}{\pi}\right)^{3/2} \exp(-w_2^2) w_2^2 dw_2\end{aligned}\quad (7.11)$$

Интеграл в правой части представляет собой введенное ранее безразмерное ядро линейного интеграла столкновений (см. (6.40)) от аргументов $\sqrt{\alpha} c$, $\sqrt{\alpha} c_1$. Отношение $R(T)/R(T_0)$ для степенных потенциалов, как легко видеть, равно $\alpha^{3/2-\mu}$. Таким образом,

$$\bar{L}_l^+(c, c_1; \alpha) = \alpha^{3/2-\mu} \bar{L}_l^+(\sqrt{\alpha} c, \sqrt{\alpha} c_1), \quad (7.12)$$

или, в переменных u , u_1

$$\bar{L}_l^+(\sqrt{u}, \sqrt{u_1}; \alpha) = \alpha^{3/2-\mu} \bar{L}_l^+(\sqrt{\alpha u}, \sqrt{\alpha u_1}). \quad (7.13)$$

Из (7.8) теперь имеем

$$\bar{G}_{l,0}^{+l}(\sqrt{u}, \sqrt{u_1}, \sqrt{t}) = \frac{2\pi^{3/2}}{t^{1/2}} \hat{\mathbf{L}}_{\alpha,t}^{-1} \left[\alpha^{-\mu} \bar{L}_l^+(\sqrt{\alpha u}, \sqrt{\alpha u_1}) \right], \quad (7.14)$$

и для размерного ядра, зависящего от размерных скоростей, получаем

$$G_{l,0}^{+l}(v_{T_0} c, v_{T_0} c_1, v_{T_0} c_2) = \frac{n_0 v_{T_0} \Sigma(v_{T_0})}{(v_{T_0})^3} \bar{G}_{l,0}^{+l}(c, c_1, c_2) \quad (7.15)$$

Отметим, что безразмерное линейное ядро $\bar{L}_l^+(\sqrt{\alpha u}, \sqrt{\alpha u_1})$ зависит от α только через аргументы $\sqrt{\alpha u}$, $\sqrt{\alpha u_1}$.

Изложенный подход может быть использован для отыскания ядер $G_{0,0}^{+0}(c, c_1, c_2)$. Интегральное преобразование $\hat{\mathbf{L}}_{\alpha,t}^{-1}$ не всегда может быть выполнено аналитически. Мы рассмотрим два случая, когда ядра удастся выразить через элементарные функции. При этом

будут использованы формулы для ядер $\bar{L}_0^+$ в случае твердых шаров ($\mu = 0.5$) (формула (4.74)) и псевдомаксвелловских молекул ($\mu = 0$) (формула (4.79)).

Ядро $\bar{G}_{0,0}^{+0}(c, c_1, c_2)$ для модели псевдомаксвелловских молекул

Для псевдомаксвелловских молекул линейное ядро $\bar{L}_0^+(\sqrt{\alpha u}, \sqrt{\alpha u_1})$, как следует из (4.79), имеет вид

$$\bar{L}_0^+(\sqrt{\alpha u}, \sqrt{\alpha u_1}) = \frac{2\sqrt{\pi}}{\alpha\sqrt{uu_1}} \exp(\alpha u_1) \times \\ \times \left(\operatorname{erfc}(\sqrt{\alpha u}) \operatorname{erf}(\sqrt{\alpha u_1}) \theta(u - u_1) + \operatorname{erfc}(\sqrt{\alpha u_1}) \operatorname{erf}(\sqrt{\alpha u}) \theta(u_1 - u) \right), \quad (7.16)$$

где $\theta(x) = 0$ при $x < 0$ и $\theta(x) = 1$ при $x > 0$. Введем обозначение $q(x) = e^x \operatorname{erfc}(\sqrt{x})$ и учтем, что $e^x \operatorname{erf}(\sqrt{x}) = (e^x - q(x))$. Тогда линейное ядро (7.16) можно представить в виде следующего произведения

$$\bar{L}_0^+(\sqrt{\alpha u}, \sqrt{\alpha u_1}) = \frac{2\pi^{1/2}}{\sqrt{uu_1}} \frac{f_{mm}(\alpha, u, u_1)}{\alpha}, \quad (7.17)$$

где функция f_{mm} имеет вид

$$f_{mm}(\alpha, u, u_1) = \begin{cases} e^{-(u-u_1)\alpha} q(u\alpha) - e^{-u\alpha} q(u_1\alpha) q(u\alpha) & u_1 < u \\ q(u_1\alpha) - e^{-u\alpha} q(u_1\alpha) q(u\alpha) & u < u_1 \end{cases} \quad (7.18)$$

Обратное преобразование Лапласа от $q(u\alpha)$ известно (см. [125] 5.12(12), стр. 237):

$$Q(u, t) = \hat{\mathbf{L}}_{\alpha, t}^{-1}[q(u\alpha)] = \frac{\sqrt{u}}{\pi\sqrt{t}(t+u)} \quad (7.19)$$

При обратном преобразовании Лапласа оригинал произведения функций вычисляется как свертка оригиналов сомножителей. Таким образом,

$$\hat{\mathbf{L}}_{\alpha, t}^{-1}[q(u\alpha)q(u_1\alpha)] = \int_0^t Q(u_1, \tau) Q(u, (t-\tau)) d\tau \quad (7.20)$$

Подынтегральную функцию можно привести к виду

$$Q(u_1, \tau) Q(u, (t-\tau)) = \frac{\sqrt{uu_1}}{\pi^2} \frac{1}{t+u+u_1} \frac{1}{\sqrt{t\tau-\tau^2}} \left(\frac{1}{\tau+u_1} - \frac{1}{\tau-t-u} \right) \quad (7.21)$$

После замены переменной $z = 1/(\tau+d)$, где $d = u_1$ и $d = -t-u$ соответственно для первой и второй дроби в круглых скобках, каждое из слагаемых в (7.21) принимает вид (2.261) из [73]:

$$\int_{1/(d+t)}^{1/d} \frac{dz}{\sqrt{A+Bz+Cz^2}} = -\frac{1}{\sqrt{-C}} \arcsin \frac{2Cz+B}{\sqrt{B^2-4AC}} \Big|_{1/(d+t)}^{1/d}, \quad (7.22)$$

где $A = -1$, $B = t + 2d$, $C = -td - d^2$. Используя (7.21) и (7.22), из (7.20) получим

$$\hat{\mathbf{L}}_{\alpha,t}^{-1}[q(u\alpha)q(u_1\alpha)] = \frac{\sqrt{uu_1}}{\pi^2} \frac{1}{t+u+u_1} \left(\frac{\pi}{\sqrt{u(t+u)}} + \frac{\pi}{\sqrt{u_1(t+u_1)}} \right). \quad (7.23)$$

Таким образом, показано, что для $t > 0$

$$\hat{\mathbf{L}}_{\alpha,t}^{-1}[q(u\alpha)q(u_1\alpha)] = Q(u_1, t+u) + Q(u, t+u_1) \quad (7.24)$$

Умножение изображения на экспоненту соответствует сдвигу в оригинале, поэтому

$$\hat{\mathbf{L}}_{\alpha,t}^{-1}[q(u\alpha)e^{-b\alpha}] = Q(u, t-b)\theta(t-b) \quad (7.25)$$

Используя (7.24), (7.25) и (7.18), получим

$$\begin{aligned} \phi(u, u_1, t) = \hat{\mathbf{L}}_{\alpha,t}^{-1}[f_{mm}(\alpha, u, u_1)] = & [Q(u, t+u_1-u)\theta(t+u_1-u) - \\ & (Q(u_1, t) + Q(u, t+u_1-u))\theta(t-u)]\theta(u-u_1) + \\ & [Q(u_1, t) - (Q(u_1, t) + Q(u, t+u_1-u))\theta(t-u)]\theta(u_1-u) \end{aligned} \quad (7.26)$$

Умножению изображения на $1/\alpha$ соответствует интегрирование оригинала от 0 до t :

$$\hat{\mathbf{L}}_{\alpha,t}^{-1}\left[\frac{f_{mm}(\alpha, u, u_1)}{\alpha}\right] = \int_0^t \phi(u, u_1, \tau) d\tau \quad (7.27)$$

Теперь с помощью найденного оригинала легко вычислить ядро нелинейного интеграла столкновений $\bar{G}_{0,0}^{+0}(\sqrt{u}, \sqrt{u_1}, \sqrt{t})$. Поскольку для максвелловских молекул $\mu = 0$, то из (7.14), (7.17) и (7.27) имеем

$$\bar{G}_{0,0}^{+0}(\sqrt{u}, \sqrt{u_1}, \sqrt{t}) = \frac{4\pi^2}{\sqrt{uu_1}} \int_0^t \phi(u, u_1, \tau) d\tau \quad (7.28)$$

Анализируя выражение для подинтегральной функции (7.26), легко увидеть, что $\phi(u, u_1, \tau)$ равна нулю, если $u > u_1 + \tau$ и, следовательно, ядро $\bar{G}_{0,0}^{+0}(\sqrt{u}, \sqrt{u_1}, \sqrt{t})$ при $u > u_1 + t$ обращается в ноль. При $u < u_1 + t$ в области изменения аргументов можно выделить четыре подобласти, в каждой из которых результат интегрирования выражается через следующий неопределенный интеграл:

$$\int Q(b, x) dx = \frac{\sqrt{b}}{\pi} \int \frac{1}{\sqrt{x}(x+b)} dx = \frac{2}{\pi} \arctg \sqrt{x/b} \quad (7.29)$$

В исходных переменных $c = \sqrt{u}$, $c_1 = \sqrt{u_1}$, $c_2 = \sqrt{t}$ границы выделенных подобластей представляют собой прямые $c_1 = c$, $c_2 = c$ и дугу окружности $c_1^2 + c_2^2 = c^2$. Определение подобластей приведено в таблице 7.1. Воспользовавшись тождеством $\arctg(x) + \arctg(1/x) = \pi/2$, легко получить окончательный результат для ядра $\bar{G}_{0,0}^{+0}(c, c_1, c_2)$.

Этот результат приведен в таблице 7.2. Из формул, приведенных в таблице, видно, что ядро непрерывно на границах областей.

D1	D2	D3	D4
$c^2 \leq c_1^2 + c_2^2, c_1 < c, c_2 < c$	$c_1 < c, c_2 > c$	$c_1 > c, c_2 < c$	$c_1 > c, c_2 > c$

Таблица 7.1 Определение подобластей D1 – D4

	D1	D2	D3	D4
$\bar{G}_{0,0}^{+0}$	$\frac{8\pi}{cc_1c_2} \arctg\left(\sqrt{\frac{c_1^2 + c_2^2 - c^2}{c^2}}\right)$	$\frac{8\pi}{cc_1c_2} \arctg\left(\sqrt{\frac{c_1^2}{c_2^2}}\right)$	$\frac{8\pi}{cc_1c_2} \arctg\left(\sqrt{\frac{c_2^2}{c_1^2}}\right)$	$\frac{4\pi^2}{cc_1c_2} \times$ $\left(1 - \frac{2}{\pi} \arctg\left(\sqrt{\frac{c_1^2 + c_2^2 - c^2}{c^2}}\right)\right)$

Таблица 7.2 Ядро $\bar{G}_{0,0}^{+0}$ для модели псевдомаксвелловских молекул

Ядро $\bar{G}_{0,0}^{+0}(c, c_1, c_2)$ для модели твердых шаров

Линейное ядро $\bar{L}_0^+(\sqrt{\alpha u}, \sqrt{\alpha u_1})$ для модели твердых шаров, согласно формуле (4.74), имеет вид

$$\bar{L}_0^+(\sqrt{\alpha u}, \sqrt{\alpha u_1}) = \frac{2}{\sqrt{\alpha u} \sqrt{\alpha u_1}} \left(e^{\alpha u_1 - \alpha u} \operatorname{erf}(\sqrt{\alpha u_1}) \theta(\sqrt{\alpha u} - \sqrt{\alpha u_1}) + \operatorname{erf}(\sqrt{\alpha u}) \theta(\sqrt{\alpha u_1} - \sqrt{\alpha u}) \right) \quad (7.30)$$

Для твердых шаров ($\mu = 0.5$) формулу (7.14) при $l = 0$ можно записать в виде

$$\bar{G}_{0,0}^{+0}(\sqrt{u}, \sqrt{u_1}, \sqrt{t}) = \frac{2\pi^{3/2}}{t^{1/2}} \hat{\mathbf{L}}_{\alpha,t}^{-1} \left[\frac{\bar{L}_0^+(\sqrt{\alpha u}, \sqrt{\alpha u_1})}{\sqrt{\alpha}} \right] = \frac{4\pi^{3/2}}{(uu_1 t)^{1/2}} \hat{\mathbf{L}}_{\alpha,t}^{-1} [f_{hs}(\alpha; u, u_1)], \quad (7.31)$$

где

$$f_{hs}(\alpha; u, u_1) = \begin{cases} \frac{1}{\alpha^{3/2}} e^{-\alpha(u-u_1)} \operatorname{erf}(\sqrt{\alpha u_1}) & u_1 < u \\ \frac{1}{\alpha^{3/2}} \operatorname{erf}(\sqrt{\alpha u}) & u < u_1 \end{cases}. \quad (7.32)$$

Согласно [125], 5.12(10), стр.237 при любом $b > 0$ имеем

$$\hat{\mathbf{L}}_{\alpha,t}^{-1} \left[\frac{\operatorname{erf}(\sqrt{b\alpha})}{\alpha^{1/2}} \right] = \frac{\theta(b-t)}{\sqrt{\pi} \sqrt{t}}. \quad (7.33)$$

Как уже отмечалось выше, умножению изображения на $1/\alpha$ соответствует интегрирование оригинала в пределах от нуля до t . В результате получаем

$$\hat{\mathbf{L}}_{\alpha,t}^{-1} \left[\frac{\text{erf}(\sqrt{b\alpha})}{\alpha^{3/2}} \right] = \frac{2}{\sqrt{\pi}} (\theta(b-t)\sqrt{t} + \theta(t-b)\sqrt{b})\theta(t) \quad (7.34)$$

Используя (7.34) и учитывая с помощью сдвига экспоненциальный множитель в (7.32), получаем в области $u_1 < u$

$$\hat{\mathbf{L}}_{\alpha,t}^{-1} [f_{hs}(\alpha; u, u_1)] = \frac{2}{\sqrt{\pi}} (\theta(t+u_1-u)\theta(u-t)\sqrt{t+u_1-u} + \theta(t-u)\sqrt{u_1}) \quad (7.35)$$

В области $u < u_1$ оригинал от $f_{hs}(\alpha; u, u_1)$ имеет вид

$$\hat{\mathbf{L}}_{\alpha,t}^{-1} [f_{hs}(\alpha; u, u_1)] = \frac{2}{\sqrt{\pi}} (\theta(u-t)\sqrt{t} + \theta(t-u)\sqrt{u}) \quad (7.36)$$

Возвращаясь к переменным c , c_1 , c_2 , получаем окончательное выражение для ядра $\bar{G}_{0,0}^{+0}(c, c_1, c_2)$, которое приведено в таблице 7.3.

	D1	D2	D3	D4
$\bar{G}_{0,0}^{+0}$	$\frac{8\pi}{c_1 c_2} \sqrt{\frac{c_1^2 + c_2^2 - c^2}{c^2}}$	$\frac{8\pi}{c c_2}$	$\frac{8\pi}{c c_1}$	$\frac{8\pi}{c_1 c_2}$

Таблица 7.3 Ядро $\bar{G}_{0,0}^{+0}$ для модели твердых шаров

Обсуждение результатов

Обсудим полученные выражения для ядер $\bar{G}_{0,0}^{+0}(c, c_1, c_2)$. Прежде всего, видно, что как для псевдомаксвелловских молекул, так и для твердых шаров структура $\bar{G}_{0,0}^{+0}(c, c_1, c_2)$ оказывается одинаковой. При фиксированном значении c вся область изменения c_1 и c_2 , ($c_1 > 0$, $c_2 > 0$) разбивается на 5 подобластей с границами $c_1 = c$, $c_2 = c$ и $c_1^2 + c_2^2 = c^2$. В этих областях, а также при переходе из области в область, ядра непрерывны. На границах областей частные производные имеют разрыв. В области $c_1^2 + c_2^2 < c^2$ ядра равны нулю, что отражает закон сохранения энергии.

Можно убедиться, что ядра $\bar{G}_{0,0}^{+0}(c, c_1, c_2)$ симметричны по аргументам c_1 , c_2 , то есть выполняется соотношение $\bar{G}_{0,0}^{+0}(c, c_1, c_2) = \bar{G}_{0,0}^{+0}(c, c_2, c_1)$. Это свойство является следствием отмеченной ранее симметрии ядра $G^+(\vec{v}, \vec{v}_1, \vec{v}_2)$ относительно перестановки второго и третьего аргументов и согласуется с (6.18). Как легко проверить, найденные ядра

удовлетворяют соотношениям подобия (6.31) с $\mu = 0.5$ для твердых шаров и $\mu = 0$ для псевдомаксвелловских молекул.

7.2 Расчет ядер нелинейного интеграла обратных столкновений

В этом параграфе мы выполним первый шаг рекуррентной процедуры, описанной в параграфе 6.4, используя в качестве стартовых ядер ядра $\bar{G}_{0,0}^{+0}(c, c_1, c_2)$, полученные в 7.1. Найдем, прежде всего, число неизвестных ядер и число ненулевых соотношений для $\lambda = 1$. В соответствии с проведенными в 6.4 оценками, $N_{nonk}(1) = N_{nonrel}(1) = 3$, т.е. число неизвестных совпадает с числом уравнений и дополнительные соотношения не появляются. Выпишем теперь соотношения, соответствующие $\tau = 0$ и $\tau = 1$. Для $\lambda = 1$ и $\tau = 0$ индекс ν принимает единственное значение, $\nu = 1$, и цепочка (6.134) переходит в уравнение

$$B_0^{(3)}(c_2)G_{1,1}^0 = -B_0^{(2)}(c)G_{1,0}^1 - B_1^{(4)}(c_1)G_{0,0}^0 \quad (7.37)$$

Ядро $G_{1,1}^0(c, c_1, c_2)$ удовлетворяет граничному условию

$$G_{1,1}^0(c, c_1, c_2)\big|_{c_2=0} = 0 \quad (7.38)$$

Оператор $B_0^{(3)}(c_2) = (d/dc_2 + 2/c_2)$ на классе функций, обращающихся в ноль при $c_2 = 0$, обратим. Обратный оператор имеет вид

$$\left(B_0^{(3)}(c_2)\right)^{-1} f = \frac{1}{c_2^2} \int_0^{c_2} f(t) t^2 dt. \quad (7.39)$$

Действуя им на уравнение (7.37), находим

$$G_{1,1}^0(c, c_1, c_2) = -\left(B_0^{(3)}(c_2)\right)^{-1} \left(B_0^{(2)}(c)G_{1,0}^1(c, c_1, c_2) + B_1^{(4)}(c_1)G_{0,0}^0(c, c_1, c_2) \right). \quad (7.40)$$

В соответствии с (6.136) получаем

$$L_1(0,1) = -\left(B_0^{(3)}(c_2)\right)^{-1} B_0^{(2)}(c) \quad (7.41)$$

$$M_1(0,1) = -\left(B_0^{(3)}(c_2)\right)^{-1} B_1^{(4)}(c_1)G_{0,0}^0 \quad (7.42)$$

Рассмотрим теперь цепочку для $\tau = 1$. Индекс ν в этом случае может принимать два значения: $\nu = 1$ и $\nu = 2$. Цепочка (6.143) сводится к уравнению

$$B_0^{(3)}(c_2)G_{0,1}^1 = -B_0^{(3)}(c_1)G_{1,0}^1 - B_1^{(1)}(c)G_{0,0}^0, \quad (7.43)$$

а последнее уравнение (6.144) принимает вид

$$0 = -B_0^{(2)}(c)G_{0,1}^1 - B_0^{(3)}(c_1)G_{1,1}^0 - B_1^{(4)}(c_2)G_{0,0}^0. \quad (7.44)$$

Поскольку ядро $G_{0,1}^1$ удовлетворяет нулевому граничному условию при $c_2 = 0$, то из (7.43) имеем

$$G_{0,1}^1 = -\left(B_0^{(3)}(c_2)\right)^{-1} B_0^{(3)}(c_1) G_{1,0}^1 - \left(B_0^{(3)}(c_2)\right)^{-1} B_1^{(1)}(c) G_{0,0}^0, \quad (7.45)$$

что дает

$$L_1(1,1) = -\left(B_0^{(3)}(c_2)\right)^{-1} B_0^{(3)}(c_1) \quad (7.46)$$

$$M_1(1,1) = -\left(B_0^{(3)}(c_2)\right)^{-1} B_1^{(1)}(c) G_{0,0}^0 \quad (7.47)$$

Подстановка (7.45), (7.40) в замыкающее соотношение (7.44) приводит, в соответствии с (6.153), (6.154), к

$$\begin{aligned} -2\left(B_0^{(3)}(c_2)\right)^{-1} B_0^{(3)}(c_1) B_0^{(2)}(c) G_{1,0}^1(c, c_1, c_2) = \\ = \left(B_0^{(2)}(c) B_1^{(2)}(c) \left(B_0^{(3)}(c_2)\right)^{-1} + B_0^{(3)}(c_1) B_1^{(4)}(c_1) \left(B_0^{(3)}(c_2)\right)^{-1} + B_1^{(4)}(c_2)\right) G_{0,0}^0(c, c_1, c_2) \end{aligned} \quad (7.48)$$

Действуя на (7.48) оператором $B_0^{(3)}(c_2)$ и пользуясь коммутативностью операторов, зависящих от разных аргументов, найдем

$$2B_0^{(3)}(c_1) B_0^{(2)}(c) G_{1,0}^1(c, c_1, c_2) = -\left(B_0^{(2)}(c) B_1^{(2)}(c) + B_0^{(3)}(c_1) B_1^{(4)}(c_1) + B_0^{(3)}(c_2) B_1^{(4)}(c_2)\right) G_{0,0}^0(c, c_1, c_2) \quad (7.49)$$

Поскольку ядро $G_{1,0}^1(c, c_1, c_2)$ удовлетворяет нулевым граничным условиям при $c=0$ и $c_1=0$, то решение уравнения (7.49) может быть записано через обратные операторы

$\left(B_0^{(3)}(c_1)\right)^{-1}$, $\left(B_0^{(2)}(c)\right)^{-1}$. Учитывая явный вид операторов $B_0^{(2)}(c) = (d/dc + 2/c)/3$ и $B_0^{(3)}(c_1) = (d/dc_1 + 2/c_1)$, для обратных операторов имеем

$$\left(B_0^{(2)}(c)\right)^{-1} f = \frac{3}{c^2} \int_0^c f(t) t^2 dt \quad (7.50)$$

$$\left(B_0^{(3)}(c_1)\right)^{-1} f = \frac{1}{c_1^2} \int_0^{c_1} f(t) t^2 dt \quad (7.51)$$

Действуя ими на (7.48), получим

$$\begin{aligned} G_{1,0}^1(c, c_1, c_2) = -\frac{1}{2} \left(\left(B_0^{(3)}(c_1)\right)^{-1} B_1^{(2)}(c) + \left(B_0^{(2)}(c)\right)^{-1} B_1^{(4)}(c_1) + \right. \\ \left. + \left(B_0^{(3)}(c_1)\right)^{-1} \left(B_0^{(2)}(c)\right)^{-1} B_0^{(3)}(c_2) B_1^{(4)}(c_2) \right) G_{0,0}^0(c, c_1, c_2). \end{aligned} \quad (7.52)$$

Безразмерные ядра интеграла обратных столкновений $\bar{G}_{1,0}^{+1}(c, c_1, c_2)$, $\bar{G}_{1,1}^{+0}(c, c_1, c_2)$, $\bar{G}_{0,1}^{+1}(c, c_1, c_2)$ теперь могут быть найдены, если подставить в (7.52) полученные в предыдущем параграфе выражения для $\bar{G}_{0,0}^{+0}(c, c_1, c_2)$, и воспользоваться (7.40), (7.45). Результаты для случая псевдомаксвелловских молекул приведены в таблице 7.4, а для твердых шаров – в таблице 7.5.

Заметим, что формула (7.14) позволяет найти ядра $\bar{G}_{1,0}^{+1}(c, c_1, c_2)$ из ядер линейного интеграла столкновений $\bar{L}_1^+(c, c_1)$ с помощью обратного преобразования Лапласа. Интересно

сравнить получающийся результат с решением, найденным по формуле (7.52). В случае твердых шаров ядро $\bar{L}_1^+(c, c_1)$ задается формулой (4.72). После ряда преобразований имеем

$$\bar{L}_1^+(\sqrt{\alpha u}, \sqrt{\alpha u_1}) = \frac{2e^{-\alpha u}}{\alpha^2 u u_1} \left((\alpha u_m - 1) e^{\alpha u_m} \operatorname{erf}(\sqrt{\alpha u_m}) + \frac{2}{\sqrt{\pi}} \sqrt{\alpha u_m} \right) \quad (7.53)$$

Здесь использовано обозначение $u_m = \min(u, u_1)$. Формула (7.14) дает

$$\bar{G}_{1,0}^{+1}(\sqrt{u}, \sqrt{u_1}, \sqrt{t}) = \frac{2\pi^{3/2}}{t^{1/2}} \hat{\mathbf{L}}_{\alpha,t}^{-1} \left[\alpha^{-1/2} \bar{L}_1^+(\sqrt{\alpha u}, \sqrt{\alpha u_1}) \right] = \frac{4\pi^{3/2}}{u u_1 t^{1/2}} \hat{\mathbf{L}}_{\alpha,t}^{-1} [f_{hs}^1(\alpha, u, u_1)], \quad (7.54)$$

где

$$f_{hs}^1(\alpha, u, u_1) = \begin{cases} \frac{1}{\alpha^{5/2}} e^{-\alpha u} \left((\alpha u_1 - 1) e^{\alpha u_1} \operatorname{erf}(\sqrt{\alpha u_1}) + \frac{2}{\sqrt{\pi}} \sqrt{\alpha u_1} \right) & u_1 < u \\ \frac{1}{\alpha^{5/2}} \left((\alpha u - 1) e^{\alpha u} \operatorname{erf}(\sqrt{\alpha u}) + \frac{2}{\sqrt{\pi}} e^{-\alpha u} \sqrt{\alpha u} \right) & u_1 > u \end{cases} \quad (7.55)$$

Выпишем оригиналы функций, входящих в (7.55). Для слагаемых вида $\operatorname{erf}(\sqrt{\alpha b})/\alpha^{3/2}$ оригиналы определены формулой (7.34). Чтобы найти оригиналы слагаемых вида $\operatorname{erf}(\sqrt{\alpha b})/\alpha^{5/2}$, проинтегрируем (7.34) от нуля до t :

$$\hat{\mathbf{L}}_{\alpha,t}^{-1} [\operatorname{erf}(\sqrt{\alpha b})/\alpha^{5/2}] = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \left(\theta(b-t) \frac{2}{3} t^{3/2} + \theta(t-b) \left(t\sqrt{b} - \frac{1}{3} b^{3/2} \right) \right) \theta(t) \quad (7.56)$$

Кроме этого учтем, что

$$\hat{\mathbf{L}}_{\alpha,t}^{-1} [\alpha^{-2}] = t\theta(t) \quad (7.57)$$

Используя (7.34), (7.56), (7.57) и сдвигая слагаемые в оригинале в соответствии с умножением на экспоненты в изображении, получаем

$$\begin{aligned} \hat{\mathbf{L}}_{\alpha,t}^{-1} [f_{hs}^1(\alpha, u, u_1)] &= \\ &= \left[u_1 \sqrt{u_1 + t - u} - \frac{2}{3} (u_1 + t - u)^{3/2} \right] \theta(u_1 + t - u) \theta(u - t) + \frac{1}{3} u_1^{3/2} \theta(t - u), \quad u > u_1 \end{aligned} \quad (7.58)$$

$$\begin{aligned} \hat{\mathbf{L}}_{\alpha,t}^{-1} [f_{hs}^1(\alpha, u, u_1)] &= \\ &= \left[u\sqrt{t} - \frac{2}{3} t^{3/2} \right] \theta(u - t) + \frac{1}{3} u^{3/2} \theta(t - u), \quad u < u_1 \end{aligned} \quad (7.59)$$

Подставляя (7.58), (7.59) в (7.54) и переходя к переменным c, c_1, c_2 , найдем окончательное выражение для ядра $\bar{G}_{1,0}^{+1}(c, c_1, c_2)$. Это выражение полностью совпадает с приведенным в таблице 7.5.

Аналогичный результат был получен и для псевдомаксвелловских молекул. В этом случае выражение для ядра $\bar{L}_1^+(\sqrt{\alpha u}, \sqrt{\alpha u_1})$ записывается в виде квадратуры (см. (4.76)). Для

	$\overline{G}_{1,0}^{+1}(c, c_1, c_2)$	$\overline{G}_{0,1}^{+1}(c, c_1, c_2)$	$\overline{G}_{1,1}^{+0}(c, c_1, c_2)$
D1	$\frac{2\pi}{c^2 c_1^2 c_2} \left[\frac{c(c_1^2 - c_2^2) \sqrt{c_1^2 + c_2^2 - c^2}}{c_1^2 + c_2^2} + \right.$ $\left. (2c^2 + c_1^2 - c_2^2) \operatorname{arctg} \left(\frac{\sqrt{c_1^2 + c_2^2 - c^2}}{c} \right) \right]$	$\frac{2\pi}{c^2 c_2^2 c_1} \left[\frac{c(c_2^2 - c_1^2) \sqrt{c_1^2 + c_2^2 - c^2}}{c_1^2 + c_2^2} + \right.$ $\left. (2c^2 + c_2^2 - c_1^2) \operatorname{arctg} \left(\frac{\sqrt{c_1^2 + c_2^2 - c^2}}{c} \right) \right]$	0
D2	$\frac{2\pi}{c^2 c_1^2 c_2} \left[\frac{c_1 c_2 (c_1^2 + c_2^2 - 2c^2)}{c_1^2 + c_2^2} + \right.$ $\left. (2c^2 + c_1^2 - c_2^2) \operatorname{arctg} \left(\frac{c_1}{c_2} \right) \right]$	$\frac{2\pi}{c^2 c_2^2 c_1} \left[\frac{c_1 c_2 (2c^2 - c_1^2 - c_2^2)}{c_1^2 + c_2^2} + \right.$ $\left. (2c^2 - c_1^2 + c_2^2) \operatorname{arctg} \left(\frac{c_1}{c_2} \right) \right]$	0
D3	$\frac{2\pi}{c^2 c_1^2 c_2} \left[\frac{c_1 c_2 (2c^2 - c_1^2 - c_2^2)}{c_1^2 + c_2^2} + \right.$ $\left. (2c^2 + c_1^2 - c_2^2) \operatorname{arctg} \left(\frac{c_2}{c_1} \right) \right]$	$\frac{2\pi}{c^2 c_2^2 c_1} \left[\frac{c_1 c_2 (c_1^2 + c_2^2 - 2c^2)}{c_1^2 + c_2^2} + \right.$ $\left. (2c^2 - c_1^2 + c_2^2) \operatorname{arctg} \left(\frac{c_2}{c_1} \right) \right]$	0
D4	$\frac{2\pi}{c^2 c_1^2 c_2} \left[\frac{c_1 c_2 (2c^2 - c_1^2 - c_2^2)}{c_1^2 + c_2^2} + \right.$ $\left. (2c^2 + c_1^2 - c_2^2) \operatorname{arctg} \left(\frac{c_2}{c_1} \right) \right]$	$\frac{2\pi}{c^2 c_2^2 c_1} \left[\frac{c_1 c_2 (2c^2 - c_1^2 - c_2^2)}{c_1^2 + c_2^2} + \right.$ $\left. (2c^2 - c_1^2 + c_2^2) \operatorname{arctg} \left(\frac{c_1}{c_2} \right) \right]$	0

Таблица 7.4 Ядра $\overline{G}_{1,0}^{+1}$, $\overline{G}_{0,1}^{+1}$ и $\overline{G}_{1,1}^{+0}$ для модели псевдомаксвелловских молекул

	$\overline{G}_{1,0}^{+1}(c, c_1, c_2)$	$\overline{G}_{0,1}^{+1}(c, c_1, c_2)$	$\overline{G}_{1,1}^{+0}(c, c_1, c_2)$
D1	$\frac{8\pi}{c^2 c_1^2 c_2} \left[c_1^2 (c_1^2 + c_2^2 - c^2)^{1/2} - \right.$ $\left. - \frac{2}{3} (c_1^2 + c_2^2 - c^2)^{3/2} \right]$	$\frac{8\pi}{c^2 c_1 c_2^2} \left[c_2^2 (c_1^2 + c_2^2 - c^2)^{1/2} - \right.$ $\left. - \frac{2}{3} (c_1^2 + c_2^2 - c^2)^{3/2} \right]$	$-\frac{8\pi (c_1^2 + c_2^2 - c^2)^{3/2}}{9cc_1^2 c_2^2}$
D2	$\frac{8\pi c_1}{3c^2 c_2}$	$\frac{8\pi}{c^2 c_2^2} \left(c^2 - \frac{2}{3} c_1^2 \right)$	$-\frac{8\pi c_1}{9cc_2^2}$
D3	$\frac{8\pi}{c^2 c_1^2} \left(c^2 - \frac{2}{3} c_2^2 \right)$	$\frac{8\pi c_2}{3c^2 c_1}$	$-\frac{8\pi c_2}{9cc_1^2}$
D4	$\frac{8\pi}{3c_1^2 c_2}$	$\frac{8\pi}{3c_1 c_2^2}$	$-\frac{8\pi c^2}{9c_1^2 c_2^2}$

Таблица 7.5 Ядра $\overline{G}_{1,0}^{+1}$, $\overline{G}_{0,1}^{+1}$ и $\overline{G}_{1,1}^{+0}$ для модели твердых шаров

вычисления обратного преобразования Лапласа от такого выражения сначала находился оригинал от подинтегральной функции. После этого интеграл от оригинала оказалось возможным взять аналитически. Таким образом, совпадение результатов расчета ядер $\bar{G}_{1,0}^{+1}(c, c_1, c_2)$ по независимым алгоритмам свидетельствует о корректности подхода, основанного на использовании рекуррентного соотношения. Кроме того, возможность отыскания ядер вида $\bar{G}_{l,0}^{+l}(c, c_1, c_2)$ при помощи обратного преобразования Лапласа позволяет упростить рекуррентную процедуру, сводя операцию по вычислению каждого последующего ядра (в последовательности, указанной при описании рекуррентной процедуры) к суммированию результатов одного дифференцирования и одного интегрирования уже известных ядер.

Как видно из таблиц 7.4 и 7.5, найденные ядра удовлетворяют условиям симметрии (6.18).

С помощью повторного применения рекуррентной процедуры удастся найти ядра и для $\lambda = 2$. Их вид в областях D1 – D4 для случаев псевдомаксвелловских молекул и твердых шаров приведены в таблицах 7.6 и 7.7. Ядра $\bar{G}_{2,0}^{+2}$, $\bar{G}_{2,1}^{+1}$, $\bar{G}_{1,1}^{+2}$ и $\bar{G}_{2,2}^{+0}$ также удовлетворяют условиям симметрии (6.18).

Отметим, что все найденные ядра $\bar{G}_{l,l_2}^{+l}(c, c_1, c_2)$ для $\lambda = 1, 2$ так же, как и ядро $\bar{G}_{0,0}^{+0}(c, c_1, c_2)$, удовлетворяют соотношению подобия (6.31) с $\mu = 0.5$ для твердых шаров и $\mu = 0$ для псевдомаксвелловских молекул. При этом, как было показано (см. (6.34)), ядро может быть представлено в виде произведения функции двух переменных, которую мы будем называть приведенным ядром, на степень от суммы квадратов аргументов:

$$\bar{G}_{l,l_2}^{+l}(c, c_1, c_2) = (c_1^2 + c_2^2 + c^2)^{\mu-3/2} \Psi_{l,l_2}^{+l}(\omega, \omega_1) \quad (7.60)$$

$$\cos \omega = c / (c_1^2 + c_2^2 + c^2)^{1/2}, \quad \cos \omega_1 = c_1 / (c_1^2 + c_2^2 + c^2)^{1/2}$$

Заметим, что приведенные ядра $\Psi_{l,l_2}^{+l}(\omega, \omega_1)$, в отличие от $\bar{G}_{l,l_2}^{+l}(c, c_1, c_2)$, могут быть определены в конечной области $0 \leq \omega \leq \pi/2$, $0 \leq \omega_1 \leq \pi/2$. Тот факт, что $\Psi_{l,l_2}^{+l}(\omega, \omega_1)$ зависят от двух переменных, позволяет представить их графически (рисунки 7.1, 7.2). На рисунках демонстрируется зависимость функций $\Psi_{0,0}^{+0}$, $\Psi_{1,0}^{+1}$ от $x = \cos \omega$, $y = \cos \omega_1$. Из рисунков видно, что функции $\Psi_{0,0}^{+0}(\omega, \omega_1)$, $\Psi_{1,0}^{+1}(\omega, \omega_1)$ для псевдомаксвелловских молекул слабо отличаются от соответствующих функций для твердых шаров. Это связано с изотропностью сечения рассеяния. Мы провели дополнительное исследование, и убедились, что при $\mu = 0$ функции $\Psi_{0,0}^{+0}(\omega, \omega_1)$, $\Psi_{1,0}^{+1}(\omega, \omega_1)$ очень сильно меняются при изменении угловой зависимости

$\overline{G}_{2,0}^{+2}$	D1	$\frac{\pi}{16c^3c_1^3c_2} \left(\frac{3c^3\sqrt{c_1^2+c_2^2-c^2}(6c_1^4-36c_1^2c_2^2-26c_2^4)}{(c_1^2+c_2^2)^2} + \frac{3c\sqrt{c_1^2+c_2^2-c^2}(5c_1^4+2c_1^2c_2^2+21c_2^4)}{(c_1^2+c_2^2)} + \right.$ $\left. + (72c^4+15c_1^4+6c_1^2c_2^2+63c_2^4+8c^2(c_1^2-15c_2^2)) \arctg\left(\frac{\sqrt{c_1^2+c_2^2-c^2}}{c}\right) \right)$
	D2	$-\frac{\pi}{16c^3c_1^3c_2} \left(\frac{24c^4c_1c_2(5c_1^2+3c_2^2)}{(c_1^2+c_2^2)^2} - \frac{24c^2c_1c_2(3c_1^2+5c_2^2)}{(c_1^2+c_2^2)} - 3c_1c_2(5c_1^2-21c_2^2) - \right.$ $\left. (72c^4+15c_1^4+6c_1^2c_2^2+63c_2^4+8c^2(c_1^2-15c_2^2)) \arctg\left(\frac{c_1}{c_2}\right) \right)$
	D3	$\frac{\pi}{16c^3c_1^3c_2} \left(\frac{24c^4c_1c_2(5c_1^2+3c_2^2)}{(c_1^2+c_2^2)^2} - \frac{24c^2c_1c_2(3c_1^2+5c_2^2)}{(c_1^2+c_2^2)} - 3c_1c_2(5c_1^2-21c_2^2) + \right.$ $\left. (72c^4+15c_1^4+6c_1^2c_2^2+63c_2^4+8c^2(c_1^2-15c_2^2)) \arctg\left(\frac{c_2}{c_1}\right) \right)$
	D4	$-\frac{\pi}{16c^3c_1^3c_2} \left(\frac{3c^3\sqrt{c_1^2+c_2^2-c^2}(6c_1^4-36c_1^2c_2^2-26c_2^4)}{(c_1^2+c_2^2)^2} + \frac{3c\sqrt{c_1^2+c_2^2-c^2}(5c_1^4+2c_1^2c_2^2+21c_2^4)}{(c_1^2+c_2^2)} - \right.$ $\left. - (72c^4+15c_1^4+6c_1^2c_2^2+63c_2^4+8c^2(c_1^2-15c_2^2)) \arctg\left(\frac{c}{\sqrt{c_1^2+c_2^2-c^2}}\right) \right)$
$\overline{G}_{2,1}^{+1}$	D1	$\frac{\pi}{10c^2c_1^3c_2^2} \left(c\sqrt{c_1^2+c_2^2-c^2} \left(\frac{c_1^4+2c_1^2c_2^2+9c_2^4}{c_1^2+c_2^2} - 6c^2 \right) + \right.$ $\left. (c_1^4+2c_1^2c_2^2+9c_2^4+4c^2(c_1^2-3c_2^2)) \arctg\left(\frac{\sqrt{c_1^2+c_2^2-c^2}}{c}\right) \right)$
	D2	$\frac{\pi}{10c^2c_1^3c_2^2} \left(c_1c_2 \left(\frac{c_1^4-8c_1^2c_2^2-9c_2^4+4c^2(c_1^2+3c_2^2)}{c_1^2+c_2^2} \right) + (c_1^4+2c_1^2c_2^2+9c_2^4+4c^2(c_1^2-3c_2^2)) \arctg\left(\frac{c_1}{c_2}\right) \right)$
	D3	$-\frac{\pi}{10c^2c_1^3c_2^2} \left(c_1c_2 \left(\frac{c_1^4-8c_1^2c_2^2-9c_2^4+4c^2(c_1^2+3c_2^2)}{c_1^2+c_2^2} \right) - (c_1^4+2c_1^2c_2^2+9c_2^4+4c^2(c_1^2-3c_2^2)) \arctg\left(\frac{c_2}{c_1}\right) \right)$
	D4	$-\frac{\pi}{10c^2c_1^3c_2^2} \left(c\sqrt{c_1^2+c_2^2-c^2} \left(\frac{c_1^4+2c_1^2c_2^2+9c_2^4}{c_1^2+c_2^2} - 6c^2 \right) - \right.$ $\left. (c_1^4+2c_1^2c_2^2+9c_2^4+4c^2(c_1^2-3c_2^2)) \arctg\left(\frac{c}{\sqrt{c_1^2+c_2^2-c^2}}\right) \right)$
$\overline{G}_{1,1}^{+2}$	D1	$\frac{\pi}{8c^3c_1^2c_2^2} \left(c\sqrt{c_1^2+c_2^2-c^2} \left(\frac{2c^2(c_1^4+10c_1^2c_2^2+c_2^4)-3(3c_1^6+c_1^4c_2^2+c_1^2c_2^4+3c_2^6)}{(c_1^2+c_2^2)^2} \right) + \right.$ $\left. + (8c^4-9c_1^4+6c_1^2c_2^2-9c_2^4+8c^2(c_1^2+c_2^2)) \arctg\left(\frac{\sqrt{c_1^2+c_2^2-c^2}}{c}\right) \right)$
	D2	$\frac{\pi}{8c^3c_1^2c_2^2} \left(c_1c_2(c_1^2-c_2^2) \left(\frac{8c^4}{(c_1^2+c_2^2)^2} + \frac{8c^2}{c_1^2+c_2^2} - 9 \right) + (8c^4-9c_1^4+6c_1^2c_2^2-9c_2^4+8c^2(c_1^2+c_2^2)) \arctg\left(\frac{c_1}{c_2}\right) \right)$
	D3	$-\frac{\pi}{8c^3c_1^2c_2^2} \left(c_1c_2(c_1^2-c_2^2) \left(\frac{8c^4}{(c_1^2+c_2^2)^2} + \frac{8c^2}{c_1^2+c_2^2} - 9 \right) - (8c^4-9c_1^4+6c_1^2c_2^2-9c_2^4+8c^2(c_1^2+c_2^2)) \arctg\left(\frac{c_2}{c_1}\right) \right)$
	D4	$-\frac{\pi}{8c^3c_1^2c_2^2} \left(c\sqrt{c_1^2+c_2^2-c^2} \left(\frac{2c^2(c_1^4+10c_1^2c_2^2+c_2^4)-3(3c_1^6+c_1^4c_2^2+c_1^2c_2^4+3c_2^6)}{(c_1^2+c_2^2)^2} \right) - \right.$ $\left. - (8c^4-9c_1^4+6c_1^2c_2^2-9c_2^4+8c^2(c_1^2+c_2^2)) \arctg\left(\frac{c}{\sqrt{c_1^2+c_2^2-c^2}}\right) \right)$

$\bar{G}_{2,2}^{+0}$	D1	$\frac{\pi}{10cc_1^3c_2^3} \left(3c\sqrt{c_1^2+c_2^2-c^2}(c_1^2+c_2^2-2c^2) + (3c_1^4-2c_1^2c_2^2+3c_2^4) \arctg\left(\frac{\sqrt{c_1^2+c_2^2-c^2}}{c}\right) \right)$
	D2	$\frac{\pi}{10cc_1^3c_2^3} \left(3c_1c_2(c_1^2-c_2^2) + (3c_1^4-2c_1^2c_2^2+3c_2^4) \arctg\left(\frac{c_1}{c_2}\right) \right)$
	D3	$-\frac{\pi}{10cc_1^3c_2^3} \left(3c_1c_2(c_1^2-c_2^2) - (3c_1^4-2c_1^2c_2^2+3c_2^4) \arctg\left(\frac{c_2}{c_1}\right) \right)$
	D4	$-\frac{\pi}{10cc_1^3c_2^3} \left(3c\sqrt{c_1^2+c_2^2-c^2}(c_1^2+c_2^2-2c^2) - (3c_1^4-2c_1^2c_2^2+3c_2^4) \arctg\left(\frac{c}{\sqrt{c_1^2+c_2^2-c^2}}\right) \right)$

Таблица 7.6 Ядра $\bar{G}_{2,0}^{+2}$, $\bar{G}_{2,1}^{+1}$, $\bar{G}_{1,1}^{+2}$ и $\bar{G}_{2,2}^{+0}$ для модели псевдомаксвелловских молекул

	D1	D2	D3	D4
$\bar{G}_{2,0}^{+2}$	$\frac{4\pi\sqrt{c_1^2+c_2^2-c^2}}{5c^3c_1^3c_2^3} [7c^4+2c_1^4 - c_1^2c_2^2+12c_2^4+c^2(c_1^2-19c_2^2)]$	$\frac{8\pi c_1^2}{5c^3c_2}$	$\frac{4\pi}{c^3c_1^3} [(c^2-c_1^2)(c^2-c_2^2) + \frac{2}{5}(5c^4-10c^2c_2^2+6c_2^4)]$	$\frac{8\pi c^2}{5c_1^3c_2}$
$\bar{G}_{2,1}^{+1}$	$\frac{8\pi\sqrt{c_1^2+c_2^2-c^2}}{75c^2c_1^3c_2^2} [3c^4-2c_1^4 + c_1^2c_2^2+18c_2^4-c^2(c_1^2+21c_2^2)]$	$-\frac{16\pi c_1^2}{75c^2c_2^2}$	$-\frac{16\pi c_2}{75c^2c_1^3} (15c^2-5c_1^2-9c_2^2)$	$-\frac{16\pi}{75c_1^3c_2^2} (6c^2-5c_1^2)$
$\bar{G}_{1,1}^{+2}$	$\frac{8\pi\sqrt{c_1^2+c_2^2-c^2}}{45c^3c_1^2c_2^2} [11c^2(c_1^2+c_2^2) + 7c^4-9(2c_1^4-c_1^2c_2^2+2c_2^4)]$	$\frac{16\pi c_1}{45c^3c_2^2} (10c^2-9c_1^2)$	$\frac{16\pi c_2}{45c^3c_1^2} (10c^2-9c_2^2)$	$\frac{16\pi c^2}{45c_1^2c_2^2}$
$\bar{G}_{2,2}^{+0}$	$-\frac{4\pi\sqrt{c_1^2+c_2^2-c^2}}{25cc_1^3c_2^3} [3c^4-2c_1^4 + c_1^2c_2^2-2c_2^4-c^2(c_1^2+c_2^2)]$	$\frac{8\pi c_1^2}{25cc_2^3}$	$\frac{8\pi c_2^2}{25cc_1^3}$	$\frac{8\pi}{25c_1^3c_2^3} [c^4 - \frac{5}{2}(c^2-c_1^2)(c^2-c_2^2)]$

Таблица 7.7 Ядра $\bar{G}_{2,0}^{+2}$, $\bar{G}_{2,1}^{+1}$, $\bar{G}_{1,1}^{+2}$ и $\bar{G}_{2,2}^{+0}$ для модели твердых шаров

сечения рассеяния. Можно утверждать, что в случае изотропного сечения рассеяния и для промежуточных значений $0 < \mu < 1/2$ нормированные функции $\Psi_{0,0}^{+0}(\omega, \omega_1)$, $\Psi_{1,0}^{+1}(\omega, \omega_1)$ будут слабо изменяться при изменении μ .

Интересно проверить выполнение законов сохранения для полученных выше ядер. Законы сохранения числа частиц, импульса и энергии для простого газа имеют вид

$$\iint \hat{I}(f, f) c^2 d\vec{\Omega} dc = 0, \quad (7.61)$$

$$\iint \vec{\Omega} \hat{I}(f, f) c^3 d\vec{\Omega} dv c = \vec{0}, \quad (7.62)$$

$$\iint \hat{I}(f, f) c^4 d\vec{\Omega} dc = 0 \quad (7.63)$$

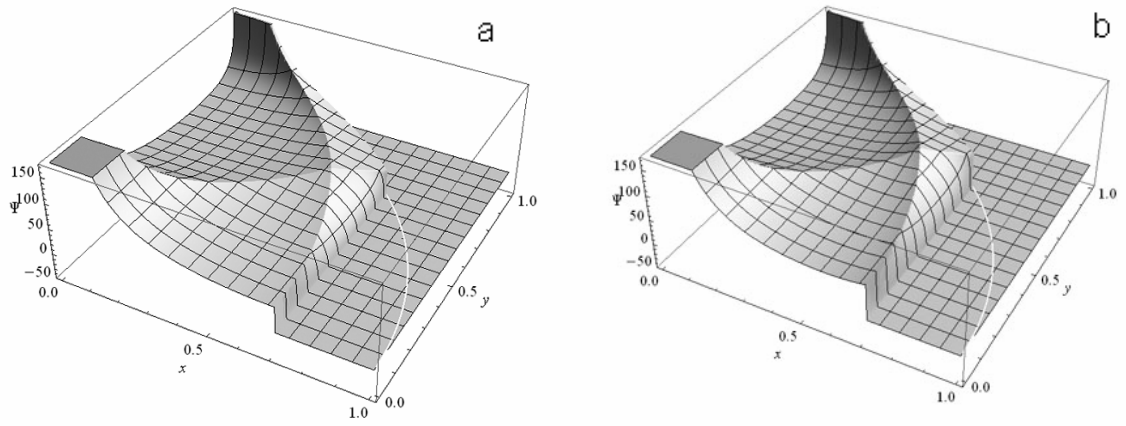


Рисунок 7.1 Приведенные ядра $\Psi_{0,0}^{+0}$ для твердых шаров (a) и псевдомаксвелловских молекул (b)

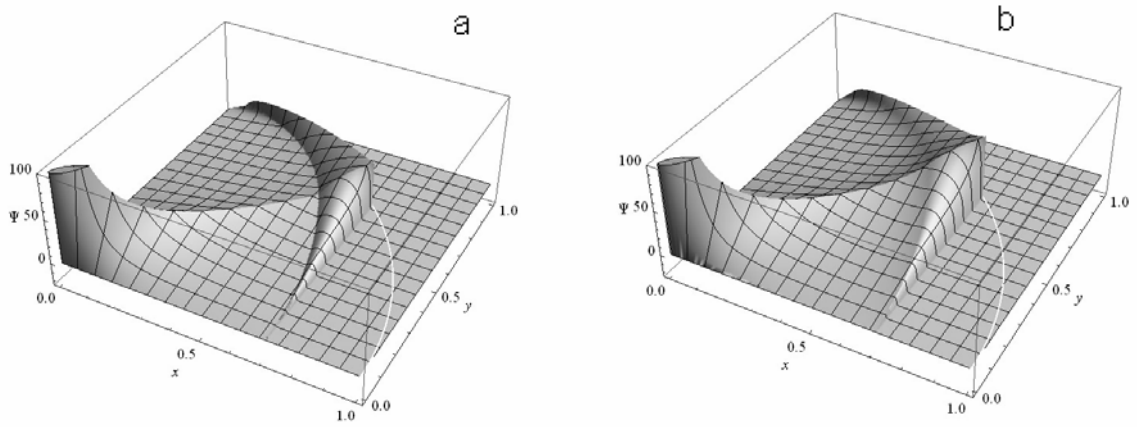


Рисунок 7.2 Приведенные ядра $\Psi_{1,0}^{+1}$ для твердых шаров (a) и псевдомаксвелловских молекул (b)

Здесь $\hat{I}(f, f)$ - безразмерный интеграл столкновений. Для осесимметричной ФР в соответствии с (4.49) он выражается через ядра $\bar{G}_{l_1 l_2}^l(c, c_1, c_2)$ следующим образом

$$\hat{I}(f, f) = \sum_{l_1, l_2} P_l(\cos \theta) \left(\int_0^\infty \int_0^\infty \bar{G}_{l_1 l_2}^l(c, c_1, c_2) f_{l_1}(c_1) f_{l_2}(c_2) c_1^2 c_2^2 dc_1 dc_2 \right), \quad (7.64)$$

где $f_l(c)$ - коэффициенты разложения безразмерной ФР по полиномам Лежандра

$$f(\vec{c}) = \sum_{l=0}^{\infty} f_l(c) P_l(\cos \theta), \quad (7.65)$$

а θ - угол между направлением скорости и выделенной осью. Подставляя (7.64) в (7.61), найдем

$$\sum_{l_1, l_2} \int_0^\infty \left(\int_0^\infty \int_0^\infty \bar{G}_{l_1 l_2}^0(c, c_1, c_2) f_{l_1}(c_1) f_{l_2}(c_2) c_1^2 c_2^2 dc_1 dc_2 \right) c^2 dc = 0. \quad (7.66)$$

Согласно обобщенной теореме Гекке отличны от нуля лишь ядра вида $\bar{G}_{l_1 l_1}^0(c, c_1, c_2)$, и двойная сумма в (7.66) вырождается в однократную. В силу произвольности ФР имеем

$$\int_0^\infty (\bar{G}_{l, l}^0(c, c_1, c_2) + \bar{G}_{l, l}^0(c, c_2, c_1)) c^2 dc = 0, \quad l = 0, 1, \dots \quad (7.67)$$

Пользуясь симметрией ядер интеграла обратных столкновений (6.18), окончательно получаем

$$\int_0^\infty (2\bar{G}_{l, l}^{+0}(c, c_1, c_2) - \bar{G}_{l, l}^{-0}(c, c_1, c_2) - \bar{G}_{l, l}^{-0}(c, c_2, c_1)) c^2 dc = 0, \quad l = 0, 1, \dots \quad (7.68)$$

Закон сохранения импульса (7.63) сводится к соотношению

$$\sum_{l_1, l_2} \int_0^\infty \left(\int_0^\infty \int_0^\infty \bar{G}_{l_1 l_2}^1(c, c_1, c_2) f_{l_1}(c_1) f_{l_2}(c_2) c_1^2 c_2^2 dc_1 dc_2 \right) c^3 dc = 0 \quad (7.69)$$

По теореме Гекке ненулевыми будут только ядра с разницей нижних индексов, равной единице, поэтому в силу произвольности ФР имеем

$$\int_0^\infty (\bar{G}_{l, l+1}^1(c, c_1, c_2) + \bar{G}_{l+1, l}^1(c, c_2, c_1)) c^3 dc = 0, \quad l = 0, 1, \dots \quad (7.70)$$

Учет симметрии ядер интеграла обратных столкновений дает

$$\int_0^\infty (2\bar{G}_{l, l+1}^{+1}(c, c_1, c_2) - \bar{G}_{l, l+1}^{-1}(c, c_1, c_2) - \bar{G}_{l+1, l}^{-1}(c, c_2, c_1)) c^3 dc = 0, \quad l = 0, 1, \dots \quad (7.71)$$

Соотношение для закона сохранения энергии может быть получено аналогично соотношению для закона сохранения числа частиц (7.68) и приводит к

$$\int_0^\infty (2\bar{G}_{l, l}^{+0}(c, c_1, c_2) - \bar{G}_{l, l}^{-0}(c, c_1, c_2) - \bar{G}_{l, l}^{-0}(c, c_2, c_1)) c^4 dc = 0, \quad l = 0, 1, \dots \quad (7.72)$$

Таким образом, полученные ядра должны удовлетворять соотношениям (7.68), (7.72) для $l = 0, 1, 2$ и (7.71) для $l = 0, 1$. Как показывает проверка, эти соотношения действительно удовлетворяются как для псевдомаксвелловских молекул, так и для твердых шаров.

7.3 Численный расчет ядра $G_{0,0}^{+0}(c, c_1, c_2)$

Получение аналитических выражений для ядер $G_{0,0}^{+0}(c, c_1, c_2)$ с помощью обратного преобразования Лапласа возможно не всегда. Даже при наличии аналитического выражения для зависимости линейного ядра от температуры фона расчет $G_{0,0}^{+0}(c, c_1, c_2)$ может

потребовать численного обращения преобразования Лапласа. При отсутствии аналитической зависимости $\bar{L}_l^+(c, c_1; \alpha)$ подход, основанный на использовании обратного преобразования Лапласа, и вовсе может оказаться неприменимым. В этой ситуации перспективным представляется прямой расчет $G_{0,0}^{+0}(c, c_1, c_2)$ с помощью МЭ по формуле (4.37). Эта формула позволяет рассчитывать ядра для произвольного закона взаимодействия, если известны МЭ. Тем не менее, ее использование сталкивается с определенными трудностями – при расчете суммы оказывается необходимым учитывать очень большое число членов. Подобные трудности возникали и при отыскании линейных ядер интеграла столкновений, расчет которых был рассмотрен в Главе 5. Там же был предложен способ учета остатка ряда в формуле (4.37), заключающийся в использовании асимптотики полиномов Сонина при больших индексах и переходе от суммирования к интегрированию по формуле Эйлера-Маклорена. Такой подход позволил с высокой точностью рассчитывать линейное ядро при учете сравнительно небольшого числа членов конечной суммы (см. [115], [117]). В настоящем параграфе применимость подобного подхода продемонстрирована на примере расчета нелинейного ядра $G_{0,0}^{+0}(c, c_1, c_2)$ для случая псевдомаксвелловских молекул. В этом случае МЭ $K_{r_1,0,r_2,0}^{r,0}$ отличны от нуля, только если $r_2 = r - r_1$, что сводит трехкратную сумму в (4.37) к двухкратной. Это, конечно, значительно упрощает расчет ядра, но, вместе с тем, дает возможность отчетливо представить особенности предлагаемого подхода. Наличие аналитического выражения для $G_{0,0}^{+0}(c, c_1, c_2)$, полученного в параграфе 7.1, обеспечивает возможность контроля точности полученных результатов.

Расчет суммы нормированных полиномов Сонина

В случае псевдомаксвелловских молекул отличные от нуля безразмерные МЭ интеграла обратных столкновений $\bar{K}_{r_1,0,r-r_1,0}^{+r,0}$ имеют вид

$$\bar{K}_{r_1,0,r-r_1,0}^{+r,0} = \frac{1}{r+1} . \quad (7.73)$$

Подстановка (7.73) в формулу (4.37) дает

$$\bar{G}_{0,0}^{+0}(c, c_1, c_2) = M(c) \sum_r \frac{S_{1/2}^r(c^2)}{r+1} D(r, c_1^2, c_2^2) , \quad (7.74)$$

где $D(r, c_1^2, c_2^2)$ - сумма произведений нормированных полиномов Сонина,

$$D(r, c_1^2, c_2^2) = \sum_{r_1=0}^r \frac{S_{1/2}^{r-r_1}(c_1^2) S_{1/2}^{r_1}(c_2^2)}{\sigma_{r-r_1,0} \sigma_{r_1,0}} . \quad (7.75)$$

Чтобы реализовать подход к расчету (7.74), аналогичный разработанному нами для вычисления линейного ядра, необходимо найти асимптотику суммы (7.75) при больших значениях индекса r . Используя эту асимптотику и асимптотику полиномов Сонина, можно оценить остаток ряда по r в (7.74) с помощью формулы Эйлера-Маклорена [116].

Обратимся к вычислению асимптотики суммы (7.75). Заметим, что использовать асимптотику нормированных полиномов Сонина в (7.75) можно только при достаточно больших значениях $r - r_1$ и r_1 . Поэтому всю сумму необходимо разбить на три части так, чтобы в средней сумме можно было использовать асимптотику для обоих сомножителей $S_{1/2}^{r-r_1}(c_1^2)/\sigma_{r-r_1,0}$, $S_{1/2}^{r_1}(c_2^2)/\sigma_{r_1,0}$, а в крайних – для одного из них. Выберем $Q = O(r^\varepsilon)$, где ε – малое положительное число, и рассмотрим

$$\begin{aligned} D_1(r, c_1, c_2) &= \sum_{r_1=0}^Q \frac{S_{1/2}^{r-r_1}(c_1^2) S_{1/2}^{r_1}(c_2^2)}{\sigma_{r-r_1,0} \sigma_{r_1,0}}, \\ D_2(r, c_1, c_2) &= \sum_{r_1=Q}^{r-Q} \frac{S_{1/2}^{r-r_1}(c_1^2) S_{1/2}^{r_1}(c_2^2)}{\sigma_{r-r_1,0} \sigma_{r_1,0}}, \\ D_3(r, c_1, c_2) &= \sum_{r_1=r-Q}^r \frac{S_{1/2}^{r-r_1}(c_1^2) S_{1/2}^{r_1}(c_2^2)}{\sigma_{r-r_1,0} \sigma_{r_1,0}}. \end{aligned} \quad (7.76)$$

Асимптотика нормированных полиномов Сонина найдена в параграфе 5.2. Согласно (5.92) для асимптотики $S_{1/2}^r(c^2)/\sigma_{r,0}$ имеем:

$$S_{1/2}^r(c^2)/\sigma_{r,0} = 2\pi \exp(c^2/2) \left[(Rc^2)^{-1/2} \sin(2\sqrt{Rc^2}) - \frac{c^3}{12R^{1/2}} (Rc^2)^{-1/2} \cos(2\sqrt{Rc^2}) + o(R^{-1}) \right], \quad (7.77)$$

где $R = r + 3/4$. При больших значениях R отношение $S_{1/2}^{r-r_1}(c_1^2)/\sigma_{r-r_1,0}$ есть величина порядка $O(R^{-1/2})$, а $S_{1/2}^{r_1}(c_2^2)/\sigma_{r_1,0}$ ограничено в любом интервале изменения r_1 . Это позволяет оценить сумму D_1 :

$$|D_1| \leq \sum_{r_1=0}^Q A \frac{1}{(r-r_1)^{1/2}} = A \frac{Q}{(r-Q)^{1/2}} = O(r^{-1/2+\varepsilon}), \quad (7.78)$$

где A – константа. Аналогичным образом оценивается сумма D_3 .

Перейдем к оценке D_2 – суммы по области, в которой можно использовать асимптотику для каждого из сомножителей. С учетом (7.77) D_2 может быть записана в виде

$$D_2(r, c_1, c_2) = 4\pi^2 \exp\left(\frac{c_1^2 + c_2^2}{2}\right) \sum_{r_1=Q}^{r-Q} \frac{\sin(2c_1\sqrt{r-r_1+3/4}) \sin(2c_2\sqrt{r_1+3/4})}{c_1 c_2 \sqrt{r-r_1+3/4} \sqrt{r_1+3/4}} + O(r^{-1/2-\varepsilon}). \quad (7.79)$$

Сумму (7.79) можно оценить, пользуясь формулой Эйлера-Маклорена [116]

$$\sum_{i=m}^n f(i) = \int_m^n f(x) dx - \frac{1}{2}(f(m) + f(n)) + \sum_{l=1}^{k-1} (-1)^{l+1} \omega_{l+1}(0) (f^{(l)}(n) - f^{(l)}(m)) +$$

$$+ (-1)^{k+1} \int_m^n \omega_k(x) f^{(k)}(x) dx, \quad (7.80)$$

где

$$\omega_1(x) = x - [x] - 1/2, \quad \omega_s(x) = \int \omega_{s-1}(x) dx, \quad \int_0^1 \omega_s(x) dx = 0.$$

Из вида асимптотики $S_{1/2}^r(c^2)/\sigma_{r,0}$ (7.77) следует, что внеинтегральные члены в (7.80) являются величинами порядка $O(r^{-(1+\varepsilon)/2})$. Заметим, что пределы интегрирования в интеграле, входящем в формулу Эйлера-Маклорена, могут быть заменены на 0 и r с сохранением той же оценки остатка. Поэтому асимптотика суммы (7.75) может быть записана в виде

$$D(r, c_1^2, c_2^2) = \int_0^r \frac{\sin(2c_1 \sqrt{r+6/4-(s+3/4)}) \sin(2c_2 \sqrt{s+3/4})}{c_1 c_2 \sqrt{r+6/4-(s+3/4)} \sqrt{s+3/4}} ds + o(r^{-1/2}), \quad (7.81)$$

Однако скорость сходимости асимптотики (7.81) к $D(r, c_1^2, c_2^2)$ существенно увеличивается при учете ошибки, связанной с отличием полиномов Сонина от их асимптотики при малых значениях индекса. Поэтому в (7.75) целесообразно выделить крайние члены, а остальную сумму приблизить интегралом, т.е. аппроксимировать $D(r, c_1, c_2)$ функцией $P(r, M, c_1^2, c_2^2)$ вида

$$P(r, M, c_1^2, c_2^2) = 4\pi^2 \exp((c_1^2 + c_2^2)/2) I(r, M, c_1, c_2) + \sum_{r_1=0}^{M-1} \frac{S_{1/2}^{r-r_1}(c_1^2) S_{1/2}^{r_1}(c_2^2)}{\sigma_{r-r_1,0} \sigma_{r_1,0}} +$$

$$+ \sum_{r_1=r-M+1}^r \frac{S_{1/2}^{r-r_1}(c_1^2) S_{1/2}^{r_1}(c_2^2)}{\sigma_{r-r_1,0} \sigma_{r_1,0}} + \frac{1}{2} \left(\frac{S_{1/2}^{r-M}(c_1^2) S_{1/2}^M(c_2^2)}{\sigma_{r-M,0} \sigma_{M,0}} + \frac{S_{1/2}^M(c_1^2) S_{1/2}^{r-M}(c_2^2)}{\sigma_{r-r_1,0} \sigma_{r_1,0}} \right), \quad (7.82)$$

где

$$I(r, M, c_1, c_2) = \int_M^{r-M} \frac{\sin(2c_1 \sqrt{r+6/4-(s+3/4)}) \sin(2c_2 \sqrt{s+3/4})}{c_1 c_2 \sqrt{r+6/4-(s+3/4)} \sqrt{s+3/4}} ds. \quad (7.83)$$

Чтобы найти границы применимости (7.82) было проведено сравнение суммы $D(r, c_1, c_2)$ и ее асимптотической оценки $P(r, M, c_1^2, c_2^2)$ при различных значениях аргументов. Как выяснилось, приближение $P(r, M, c_1^2, c_2^2)$ является достаточно точным уже при $M=1$. Для примера, на рисунках 7.3, 7.4 приведено сравнение $D(r, c_1, c_2)$ и $P(r, 1, c_1^2, c_2^2)$ при значениях $c_1^2 = 0.001$ и $c_1^2 = 0.1$, $c_2^2 = 1$, $M=1$. В случае $c_1^2 = 0.001$ совпадение удовлетворительно при $r > 2000$, а в случае $c_1^2 = 0.1$ – уже при $r > 200$.

Следующим шагом является отыскание асимптотической оценки интеграла (7.83), дающего главный вклад в асимптотику $D(r, c_1, c_2)$. Сделаем замену переменной $t = (s + 3/4)/N$, где $N = r + 6/4$, и рассмотрим интеграл при больших значениях N .

Представим (7.83) в виде

$$\begin{aligned} \tilde{I}(N, M, c_1, c_2) = I(N - 6/4, M, c_1, c_2) = & \int_0^1 \frac{\sin(2c_1 \sqrt{N} \sqrt{1-t}) \sin(2c_2 \sqrt{N} \sqrt{t})}{c_1 c_2 \sqrt{1-t} \sqrt{t}} dt - \\ & - \int_0^{(M+3/4)/N} \frac{\sin(2c_1 \sqrt{N} \sqrt{1-t}) \sin(2c_2 \sqrt{N} \sqrt{t})}{c_1 c_2 \sqrt{1-t} \sqrt{t}} dt - \\ & - \int_{1-(M+3/4)/N}^1 \frac{\sin(2c_1 \sqrt{N} \sqrt{1-t}) \sin(2c_2 \sqrt{N} \sqrt{t})}{c_1 c_2 \sqrt{1-t} \sqrt{t}} dt. \end{aligned} \quad (7.84)$$

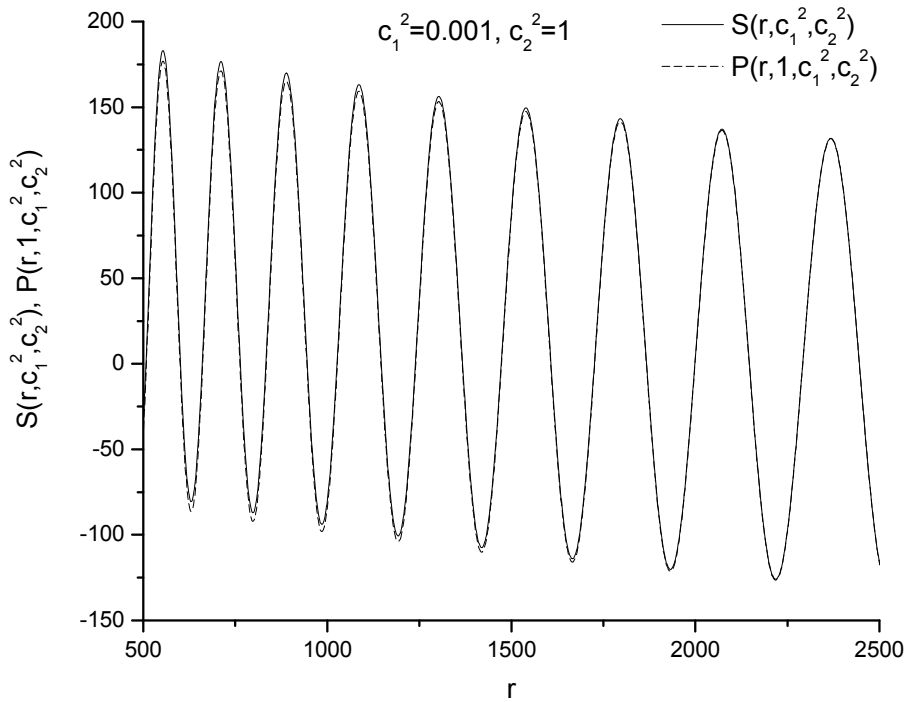


Рисунок 7.3. Сумма $D(r, c_1, c_2)$ и ее оценка $P(r, 1, c_1^2, c_2^2)$ при $c_1^2 = 0.001$, $c_2^2 = 1$.

Для вычисления асимптотики последних двух интегралов перейдем к переменной $\tau = \sqrt{t}$ во втором интеграле и $\tau = \sqrt{1-t}$ в третьем интеграле. После такой замены оба интеграла принимают одинаковый вид, с точностью до перестановки аргументов c_1 и c_2 . Учитывая, что τ^2/N мало и раскладывая отношение $\sin(2c_1 \sqrt{N - \tau^2}) / (N - \tau^2)^{1/2}$ в ряд по τ^2/N , можно получить аналитическую оценку для этих интегралов:

$$\begin{aligned}
Int_1(N, M, c_1, c_2) &= \frac{2}{c_1 c_2} \int_0^{\sqrt{M+3/4}} \left[\frac{\sin(2c_1 \sqrt{N})}{\sqrt{N}} - \frac{\cos(2c_1 \sqrt{N}) c_1 \tau^2}{N} \right] \sin(2c_2 \tau) d\tau = \\
&= \frac{2}{c_1 c_2} \left[\frac{\sin(2c_1 \sqrt{N})}{2c_2 \sqrt{N}} (1 - \cos(2c_2 \sqrt{M+3/4})) - \frac{c_1 \cos(2c_1 \sqrt{N})}{N(2c_2)^3} U(c_2, M) \right]. \quad (7.85)
\end{aligned}$$

Здесь

$$\begin{aligned}
U(x, M) &= -4x^2(M+3/4)\cos(2x\sqrt{M+3/4}) + 4x\sqrt{M+3/4}\sin(2x\sqrt{M+3/4}) + \\
&\quad + 2\cos(2x\sqrt{M+3/4}) - 2 \quad (7.86)
\end{aligned}$$

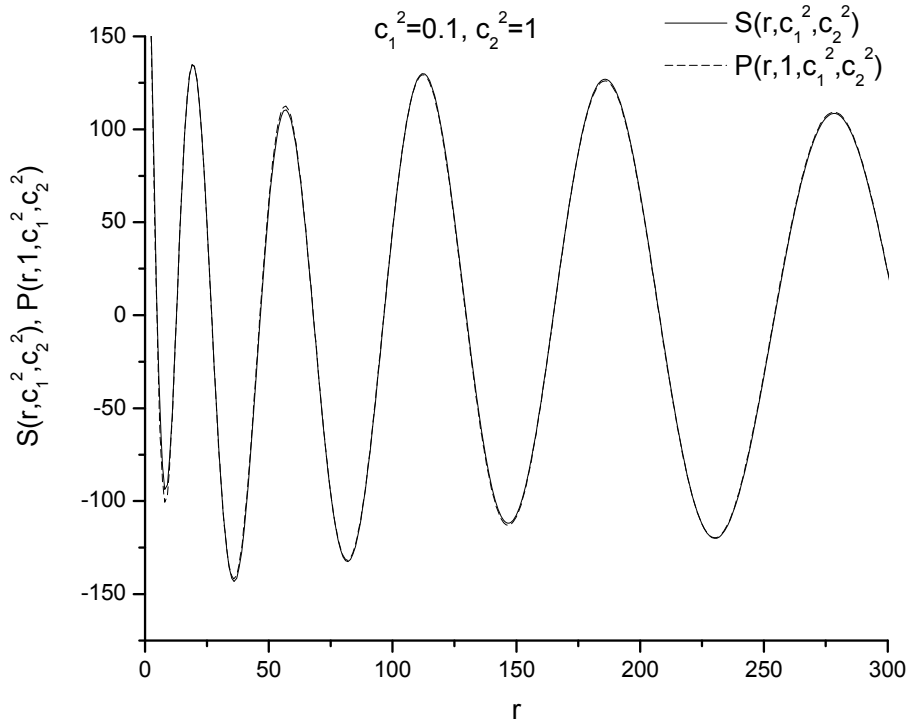


Рисунок 7.4 Сумма $D(r, c_1, c_2)$ и ее оценка $P(r, 1, c_1^2, c_2^2)$ при $c_1^2 = 0.1$, $c_2^2 = 1$.

Второй интеграл, как уже отмечалось, равен первому с переставленными аргументами c_1 и c_2 :

$$Int_2(N, M, c_1, c_2) = Int_1(N, M, c_2, c_1). \quad (7.87)$$

Для вычисления первого слагаемого в (7.84) применим метод стационарной фазы [126]. Согласно этому методу основной вклад в асимптотическое поведение интегралов вида

$$f(x) = \int_{\alpha}^{\beta} g(t) \exp(ixh(t)) dt, \quad (7.88)$$

где x – большой положительный параметр, а $h(t)$ – вещественная функция вещественного переменного t , дают окрестности концов интервала и точек, в которых функция $h(t)$ стационарна, т.е. $h'(t) = 0$. В [126] построено асимптотическое разложение таких интегралов. Пусть

$$f(x) = \int_{\alpha}^{\beta} g(t) \exp(ixh(t))(t - \alpha)^{\lambda-1} (\beta - t)^{\mu-1} dt, \quad (7.89)$$

где $\lambda, \mu \in (0; 1]$, $g(t)$ – функция, имеющая непрерывные производные до N -го порядка включительно на интервале $[\alpha; \beta]$, $h(t)$ – дифференцируемая функция, причем $h'(t) = (t - \alpha)^{\rho-1} (\beta - t)^{\sigma-1} h_1(t)$ $\rho > 1$, $\sigma > 1$, $h_1(t)$ – положительная функция на интервале $[\alpha; \beta]$, имеющая непрерывные производные до N -го порядка включительно. Тогда, как показано в [126],

$$f(x) = A_N(x) - B_N(x) + o(x^{-N/\rho}) + o(x^{-N/\sigma}). \quad (7.90)$$

Здесь

$$A_N(x) = - \sum_{n=0}^{N-1} \frac{k^{(n)}(0)}{n! \rho} \Gamma\left(\frac{n + \lambda}{\rho}\right) \exp\left(\frac{i\pi(n + \lambda)}{2\rho}\right) x^{-(n+\lambda)/\rho} \exp(ixh(\alpha)), \quad (7.91)$$

$$B_N(x) = - \sum_{n=0}^{N-1} \frac{l^{(n)}(0)}{n! \sigma} \Gamma\left(\frac{n + \mu}{\sigma}\right) \exp\left(-\frac{i\pi(n + \mu)}{2\sigma}\right) x^{-(n+\mu)/\sigma} \exp(ixh(\beta)), \quad (7.92)$$

и введены обозначения

$$k(u) = g_1(t) u^{1-\lambda} dt/du, \quad g_1(t) = g(t)(t - \alpha)^{\lambda-1} (\beta - t)^{\mu-1}, \quad u^{\rho} = h(t) - h(\alpha),$$

$$l(v) = g_1(t) v^{1-\mu} dt/dv, \quad v^{\sigma} = h(\beta) - h(t).$$

Достаточно громоздкие выкладки, приведенные в Приложении Е, позволяют записать асимптотическую оценку интеграла (7.84) в виде

$$\begin{aligned} \tilde{I}(N, M, c_1, c_2) = & \frac{1}{c_1 c_2} \left\{ - \frac{\sqrt{\pi} \cos(2\sqrt{N} \sqrt{c_1^2 + c_2^2} - \pi/4)}{(c_1^2 + c_2^2)^{1/4} N^{1/4}} - \frac{\sqrt{\pi} \cos(2\sqrt{N} \sqrt{c_1^2 + c_2^2} - 3\pi/4)}{16(c_1^2 + c_2^2)^{3/4} N^{3/4}} + \right. \\ & + \frac{\sin(2c_1 \sqrt{N})}{c_2 \sqrt{N}} \cos(2c_2 \sqrt{M + 3/4}) + \frac{c_1 \cos(2c_1 \sqrt{N})}{2c_2^3 N} \left(1 + \frac{U(c_2, M)}{2}\right) + \\ & \left. + \frac{\sin(2c_2 \sqrt{N})}{c_1 \sqrt{N}} \cos(2c_1 \sqrt{M + 3/4}) + \frac{c_2 \cos(2c_2 \sqrt{N})}{2c_1^3 N} \left(1 + \frac{U(c_1, M)}{2}\right) \right\}, \quad (7.93) \end{aligned}$$

где $U(c, M)$ определяется выражением (7.90).

Область применимости асимптотического выражения (7.93) для интеграла $I(r, M, c_1, c_2) = \tilde{I}(r + 6/4, M, c_1, c_2)$ была исследована численно. При близких значениях аргументов, т.е. при c_1/c_2 порядка единицы, (7.93) хорошо приближает $I(r, M, c_1, c_2)$

начиная с r порядка нескольких сотен. Однако, как выяснилось, существует область значений c_1, c_2 , в которой асимптотическое разложение (7.93) не обеспечивает достаточную точность расчета интеграла $\tilde{I}(N, M, c_1, c_2)$ даже для N порядка десятков тысяч. Это происходит при $c_1 \ll 1$, когда $c_1 \sqrt{N}$ небольшая величина. Причина этого достаточно ясна. В том случае, когда $c_1 \sqrt{N} = O(1)$, множитель $\sin(2c_1 \sqrt{N} \sqrt{1-\tau^2})$ в подынтегральной функции интеграла (7.83) не является быстро осциллирующей функцией τ . Поэтому использованное в методе стационарной фазы разбиение подынтегральной функции на медленно меняющуюся и быстро осциллирующую функции в рассматриваемом случае несправедливо. В этой ситуации целесообразно применить другой метод расчета интеграла (7.83).

Представим $\tilde{I}(N, M, c_1, c_2)$ в виде

$$\tilde{I}(M, N, c_1, c_2) = \frac{2}{c_2} \operatorname{Im} \int_{\sqrt{A}}^{\sqrt{B}} f(\tau) \exp(i2c_2 \sqrt{N} \tau) d\tau, \quad (7.94)$$

где $A = (M + 3/4)/N$, $B = 1 - (M + 3/4)/N$. Интегрируя (7.94) по частям и пользуясь ограниченностью $f(\tau)$ и ее производных, получим ряд по обратным степеням $c_2 \sqrt{N}$. Первые члены ряда имеют вид

$$\begin{aligned} \tilde{I}(M, N, c_1, c_2) = & \frac{2}{c_2} \left(-\frac{\cos(2c_2 \sqrt{N} \tau) \sin(2c_1 \sqrt{N} \sqrt{1-\tau^2})}{2c_2 (c_1 \sqrt{N} \sqrt{1-\tau^2})} \right)_{\sqrt{A}}^{\sqrt{B}} + \frac{\tau}{1-\tau^2} \frac{\sin(2c_2 \sqrt{N} \tau)}{4c_2^2 \sqrt{N}} \times \\ & \times \left(\frac{\sin(2c_1 \sqrt{N} \sqrt{1-\tau^2})}{(c_1 \sqrt{1-\tau^2})} - 2 \cos(2c_1 \sqrt{N} \sqrt{1-\tau^2}) \right)_{\sqrt{A}}^{\sqrt{B}} + \frac{\cos(2c_2 \sqrt{N} \tau)}{(2c_2 \sqrt{N})^3} \left(\frac{1+2\tau^2}{(1-\tau^2)^2} \times \right. \\ & \times \left[\frac{\sin(2c_1 \sqrt{N} \sqrt{1-\tau^2})}{(c_1 \sqrt{1-\tau^2})} - 2\sqrt{N} \cos(2c_1 \sqrt{N} \sqrt{1-\tau^2}) \right] - 4c_1 N \frac{\tau^2}{(1-\tau^2)} \frac{\sin(2c_1 \sqrt{N} \sqrt{1-\tau^2})}{(\sqrt{1-\tau^2})} \Big|_{\sqrt{A}}^{\sqrt{B}} \Big). \quad (7.95) \end{aligned}$$

Такое представление будет давать аппроксимацию интеграла для значений N порядка $O(c_1^{-2})$. Конкретное значение верхней границы области применимости такого приближения может быть определено лишь с помощью численного эксперимента.

На рисунках 7.5, 7.6 приведены результаты сравнения суммы $D(r, c_1^2, c_2^2)$ при $c_1^2 = 0.1$ и $c_1^2 = 0.01$ с ее приближениями $P_1(r, M, c_1^2, c_2^2)$ и $P_2(r, M, c_1^2, c_2^2)$, в которых интеграл $I(r, M, c_1, c_2) = \tilde{I}(r + 6/4, M, c_1, c_2)$ оценивается с помощью (7.93) и (7.95) соответственно. В обоих случаях $M = 1$, $c_2^2 = 1$. При $c_1^2 = 0.1$ асимптотика (7.93) оказывается более точной практически для всех значений N (начиная с нескольких десятков), а при $c_1^2 = 0.01$ интеграл

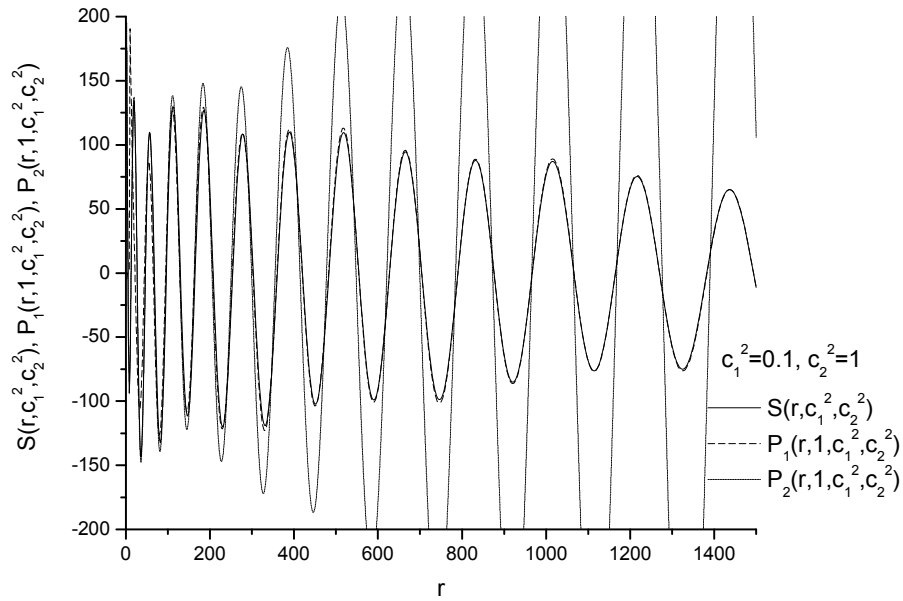


Рисунок 7.5 Сумма $D(r, c_1, c_2)$ и ее оценки $P_1(r, 1, c_1^2, c_2^2)$, $P_2(r, 1, c_1^2, c_2^2)$ при $c_1^2 = 0.1$, $c_2^2 = 1$.

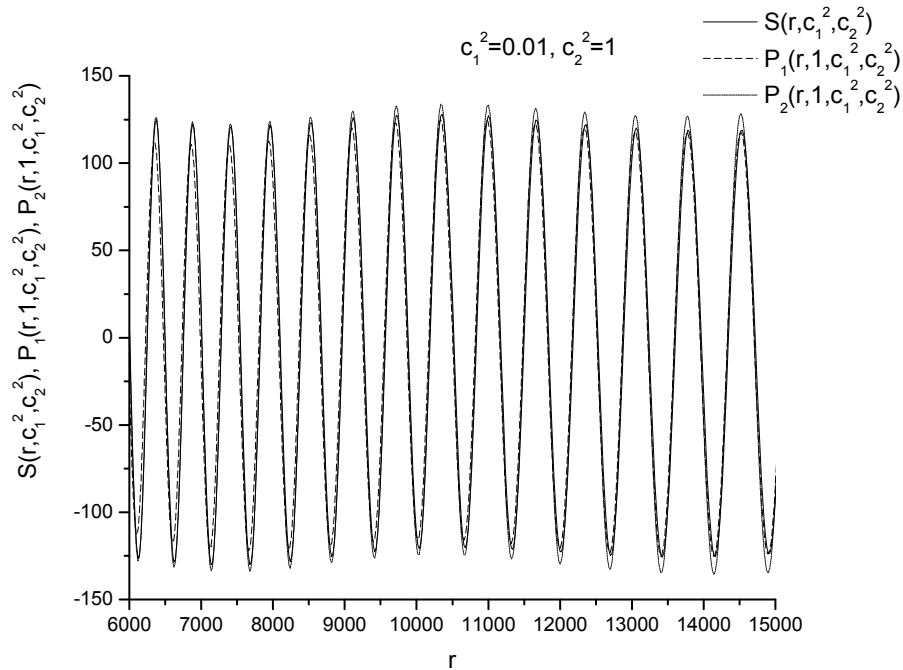


Рисунок 7.6 Сумма $D(r, c_1, c_2)$ и ее оценки $P_1(r, 1, c_1^2, c_2^2)$, $P_2(r, 1, c_1^2, c_2^2)$ при $c_1^2 = 0.01$, $c_2^2 = 1$.

лучше приближается функцией (7.95) до значений $N \approx 10000$, в то время как для больших значений N лучше оказывается асимптотика (7.93). С уменьшением c_1^2 граница областей применимости (7.93) и (7.95) сдвигается вправо, и при $c_1^2 \sim 0.001$ приближение (7.95)

оказывается лучше практически для всех N , которые необходимо учитывать (вплоть до сотен тысяч).

Вычисление внешней суммы

Вернемся к расчету ядра $\bar{G}_{0,0}^{+0}(c, c_1, c_2)$. Для вычисления внешней суммы (7.74) снова воспользуемся формулой Эйлера-Маклорена (7.80), которая позволяет записать ядро в виде:

$$\begin{aligned} \bar{G}_{0,0}^{+0(m)}(c, c_1, c_2) = M(c) & \left\{ \sum_{r=0}^{m-1} \frac{S_{1/2}^r(c^2)}{r+1} \sum_{r_1=0}^r \frac{S_{1/2}^{r-r_1}(c_1^2) S_{1/2}^{r_1}(c_2^2)}{\sigma_{r-r_1} \sigma_{r_1}} + \right. \\ & \left. + \frac{1}{2} \frac{S_{1/2}^m(c^2)}{m+1} \sum_{r_1=0}^m \frac{S_{1/2}^{m-r_1}(c_1^2) S_{1/2}^{r_1}(c_2^2)}{\sigma_{m-r_1} \sigma_{r_1}} + \int_m^{\infty} \frac{S_{1/2}^r(c^2)}{r+1} P(r, M, c_1^2, c_2^2) dr \right\}. \end{aligned} \quad (7.96)$$

Таким образом, асимптотический остаток суммы по r оценивается интегралом. Нижний предел интегрирования m должен быть достаточно большим, чтобы можно было использовать асимптотику $S_{1/2}^r(c^2)$. Тогда интеграл в (7.96) приближается выражением

$$g_m(c, c_1, c_2) = \frac{\exp(c^2/2)}{c\sqrt{\pi}} \int_m^{\infty} \frac{\sin(2c\sqrt{r+3/4})}{\sqrt{r+1}\sqrt{r+3/4}} P(r, M, c_1^2, c_2^2) dr. \quad (7.97)$$

Здесь $P(r, M, c_1^2, c_2^2)$ – асимптотика суммы по r_1 – определяется формулой (7.82). Для входящего в (7.82) интеграла $I(r, M, c_1, c_2)$ можно использовать асимптотику (7.93) или приближение (7.95), в зависимости от индекса r . Значение m_1 , при котором следует перейти с одного метода расчета $I(r, M, c_1, c_2)$ на другой, зависит от аргументов c, c_1, c_2 . В обоих случаях подинтегральная функция в (7.97) раскладывается в ряд по $1/(r+\alpha)^{1/2}$, где $\alpha = 3/2$ в случае использования (7.95) и $\alpha = 3/4$ при использовании (7.93). В результате получается набор однотипных интегралов, выражающихся через интегральный синус (для приближения (7.93)) или через интегральный синус и функции

$$Ds(u) = \int_u^{\infty} \frac{\sin x}{x^{3/2}} dx, \quad Dc(u) = \int_u^{\infty} \frac{\cos x}{x^{3/2}} dx. \quad (7.98)$$

При расчете ядра квадратуры $Ds(u), Dc(u)$ находятся численно. Окончательные выражения не приводим из-за их громоздкости.

Рассмотрим остальные слагаемые в (7.82). Как обсуждалось выше, хорошая точность расчета внутренней суммы обеспечивается уже при $M=1$. Подставляя в (7.82) $M=1$ и используя асимптотику полиномов Сонина, легко убедиться, что вклад от рассматриваемых слагаемых приведет к появлению в (7.97) интегралов вида

$$J_1 = \int_m^\infty \frac{\sin(2c\sqrt{r+3/4})}{\sqrt{r+1}\sqrt{r+3/4}} \frac{\sin(2c_1\sqrt{r+3/4})}{c_1\sqrt{r+3/4}} dr, \quad J_2 = \int_m^\infty \frac{\sin(2c\sqrt{r+3/4})}{\sqrt{r+1}\sqrt{r+3/4}} \frac{\sin(2c_2\sqrt{r-1/4})}{c_2\sqrt{r-1/4}} dr. \quad (7.99)$$

Снова раскладывая подинтегральные функции в ряд по $1/R^{1/2}$, где $R = r + 3/4$, можно записать эти интегралы через интегральный синус и элементарные функции. При этом ограничимся двумя первыми членами разложения.

При вычислении второго слагаемого в выражении для ядра (7.96) можно снова воспользоваться асимптотическими выражениями для полиномов Сонина и суммы по r_1 :

$$\frac{1}{2} \frac{S_{1/2}^m(c^2)}{m+1} \sum_{r_1=0}^m \frac{S_{1/2}^{m-r_1}(c_1^2) S_{1/2}^{r_1}(c_2^2)}{\sigma_{m-r_1} \sigma_{r_1}} = \frac{\exp(c^2/2) \sin(2c\sqrt{r+3/4})}{2c\sqrt{\pi} \sqrt{r+1}\sqrt{r+3/4}} P(r, 1, c_1^2, c_2^2). \quad (7.100)$$

Конечная сумма по $r < m$ в (7.96) вычисляется непосредственно.

Остается еще рассмотреть частный случай $c_1 = 0$ (или $c_2 = 0$). В этом случае внутренняя сумма записывается в виде

$$D(r, 0, c_2^2) = 4\pi \sum_{r_1=0}^r \frac{S_{1/2}^{r_1}(c_2^2)}{\sigma_{r_1,0}}. \quad (7.101)$$

Как и в случае $c_1 \neq 0$, при $r_1 > M$ можно воспользоваться асимптотикой полинома Сонина и перейти от суммирования к интегрированию по формуле Эйлера–Маклорена. Это дает

$$P(r, M, 0, c_2^2) = 8\pi^2 \exp(c_2^2/2) \int_{M+1}^r \frac{\sin(2c_2\sqrt{t+3/4})}{c_2\sqrt{t+3/4}} dt + 4\pi \sum_{r_1=0}^M \frac{S_{1/2}^{r_1}(c_2^2)}{\sigma_{r_1}} + 4\pi \frac{1}{2} \frac{S_{1/2}^{M+1}(c_2^2)}{\sigma_{M+1}}. \quad (7.102)$$

Беря интеграл и заменяя последнее слагаемое асимптотикой, получаем

$$P(r, M, 0, c_2^2) = \frac{8\pi^2}{c_2^2} \exp(c_2^2/2) \left(\cos(2c_2\sqrt{M+7/4}) - \cos(2c_2\sqrt{r+3/4}) + \frac{c_2 \sin(2c_2\sqrt{M+7/4})}{2\sqrt{M+7/4}} \right) + 4\pi \sum_{r_1=0}^M \frac{S_{1/2}^{r_1}(c_2^2)}{\sigma_{r_1,0}}. \quad (7.103)$$

Асимптотический остаток суммы по r может быть найден с помощью описанных выше приемов, при этом можно положить $M=1$. Подинтегральная функция имеет ту же структуру, что в предыдущем случае, и окончательный результат, как и прежде, выражается через элементарные функции и интегральный синус.

Результаты расчета ядра

Нелинейное ядро интеграла обратных столкновений $\bar{G}_{0,0}^{+0}(c, c_1, c_2)$ в случае псевдомаксвелловских молекул рассчитывалось в соответствии с описанным выше алгоритмом для различных c_1, c_2 в сечении $c=1$, так как значение ядра для других

значений s может быть получено с помощью соотношения подобия (6.31). Поскольку для псевдомаксвелловских молекул параметр $\mu = 0$, то это соотношение имеет вид

$$\overline{G}_{0,0}^{+0}(sc, sc_1, sc_2) = s^{-3} \overline{G}_{0,0}^{+0}(c, c_1, c_2) \quad (7.104)$$

Анализ проведенных расчетов позволяет заключить, что число членов в конечной сумме, которое необходимо учитывать для отыскания ядра с заданной точностью, зависит от отношения аргументов c_1, c_2 . Типичное значение m – порядка нескольких тысяч при относительной ошибке расчета порядка тысячных. При c_1^2/c_2^2 порядка единицы можно ограничиться несколькими сотнями членов конечной суммы. По мере уменьшения c_1^2/c_2^2 область применимости полученных выше асимптотических выражений сдвигается в сторону увеличения m , и при $c_1^2/c_2^2 \sim 0.01$ для достижения заданной точности необходимо учитывать несколько десятков тысяч членов конечной суммы. При дальнейшем уменьшении c_1^2/c_2^2 сходимость алгоритма продолжает ухудшаться, однако ядро в этой области достаточно гладко зависит от c_1 . Это дает возможность пользоваться интерполяцией в области $0 < c_1 < 0.1$. При $c_1 = 0$ ядро вычисляется по формулам, полученным для этого предельного случая, в конечной сумме приходится учитывать несколько тысяч членов. Значение c_2 тоже влияет на сходимость, хотя и слабее, чем отношение c_1^2/c_2^2 . Хуже всего точность расчета с помощью асимптотики при $c_2^2 = 1$, $c_1^2 \sim 0.01$. Однако прямое суммирование по формулам (7.74), (7.75) с учетом десятков тысяч членов внешней суммы в этом случае не позволяет даже приблизиться к истинному значению ядра.

На рисунках 7.7 – 7.10 приведены результаты расчета ядра $\overline{G}_{0,0}^{+0(m)}(1, c_1, c_2)$ по описанному алгоритму в зависимости от числа членов в конечной сумме для некоторых значений аргументов. Для сравнения приведены конечные суммы

$$H^{+(m)}(1, c_1, c_2) = \sum_{r=0}^{m-1} \frac{S_{1/2}^r(c^2)}{r+1} \sum_{r_1=0}^r \frac{S_{1/2}^{r-r_1}(c_1^2) S_{1/2}^{r_1}(c_2^2)}{\sigma_{r-r_1,0} \sigma_{r_1,0}}. \quad (7.105)$$

На рисунках показаны также истинные значения ядра, полученного в аналитическом виде в параграфе 7.1 и представленного в таблице 7.2. Как показывает численный расчет, в большинстве случаев учет остатка $g_m(c, c_1, c_2)$ улучшает сходимость на несколько порядков. Например, при $c_1 = c_2 = 0.5$, $c = 1$ расчет дает значения ядра порядка 10^{-4} (согласно отмеченным в параграфе 7.1 свойствам ядра $\overline{G}_{0,0}^{+0}(1, c_1, c_2)$ его истинное значение при $c_1^2 + c_2^2 < 1$ равно нулю). Конечная сумма при учете нескольких тысяч членов осциллирует с

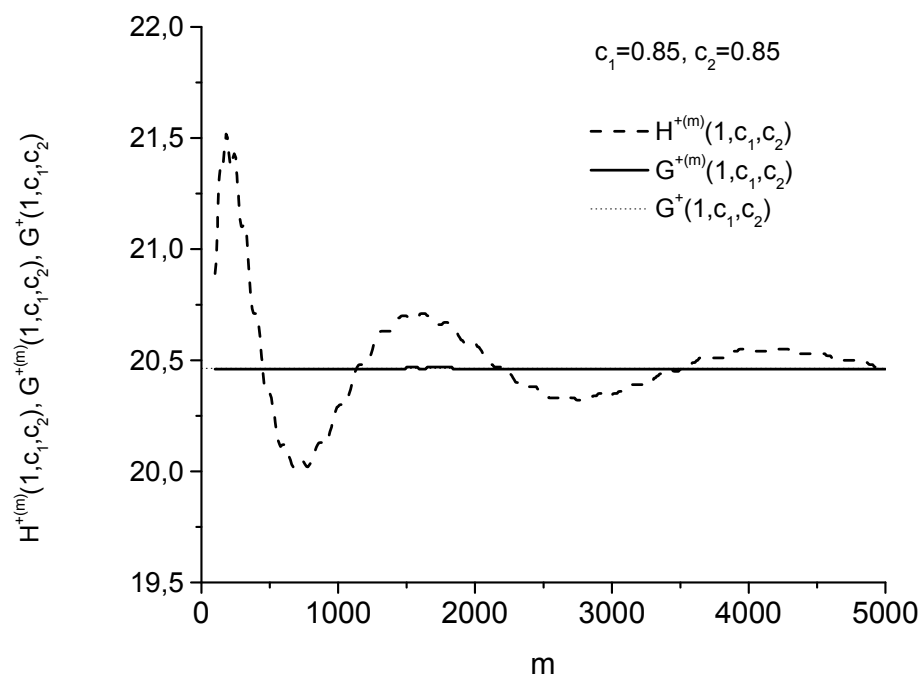


Рисунок 7.7 Зависимость ядра $\overline{G}_{0,0}^{+0(m)}(1, c_1, c_2)$ и конечной суммы $H^{+(m)}(1, c_1, c_2)$ от числа учитываемых членов при $c_1 = 0.85$, $c_2 = 0.85$

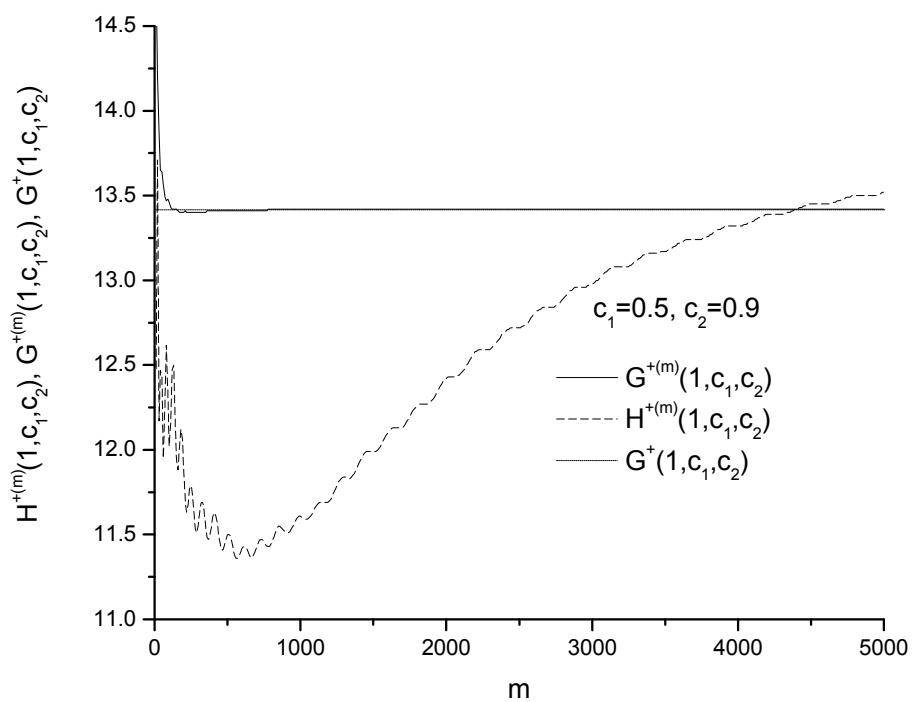


Рисунок 7.8 Зависимость ядра $\overline{G}_{0,0}^{+0(m)}(1, c_1, c_2)$ и конечной суммы $H^{+(m)}(1, c_1, c_2)$ от числа учитываемых членов при $c_1 = 0.5$, $c_2 = 0.9$

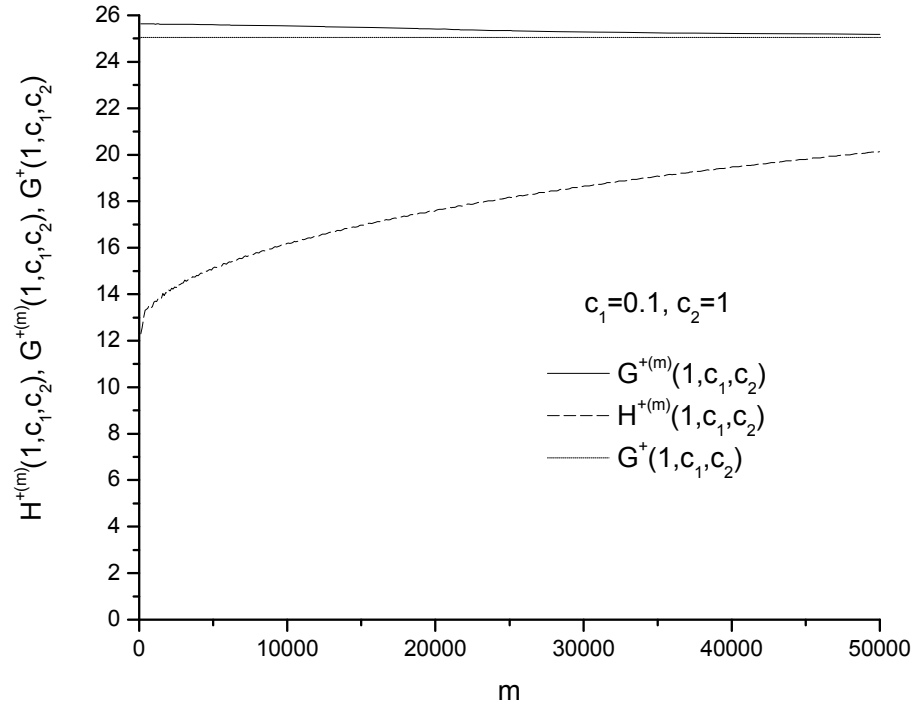


Рисунок 7.9 Зависимость ядра $\overline{G}_{0,0}^{+0(m)}(1, c_1, c_2)$ и конечной суммы $H^{+(m)}(1, c_1, c_2)$ от числа учитываемых членов при $c_1 = 0.1, c_2 = 1$.

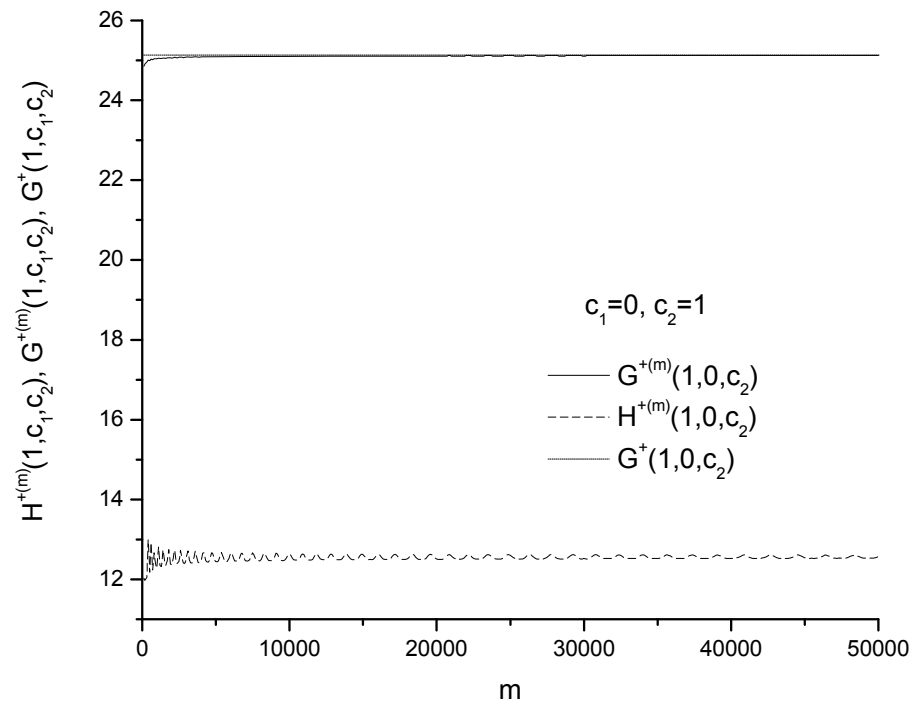


Рисунок 7.10 Зависимость ядра $\overline{G}_{0,0}^{+0(m)}(1, c_1, c_2)$ и конечной суммы $H^{+(m)}(1, c_1, c_2)$ от числа учитываемых членов при $c_1 = 0., c_2 = 1$.

амплитудой ~ 0.1 . Особенно заметен вклад $g_m(c, c_1, c_2)$ в ядро вблизи гребня, при $c_1^2 + c_2^2 - c^2 \ll 1$ (рисунок 7.9). Интересен частный случай $c_2^2 = c^2 = 1, c_1 = 0$ (рисунок 7.10).

Таким образом, разработанная методика позволяет рассчитывать нелинейное ядро интеграла обратных столкновений в случае псевдомаксвелловских молекул с хорошей точностью, что подтверждается сравнением с найденным в [127] и представленным в параграфе 7.1 аналитическим выражением. Есть основания полагать, что подобный подход может быть применен к расчету нелинейных ядер для произвольных псевдостепенных потенциалов взаимодействия.

7.4 Решение задач однородной нелинейной релаксации

Полученные в предыдущих параграфах 7.1, 7.2, 7.3, 6.2 ядра прямых и обратных нелинейных интегралов столкновений позволяют рассмотреть одну из фундаментальных задач кинетической теории газов - задачу нелинейной релаксации сильно неравновесной по скоростям ФР к равновесному распределению. Отметим, что ранее подход, использующий ядра интеграла столкновений применялся рядом исследователей для решения линейных задач. Такой подход был, например, применен в [52, 56] для решения некоторых граничных задач кинетической теории газов и отыскания пристеночных скачков. Единственными известными ядрами к моменту появления этих работ были ядра линейного интеграла столкновений для твердых шаров, полученные еще в [41]. Именно они и были использованы авторами [52, 56] для расчета интеграла столкновений линеаризованного уравнения Больцмана.

В этом параграфе мы рассмотрим несколько задач нелинейной релаксации для пространственно однородной изотропной по скоростям ФР. Мы рассмотрим два вида сечений взаимодействия – псевдомаксвелловские молекулы и твердые шары. Будем полагать, что температура равновесного максвеллиана, к которому стремится ФР в процессе релаксации, есть T . При изучении релаксации особое внимание будет уделено поведению хвоста ФР. Мы покажем, что метод, основанный на использовании ядер нелинейного интеграла столкновений, позволяет строить ФР с очень высокой точностью до скоростей порядка $10v_T$ (v_T - тепловая скорость).

В случае пространственно однородной и изотропной по скоростям ФР уравнение Больцмана в безразмерных переменных приобретает вид (см. (4.1), (4.2), (4.33), (4.38))

$$\frac{\partial f(c, t)}{\partial t} = \int_0^\infty \int_0^\infty \bar{G}_{0,0}^0(c, c_1, c_2) f(c_1) f(c_2) c_1^2 dc_1 c_2^2 dc_2 \quad (7.106)$$

Здесь c - безразмерная скорость, измеряемая в единицах тепловой скорости, соответствующей равновесной температуре T , t - безразмерное время в единицах $\tau_T = 1/(n_0 v_T \Sigma(v_T))$, а $f(c, t)$ - безразмерная функция распределения. Представим ядро $\bar{G}_{0,0}^0(c, c_1, c_2)$ в виде разности ядер прямых и обратных столкновений.

$$\bar{G}_{0,0}^0(c, c_1, c_2) = \bar{G}_{0,0}^{+0}(c, c_1, c_2) - \bar{G}_{0,0}^{-0}(c, c_1, c_2) \quad (7.107)$$

При вычислении интеграла столкновений и численном решении кинетического уравнения вместо функции распределения f будем использовать относительную ФР $\bar{f}$, представляющую собой ФР, отнесенную к максвеллиану

$$\bar{f}(c) = f(c) \exp(c^2) \pi^{3/2}. \quad (7.108)$$

Введение такой функции позволяет оценить точность описания ФР в области больших скоростей. Кинетическое уравнение при этом приобретает вид

$$\begin{aligned} \frac{\partial \bar{f}(c)}{\partial t} = & \frac{\exp(c^2)}{\pi^{3/2}} \int_0^\infty \int_0^\infty \bar{G}_{0,0}^{+0}(c, c_1, c_2) \exp(-c_1^2) c_1^2 \bar{f}(c_1) \exp(-c_2^2) c_2^2 \bar{f}(c_2) dc_1 dc_2 - \\ & - \frac{1}{\pi^{3/2}} \bar{f}(c) \int_0^\infty \bar{L}_G^0(c, c_1) \exp(-c_1^2) c_1^2 \bar{f}(c_1) dc_1. \end{aligned} \quad (7.109)$$

Здесь учтена связь (6.49) между ядром интеграла прямых столкновений и ядром $\bar{L}_G^0(c, c_2)$.

Интегралы по бесконечному интервалу целесообразно вычислять с помощью квадратурной формулы Гаусса-Кристоффеля:

$$\int_0^\infty g(x) \exp(-x) \sqrt{x} dx \approx \sum_{k=1}^N p_k^N g(x_k^N). \quad (7.110)$$

Узлы x_k^N в этой формуле совпадают с корнями полиномов Сонина $S_{1/2}^N(x)$, ортогональных на интервале $(0, \infty)$ с весом $\exp(-x) \sqrt{x}$. Веса p_k могут быть определены по формулам

$$p_k^N = \frac{A_N}{A_{N-1}} \frac{\gamma_{N-1}}{(S_{1/2}^N(x_k^N))' S_{1/2}^{N-1}(x_k^N)} \quad (7.111)$$

Можно показать, что корни полинома $S_{1/2}^N(x)$ лежат в интервалах $(0, x_1^{N-1})$, (x_1^{N-1}, x_2^{N-1}) , ..., (x_{N-1}^{N-1}, ∞) , где x_i^{N-1} , $i = 1, \dots, N-1$ - корни полинома $S_{1/2}^{N-1}(x)$. Это позволяет легко организовать расчет x_i^N в цикле по N , поскольку каждый из указанных интервалов известен на текущем шаге и содержит один корень.

Непосредственное использование (7.110) для вычисления интеграла обратных столкновений в (7.109) затруднительно. Дело в том, что квадратурная формула дает хорошую оценку интеграла только в случае гладких подинтегральных функций. Между тем

найденные нами ядра нелинейного интеграла обратных столкновений $\bar{G}_{0,0}^{+0}(c, c_1, c_2)$ имеют разрывы частных производных по переменным c_1 и c_2 в точках $c_1 = c$ и $c_2 = c$. Чтобы обойти эту трудность, перейдем к координатам c, r, φ в уравнении (7.109). Координаты r, φ связаны с c_1, c_2 соотношениями $c_1 = r \cos \varphi, c_2 = r \sin \varphi$ (то есть, переходим к полярным координатам в плоскости $c_1 c_2$). В полярных координатах координатные линии не совпадают с линиями излома ядра, поэтому после интегрирования по φ получаем гладкую функцию, и второе интегрирование может быть выполнено по квадратурной формуле. Интеграл по φ берется по конечному промежутку, что упрощает расчет. Учитывая, что $\bar{G}_{0,0}^{+0}(c, r \cos \varphi, r \sin \varphi) = 0$ при $r < c$, и что подинтегральная функция симметрична относительно переменных c_1, c_2 , интеграл обратных столкновений можно записать в виде:

$$I^+(c) = \frac{2 \exp(c^2)}{\pi^{3/2}} \int_c^\infty \int_0^{\pi/4} \bar{G}_{0,0}^{+0}(c, r \cos \varphi, r \sin \varphi) \exp(-r^2) r^5 \times \\ \times \cos^2 \varphi \cdot \sin^2 \varphi \cdot \bar{f}(r \cos \varphi) \bar{f}(r \sin \varphi) dr d\varphi. \quad (7.112)$$

Чтобы подинтегральная функция была гладкой, а интегрирование велось от нуля, нужно перейти к переменной $u = r^2 - c^2$. Поскольку для ядер, соответствующих степенным потенциалам взаимодействия, выполняются соотношения подобия (6.31), то в (7.112) можно перейти к ядру, первый аргумент которого равен единице, т.е. к ядру $\bar{G}_{0,0}^{+0}(1, c_1/c, c_2/c)$. Это дает

$$I^+(c) = \frac{1}{\pi^{3/2}} \int_0^\infty H_\varphi(c, u) \frac{(u + c^2)^2}{c^{3-2\mu} \sqrt{u}} \exp(-u) \sqrt{u} du, \quad (7.113)$$

Здесь введено обозначение

$$H_\varphi(c, u) = \int_0^{\pi/4} G(1, \sqrt{1+u/c^2} \cos \varphi, \sqrt{1+u/c^2} \sin \varphi) \times \\ \times \cos^2 \varphi \cdot \sin^2 \varphi \cdot \bar{f}(\sqrt{u+c^2} \cos \varphi) \bar{f}(\sqrt{u+c^2} \sin \varphi) d\varphi \quad (7.114)$$

и выделена весовая функция, соответствующая квадратурной формуле (7.110). Параметр μ , как это уже неоднократно отмечалось, равен нулю для псевдомаксвелловских молекул и 0.5 для потенциала твердых шаров.

Значение интеграла $H_\varphi(c, u)$ по конечному промежутку $[0; \pi/4]$ легко находится численно. В разработанной нами программе для этого используется метод Симпсона с неравномерной сеткой. Подинтегральная функция в (7.113) не имеет особенностей за исключением, быть может, интегрируемой особенности в нуле, и является гладкой.

Интересно отметить, что для случая псевдомаксвелловских молекул при $\bar{f}(c_1) = \bar{f}(c_2) \equiv 1$ функция

$$W(c, u) = H_\varphi(c, u) \frac{(u + c^2)^2}{c^3 \sqrt{u}} \quad (7.115)$$

не зависит ни от одного из своих аргументов и равна константе: $W(c, u) \equiv 2\pi$. Этот результат легко получить, используя аналитическое выражение для ядра, приведенное в таб.7.2. При $\bar{f}(c_1) = \bar{f}(c_2) \equiv 1$ интеграл (7.114) берется аналитически как с ядром для псевдомаксвелловских молекул, так и с ядром для твердых шаров. В случае твердых шаров $W(c, u)$ не является константой, а представляет собой гладкую функцию. Очевидно, что для произвольных гладких функций распределения $W(c, u)$ в обоих случаях останется гладкой. Таким образом, для вычисления внешнего интеграла можно использовать квадратурную формулу:

$$I^+(c) = \frac{1}{\pi^{3/2}} \sum_{k=1}^N p_k H_\varphi(c, u_k) \frac{(u_k + c^2)^2}{c^n \sqrt{u_k}} = \frac{1}{\pi^{3/2}} \sum_{k=1}^N p_k W(c, u_k). \quad (7.116)$$

Точность вычисления интеграла обратных столкновений по формулам (7.116), (7.114) была проверена для случая псевдомаксвелловских молекул в ситуации, когда $\bar{f}(c)$ представляет собой линейную комбинацию нулевого и первого полиномов Сонина (в этом случае задача релаксации имеет аналитическое решение). Выяснилось, что при суммировании по 30 узлам относительная ошибка интегрирования $\sim 10^{-5}$ для значений c в интервале $[0, 10v_T]$ (при больших значениях c точность ухудшается).

Рассмотрим теперь процедуру расчета интеграла прямых столкновений

$$I^-(c) = \frac{1}{\pi^{3/2}} \bar{f}(c) \int_0^\infty \bar{L}_G^0(c, c_1) \exp(-c_1^2) c_1^2 \bar{f}(c_1) dc_1 \quad (7.117)$$

В случае псевдомаксвелловских молекул, как показано в параграфе 6.2 (см.(6.65), (6.66)), ядро $\bar{L}_G^0(c, c_1)$ равно 4π , и

$$I^-(c) = 4\pi \bar{f}(c) \int_0^\infty f(c_1) c_1^2 dc_1 = \bar{f}(c) \quad (7.118)$$

Последнее равенство имеет место в силу того, что ФР нормирована на единицу. Для случая твердых шаров, согласно (6.63), имеем

$$\bar{L}_G^0(c, c_1) = \begin{cases} 4\pi \left(c + \frac{c_1^2}{3c} \right), & c_1 < c \\ 4\pi \left(c_1 + \frac{c^2}{3c_1} \right), & c < c_1 \end{cases} \quad (7.119)$$

Интеграл (7.117) с ядром (7.119) легко вычисляется методом Симпсона с неравномерной сеткой.

Алгоритм расчета эволюции функции распределения

В реализованной нами численной схеме расчета релаксации уравнение (7.109) решается методом Рунге-Кутты третьего порядка, при этом для вычисления правой части используется функция распределения, найденная на предыдущем шаге. Интеграл столкновений вычисляется в соответствии с описанным выше алгоритмом.

При расчете методом Рунге-Кутты значения функции распределения $\bar{f}(c_i, \tau)$ определяются в конечном числе точек c_i , $i = 1 \dots L$. Значения c_i в нашем расчете выбирались с равномерным шагом и не связаны со значениями узлов квадратурной формулы u_k^N . Значения функции распределения $\bar{f}(\sqrt{u_k^N + c_i^2} \cos \varphi, \tau)$, $\bar{f}(\sqrt{u_k^N + c_i^2} \sin \varphi, \tau)$ рассчитывались с помощью интерполяции кубическим сплайном по массиву $\bar{f}(c_i, \tau)$. Следует отметить, что аргументы функции распределения $\sqrt{u_k^N + c_i^2} \cos \varphi$, $\sqrt{u_k^N + c_i^2} \sin \varphi$ могут оказаться больше c_L (например, при $i = L$). В этих случаях необходимо экстраполировать функцию распределения. Использовались два метода экстраполяции: константой и экспонентой. В первом случае функция распределения при $c > c_{\max}$, где $c_{\max}$ – максимальное значение скорости, до которого рассчитывается функция распределения, полагалась равной значению ФР в точке $c_{\max}$: $\bar{f}(c, \tau) = \bar{f}(c_{\max}, \tau)$. Во втором случае при $c > c_{\max}$ функция распределения экстраполировалась экспонентой таким образом, чтобы значения функции распределения и ее производной в точке $c = c_{\max}$ были непрерывными, т.е.

$$\bar{f}(c) = A \exp(bc^2),$$

$$b = \frac{\bar{f}'(c_{\max})}{2c_{\max} \bar{f}(c_{\max})}, \quad A = \bar{f}(c_{\max}) \exp(bc_{\max}^2). \quad (7.120)$$

Выбор метода экстраполяции оказался существенным только в случае экспоненциально растущего начального условия. В этой ситуации экспоненциальная экстраполяция позволяет существенно уменьшить ошибку определения ФР в окрестности $c_{\max}$.

Тестовые расчеты по изложенному алгоритму показали, что разработанный метод не обладает устойчивостью, то есть изначально малые (порядка 10^{-5}) относительные ошибки в расчете интеграла столкновений, накапливаясь на каждом временном шаге в функции распределения, увеличиваются со временем, и функция распределения не сходится к известному решению. Тогда схема была дополнена явным учетом закона сохранения числа

частиц. На каждом шаге по времени функция распределения нормировалась таким образом, чтобы выполнялось условие:

$$4\pi \int_0^{\infty} \bar{f}(c) \frac{\exp(-c^2)}{\pi^{3/2}} c^2 dc = 1. \quad (7.121)$$

Введения такой перенормировки оказалось достаточно для того, чтобы накопление ошибки в функции распределения прекратилось, и расчет эволюции ФР выполнялся корректно.

Примеры расчета процесса релаксации

Разработанный алгоритм позволяет с высокой точностью описывать релаксацию ФР вплоть до 10 тепловых скоростей. Мы продемонстрируем это на примерах расчета эволюции ФР при двух разных моделях взаимодействия.

В качестве первого примера рассмотрим процесс релаксации для максвелловских молекул. Начальное условие представляет собой ВКВ-моду, т.е. ФР в начальный момент времени является линейной комбинацией нулевого и первого полиномов Сонина, поэтому

$$\bar{f}(c,0) = (1 - D_0)^{3/2} \left(1 - D_0 \left(c^2(1 - D_0) - \frac{3}{2} \right) \right) \exp(D_0 c^2). \quad (7.122)$$

Как известно [

128], задача (7.109), (7.122) имеет аналитическое решение. Это решение может быть получено из (7.122) заменой константы D_0 на зависящий от времени коэффициент D вида

$$D(t) = \frac{D_0 \exp(-t/6)}{1 - D_0(1 - \exp(-t/6))} \quad (7.123)$$

Нами численно решалась задача с $D_0 = -2/3$. Такой выбор определялся тем соображением, что при $D_0 < -2/3$ в начальном условии появляются отрицательные значения, что лишено физического смысла, поэтому $D_0 = -2/3$ соответствует наиболее далекому от состояния равновесия начальному распределению из всех возможных в этом случае.

Расчет производился для $c = 0.1, 0.2, \dots, 12$ с шагом по времени $\Delta t = 0.2$ до $t = 80$ (такой выбор верхнего временного предела оказался избыточным, так как в рассматриваемом интервале скоростей функция распределения полностью выходит на равновесное значение к моменту $t \approx 40 \div 50$). Относительная ошибка в функции распределения по сравнению с аналитическим решением не превышает 0.0015. Результаты расчета процесса релаксации приведены на рисунке 7.11. Расчетные значения полностью совпадают с аналитическим решением во всем интервале от нуля до 10 тепловых скоростей.

Задача (7.109), (7.122) была решена также для модели твердых шаров. Релаксационный процесс представлен на рисунке 7.12. В качестве начального условия для

ФР была использована та же ВКВ-мода, что и для псевдомаксвелловских молекул. Поскольку аналитическое решение задачи в этом случае отсутствует, то рассчитанные зависимости ФР сравнивались с результатами, полученными моментным методом в [49].

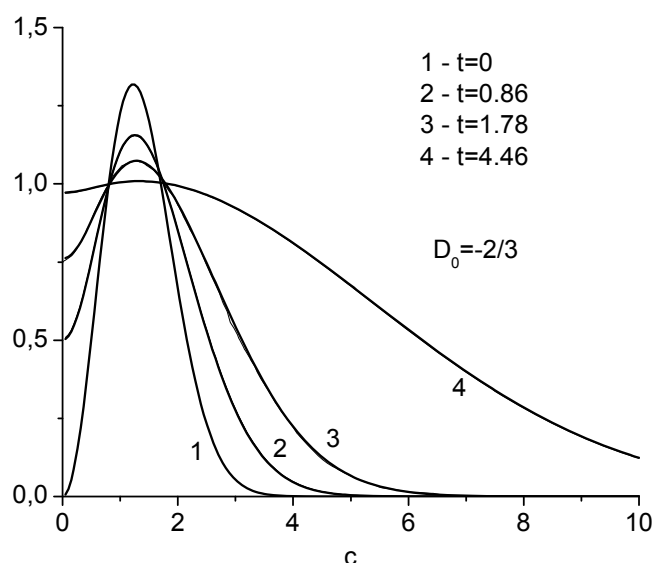


Рисунок 7.11 Решение нелинейного уравнения Больцмана с начальной ВКВ-модой для псевдомаксвелловских молекул.

Это сравнение продемонстрировало полное совпадение зависимостей ФР от скорости во всем рассматриваемом диапазоне (до 14 тепловых скоростей) во все моменты времени. Таким образом, рассмотренные примеры расчета процесса релаксации показали, что разработанный алгоритм решения нелинейного уравнения Больцмана с использованием ядер для вычисления интеграла столкновений позволяет с высокой точностью описывать эволюцию ФР вплоть до 10 тепловых скоростей.

Наконец, нами был проведен расчет релаксации для псевдомаксвелловских молекул в случае, когда начальная ФР представляет собой линейную комбинацию двух максвеллианов с разными температурами T_1 и T_2 . Были рассмотрены следующие начальные условия:

I) $T_1/T = 1/3$, $T_2/T = 5/3$ и коэффициенты в линейной комбинации одинаковы, т.е. ФР имеет вид

$$f(c, 0) = 0.5 \cdot \left[\left(\frac{3}{\pi} \right)^{3/2} \exp(-3c^2) + \left(\frac{3}{5\pi} \right)^{3/2} \exp\left(-\frac{3c^2}{5}\right) \right] \quad (7.124)$$

II) $T_1/T = 1/4$, $T_2/T = 5/2$, коэффициенты в линейной комбинации равны $2/3$ и $1/3$, т.е. ФР имеет вид

$$f(c,0) = \frac{2}{3} \left(\frac{4}{\pi} \right)^{3/2} \exp(-4c^2) + \frac{1}{3} \left(\frac{4}{10\pi} \right)^{3/2} \exp\left(-\frac{4c^2}{10}\right) \quad (7.125)$$

Заметим, что начальные ФР (7.124), (7.125) нормированы, а равновесная температура, представляющая собой сумму температур T_1 , T_2 с теми же коэффициентами, что и в линейных комбинациях (7.124), (7.125), действительно равна T в обоих случаях.

Расчет процесса релаксации проводился по изложенному выше алгоритму для значений $c = 0.1, 0.2, \dots, 12$ с шагом по времени $\Delta t = 0.2$. Для оценки внутренней сходимости метода был выполнен также расчет для значений $c = 0.05, 0.1, \dots, 7$ и $\Delta t = 0.1$. Значения ФР при совпадающих значениях c и t для этих двух расчетов различаются в пятой значащей цифре.

Полученные результаты можно сравнить с результатами расчетов процесса релаксации с аналогичными начальными условиями, проведенными в статье [129]. Для расчета эволюции ФР в случае I в этой статье использовался моментный метод и метод разложения по максвеллианам. Значения ФР для скоростей $c = 0$, $c = 2$, $c = 5$ и момента времени $t = 3$ приведены в таблице 7.8. Из таблицы видно, что результаты нашего расчета с хорошей точностью совпадают с результатами, полученными в статье [129], особенно если учесть, что равновесная температура в рассмотренном нами случае I отличалась от равновесной температуры в [129], и для сопоставления ФР необходимо было проводить интерполяцию для вычисления значения $\bar{f}(c,t)$.

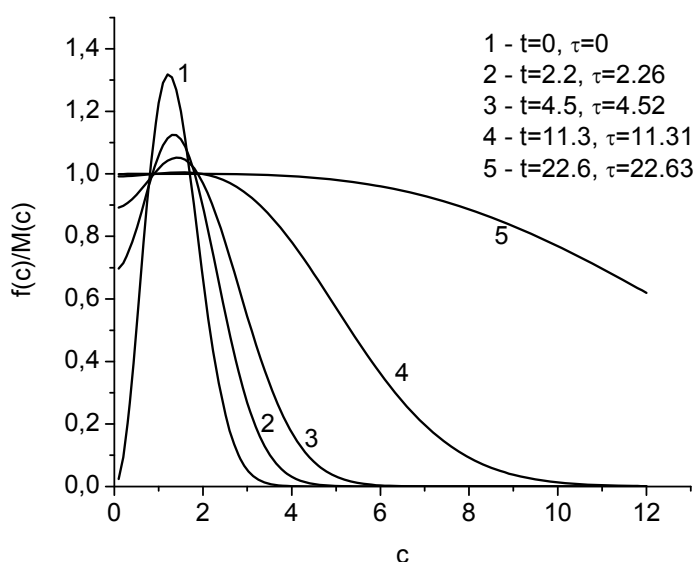


Рисунок 7.12 Решение нелинейного уравнения Больцмана с начальной ВКВ-модой для модели твердых шаров.

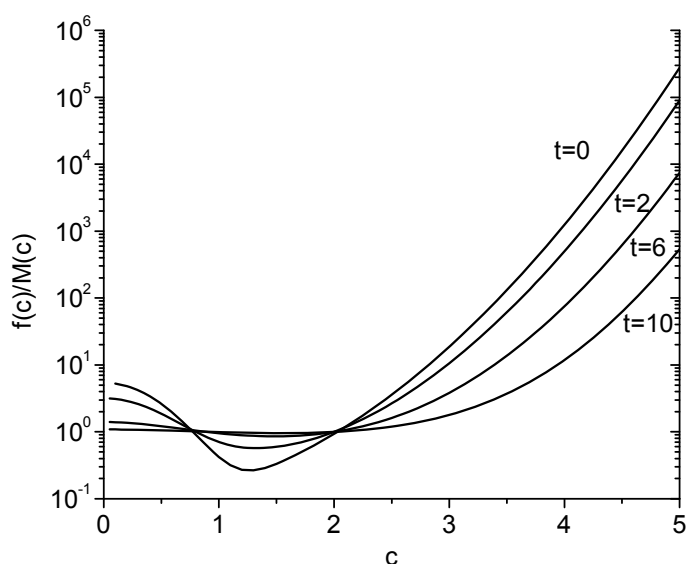


Рисунок 7.13 Решение нелинейного уравнения Больцмана с начальным условием в виде линейной комбинации двух максвеллианов (7.124) для псевдомаксвелловских молекул.

	$c = 0$	$c = 2$	$c = 5$
Моментный метод	0.5903	$9.625 \cdot 10^{-4}$	$2.186 \cdot 10^{-13}$
Разложение по максвеллианам	0.5903	$9.621 \cdot 10^{-4}$	$2.172 \cdot 10^{-13}$
Расчет с использованием ядер	0.5914	$9.626 \cdot 10^{-4}$	$2.181 \cdot 10^{-13}$

Таблица 7.8 Значения ФР для скоростей $c = 0$, $c = 2$, $c = 5$ в момент времени $t = 3$, найденные моментным методом, методом разложения по максвеллианам (статья [129]) и полученные с помощью использования ядер нелинейного интеграла столкновений.

В случае II условие Грэда (4.12) не выполняется, и моментный метод неприменим. Поэтому особенно интересно сравнить результаты расчетов процесса релаксации с использованием ядер нелинейного интеграла столкновений и с помощью метода разложения по максвеллианам. Сопоставление значений ФР для скоростей $c = 0$, $c = 2$, $c = 5$ и момента времени $t = 3$. для этого случая проведено в таблице 7.9. Как видно из таблицы, и в этом случае значения ФР, найденные разными методами совпадают с высокой точностью.

Зависимости ФР от скорости в моменты времени $t = 0$, 2, 6, 10 для случая II приведены на рисунке 7.13. Отметим, что при малых скоростях ФР релаксирует достаточно

быстро, уже при $t = 6$ в области $c \leq 2$ устанавливается равновесие. В то же время релаксация хвоста функции распределения происходит значительно медленнее. Даже при $t = 10$ ФР в области $c \approx 5$ еще весьма далека от равновесия. Сопоставление рисунка 7.13 с рисунком 7.11 показывает, что хвост ФР в случае начального условия в виде ВКВ-моды релаксирует значительно быстрее.

	$c = 0$	$c = 2$	$c = 5$
Разложение по максвеллианам	0.4362	$3.296 \cdot 10^{-3}$	$1.232 \cdot 10^{-7}$
Расчет с использованием ядер	0.4371	$3.296 \cdot 10^{-3}$	$1.233 \cdot 10^{-7}$

Таблица 7.9 Значения ФР для скоростей $c = 0$, $c = 2$, $c = 5$ в момент времени $t = 3$., найденные методом разложения по максвеллианам (статья [129]) и полученные с помощью использования ядер нелинейного интеграла столкновений.

Таким образом, использование ядер нелинейного интеграла столкновений позволяет успешно описывать процесс релаксации на основе решения нелинейного уравнения Больцмана даже в случае нарушения условия сходимости разложения ФР в стандартном моментном методе. Результаты расчета ФР по предложенному методу находятся в полном согласии с результатами моментного метода в области его применимости. Вычисление интеграла столкновений с помощью ядер дает возможность с высокой точностью строить ФР в области больших скоростей.

7.5 Расчет ядер интеграла столкновений для электронов средних энергий и решение задачи угловой релаксации в пограничном слое эффективной изотропизации

Рассмотрим теперь метод разложения по сферическим гармоникам применительно к решению линейного кинетического уравнения для электронов. Как и в нелинейном случае, интеграл столкновений, стоящий в правой части (1.3), может быть представлен через ядро в виде

$$\hat{I}(\Phi) = \int_0^\infty \int_{4\pi} G(E, \vec{\Omega}, E', \vec{\Omega}') \Phi(\vec{r}, \vec{\Omega}', E') d\vec{\Omega}' dE', \quad (7.126)$$

где

$$G(E, \vec{\Omega}, E', \vec{\Omega}') = N \frac{d^2 \sigma(E', \vec{\Omega}', E, \vec{\Omega})}{d\Omega dE} - N \Sigma(E, \vec{\Omega}) \delta(\vec{\Omega}' - \vec{\Omega}) \delta(E' - E). \quad (7.127)$$

Через $\Sigma(E, \vec{\Omega})$ в (7.127) обозначено полное сечение рассеяния

$$\Sigma(E, \vec{\Omega}) = \int \int_{4\pi} \frac{d^2 \sigma(E, \vec{\Omega}, E', \vec{\Omega}')}{d\Omega dE} dE' d\vec{\Omega}' \quad (7.128)$$

По аналогии с нелинейным случаем интеграл столкновений (1.4) можно записать через набор интегральных операторов, ядра которых зависят только от E, E' . Для этого представим дифференциальную плотность потока в виде

$$\Phi(\vec{\Omega}, E) = \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=0}^l \sum_{i=0}^1 \Phi_{l,m}^i(E) Y_{l,m}^i(\theta, \varphi), \quad (7.129)$$

подставим ее в (7.126) и разложим интеграл столкновений по сферическим гармоникам. Это дает

$$G(E, \vec{\Omega}, E', \vec{\Omega}') = \sum_{l,m} \sum_{i,l_1,m_1,i_1} Y_{l,m}^i(\theta, \varphi) G_{l_1 m_1 i_1}^{lmi}(E, E') \frac{Y_{l_1 m_1}^{i_1}(\theta', \varphi')}{y_{l_1 m_1}^{i_1}}, \quad (7.130)$$

$$G_{l_1 m_1 i_1}^{lmi}(E, E') = \int \int_{4\pi} \frac{Y_{l,m}^i(\theta, \varphi)}{y_{l,m}^i} G(E, \vec{\Omega}, E', \vec{\Omega}') Y_{l_1 m_1}^{i_1}(\theta', \varphi') d\vec{\Omega} d\vec{\Omega}'. \quad (7.131)$$

Как уже отмечалось в параграфе 1.2, если дифференциальное сечение рассеяния зависит от угла рассеяния, т.е. от скалярного произведения $(\vec{\Omega}, \vec{\Omega}')$, а не от векторов $\vec{\Omega}, \vec{\Omega}'$ по отдельности, то собственными функциями интеграла столкновений являются сферические гармоники $Y_{l,m}^i(\theta, \varphi)$, а собственные числа при этом зависят только от индекса l . Их легко найти, раскладывая зависимость $\frac{d^2 \sigma(E', \vec{\Omega}', E, \vec{\Omega})}{d\Omega dE}$ от $\cos \vartheta = (\vec{\Omega}, \vec{\Omega}')$ в ряд по полиномам

Лежандра. Действительно, пусть

$$g(E, E', \cos \vartheta) = \frac{d^2 \sigma(E', \vec{\Omega}', E, \vec{\Omega})}{d\Omega dE} (\Sigma(E))^{-1} = \sum_{l=0}^{\infty} \frac{2l+1}{4\pi} a_l(E, E') P_l(\cos \vartheta) \quad (7.132)$$

Отметим, что полное сечение $\Sigma(E, \vec{\Omega})$ в рассматриваемом случае не зависит от $\vec{\Omega}$. Учитывая теорему сложения (6.44), найдем

$$G(E, \vec{\Omega}, E', \vec{\Omega}') = N \Sigma(E) \left(\sum_{l,m,i} Y_{l,m}^i(\theta, \varphi) a_l(E, E') \frac{Y_{l,m}^i(\theta', \varphi')}{y_{l,m}^i} - \delta(\vec{\Omega}' - \vec{\Omega}) \delta(E' - E) \right). \quad (7.133)$$

Для ядра $G_{l_1 m_1 i_1}^{lmi}(E, E')$ тогда имеем

$$G_{l_1 m_1 i_1}^{lmi}(E, E') = N \Sigma(E) (a_l(E, E') - \delta(E' - E)) \delta_{l,l_1} \delta_{m,m_1} \delta_{i,i_1} \quad (7.134)$$

Используя (7.126), (7.133) легко найти, что $Y_{l,m}^i(\theta, \varphi)$ являются собственными функциями интеграла столкновений, а соответствующие им собственные числа задаются формулой

$$\chi_l = N\Sigma(E) \left(\int_0^\infty a_l(E, E') dE' - 1 \right). \quad (7.135)$$

Как было показано в главе 1, для электронов средних энергий интеграл столкновений может быть представлен в виде суммы упругой и неупругой частей (см. (1.42)). Кроме того, поскольку $l_{el}/l_{in} \propto Z^{-4/3}$, то для веществ с большими атомными номерами $\Sigma_{el}(E) \gg \Sigma_{in}(E)$. Поэтому нормированное дифференциальное сечение можно записать в виде

$$g(E, E', \cos \vartheta) = \frac{d^2 \sigma(E', \vec{\Omega}', E, \vec{\Omega})}{d\Omega dE} (\Sigma(E))^{-1} = \\ = \frac{\Sigma_{el}(E)}{\Sigma(E)} \left(g_{el}(E, \cos \vartheta) \delta(E' - E) + \frac{\Sigma_{in}(E)}{\Sigma_{el}(E)} g_{in}(E', E' - E) \frac{1}{2\pi} \delta(\cos \vartheta - 1) \right). \quad (7.136)$$

Здесь

$$g_{el}(E, \cos \vartheta) = \frac{1}{\Sigma_{el}(E)} \frac{d\sigma_{el}(E, \vec{\Omega}, \vec{\Omega}')}{d\Omega}, \quad (7.137)$$

$$g_{in}(E', E' - E) = \frac{1}{\Sigma_{in}(E)} \frac{d\sigma_{in}(E', E' - E)}{dQ} \theta(E' - E) \quad (7.138)$$

Появление $\theta(E' - E)$ в выражении для неупругого дифференциального сечения связано с тем фактом, что электрон в процессе взаимодействия с веществом может только терять энергию. В силу малости отношения $\frac{\Sigma_{in}(E)}{\Sigma_{el}(E)}$ процесс рассеяния оказывается почти упругим. Для

$a_l(E, E')$ имеем

$$a_l(E, E') = \int_0^{2\pi} \int_{-1}^1 g(E, E', \cos \vartheta) P_l(\cos \vartheta) d \cos \vartheta d\varphi = \\ = \frac{\Sigma_{el}(E)}{\Sigma(E)} \left(a_l^{el}(E) \delta(E' - E) + \frac{\Sigma_{in}(E)}{\Sigma_{el}(E)} g_{in}(E', E' - E) \right), \quad (7.139)$$

где $a_l^{el}(E)$ являются коэффициентами разложения нормированного дифференциального сечения упругого рассеяния по полиномам Лежандра:

$$g_{el}(E, \cos \vartheta) = \sum_{l=0}^{\infty} \frac{2l+1}{4\pi} a_l^{el}(E) P_l(\cos \vartheta). \quad (7.140)$$

Из (7.134), (7.139) тогда следует

$$G_{l, m_{i_1}}^{lmi}(E, E') = \left(N\Sigma_{el}(E) (a_l^{el}(E) - 1) \delta(E' - E) + \right. \\ \left. + N\Sigma_{in}(E) (g_{in}(E', E' - E) - \delta(E' - E)) \right) \delta_{l, l_1} \delta_{m, m_1} \delta_{l, i_1} \quad (7.141)$$

Здесь первый член соответствует упругой, а второй – неупругой части интеграла столкновений.

Таким образом, как уже отмечалось, интеграл столкновений для электронов средних энергий в главном приближении соответствует рассеянию без изменения скорости. Очевидно, что при рассмотрении односкоростного кинетического уравнения, когда перераспределения по энергиям не происходит, метод разложения по сферическим гармоникам в осесимметричном случае сводится к P_N -приближению. Это приближение широко используется в теории переноса нейтронов, электронов, γ -квантов (см. [130 - 134]).

Примером применения разложения по полиномам Лежандра для решения линейных кинетических задач в случае, когда в ядре учитывается перераспределение по энергии, служит работа [52].

Использование ядер для решения задач кинетики электронов средних энергий имеет некоторые особенности. Вследствие пикообразности дифференциального сечения упругого рассеяния в разложении (7.140) приходится удерживать большое число членов. Поэтому при рассмотрении взаимодействия узких электронных пучков с веществом необходимо учитывать большое число членов и в разложении функции распределения по полиномам Лежандра. Кроме того, для решения граничных задач оказывается удобным решать непосредственно кинетическое уравнение, рассчитывая интеграл столкновений с помощью ядер, а не переходить от кинетического уравнения к системе уравнений для коэффициентов разложения по сферическим гармоникам.

В этом параграфе мы рассмотрим решение задач угловой релаксации для погранслойных функций v_0, v_1 в пограничном слое эффективной изотропизации. Эти функции удовлетворяют однородному уравнению (1.103) и граничным условиям (1.105). Будем считать, что широкий моноэнергетический электронный пучок падает на полубесконечную область по нормали к поверхности. Задача в этом случае является осесимметричной, а граничное условие (1.105) записывается в виде

$$v_k(\xi, \mu, E) \Big|_{\xi=0}^{\mu>0} = \delta_{k,0} \frac{1}{2\pi} \delta(\mu-1) \delta(E-1), \quad k=0,1 \quad (7.142)$$

Легко заметить, что функции v_0, v_1 могут быть выражены через решение $V(\xi, \mu; E)$ уравнения (1.103) с асимптотическим поведением на бесконечности

$$V(\xi, \mu; E) \Big|_{\xi \rightarrow \infty} \rightarrow C(E) \quad (7.143)$$

и граничным условием

$$V(\xi, \mu; E) \Big|_{\xi=0}^{\mu>0} = f(\mu), \quad (7.144)$$

где $f(\mu) = \frac{1}{2\pi} \delta(\mu - 1)$ или $f(\mu) = \mu$ для нулевого или первого приближения соответственно.

При этом v_0, v_1 записываются в виде

$$v_0 = V\delta(E - 1) \quad (7.145)$$

$$v_1 = B_1(E)\xi + \frac{B_1(E)}{v_1(E)}(\mu - V) \quad (7.146)$$

Введем новую безразмерную глубину, измеряемую в единицах свободного пробега

$$\varsigma = \xi \cdot \lambda(E) \cdot N\Sigma_{el}(E) = \xi \cdot \lambda(E) / l_{el}(E). \quad (7.147)$$

Тогда уравнение (1.103) для $V(\xi, \mu; E)$ можно переписать в виде

$$\mu \frac{\partial V}{\partial \varsigma} + V = \int_{4\pi} g_{el}(E, \cos \vartheta) V(\varsigma, \vec{\Omega}') d\vec{\Omega}', \quad (7.148)$$

В задаче для нулевого приближения выделим в решении нерассеянную часть

$\frac{1}{2\pi} \delta(\mu - 1) \exp(-\varsigma)$. Рассеянная часть при этом удовлетворяет уравнению

$$\mu \frac{\partial V}{\partial \varsigma} + V = \int_{4\pi} g_{el}(E, \cos \vartheta) V(\varsigma, \vec{\Omega}') d\vec{\Omega}' + Q(\varsigma, \mu; E) \quad (7.149)$$

с источником $Q(\varsigma, \mu; E) = g_{el}(E, \mu) \exp(-\varsigma)$ и граничному условию

$$V(\varsigma, \mu; E) \Big|_{\varsigma=0}^{\mu>0} = 0, \quad (7.150)$$

Таким образом, задачи для $v_k, k=0,1$ сводятся к отысканию решения уравнения (7.149) с источником

$$Q(\varsigma, \mu; E) = \begin{cases} g_{el}(E, \mu) \exp(-\varsigma) & k=0 \\ 0 & k=1 \end{cases}, \quad (7.151)$$

граничным условием

$$V(\varsigma, \mu; E) \Big|_{\varsigma=0}^{\mu>0} = h(\mu), \quad h(\mu) = \begin{cases} 0 & k=0 \\ \mu & k=1 \end{cases} \quad (7.152)$$

и асимптотическим поведением на бесконечности

$$V(\xi, \mu; E) \Big|_{\xi \rightarrow \infty} \rightarrow C(E) \quad (7.153)$$

Условие (7.153) означает, что поток равен нулю при всех значениях $\varsigma > 0$.

Для расчета правой части уравнения (7.149) мы используем ядра линейного интеграла столкновений по аналогии с работой Лойялки [52]. В осесимметричном односкоростном случае, в соответствии с (7.141), безразмерные ядра определяются коэффициентами разложения дифференциального сечения упругого рассеяния по полиномам Лежандра

$$\overline{G}_{l_1}^{+l}(E, E') = a_l^{el}(E) \delta_{l_1}^l. \quad (7.154)$$

Интеграл в правой части (7.149) при этом приобретает вид

$$\int_{4\pi} g_{el}(E, \cos \vartheta) V(\zeta, \bar{\Omega}') d\bar{\Omega}' = \sum_{l=0}^{\infty} \frac{2l+1}{2} a_l^{el}(E) P_l(\mu) \int_{-1}^1 V(\zeta, \mu') P_l(\mu') d\mu' \quad (7.155)$$

Для выполнения интегрирования используется квадратурная формула Гаусса

$$\int_{-1}^1 h(\mu) d\mu = \sum_k A_k h(\mu_k), \quad (7.156)$$

где μ_k , $k=1, \dots, n$ - корни полинома Лежандра $P_n(\mu)$, а A_k - веса, определяемые формулой

$$A_k = \frac{2}{(1 - (x_k)^2) (P'_n(x_k))^2}. \quad (7.157)$$

Уравнение (7.149) будем решать S_N методом. Выбирая сетку по ζ ($\zeta_{i-1/2}$, $i=1, \dots, I+1$; ζ_i , $i=1, \dots, I$) и используя в качестве сетки по μ узлы квадратурной формулы μ_k , $k=1, \dots, n$, запишем итерационные формулы в виде

$$V_k^{i-1/2} = \frac{-\mu_k - \Delta\zeta_i/2}{-\mu_k + \Delta\zeta_i/2} V_k^{i+1/2} + \frac{\Delta\zeta_i}{-\mu_k + \Delta\zeta_i/2} q_k^i, \quad \mu < 0 \quad (7.158)$$

$$V_k^{i+1/2} = \frac{\mu_k - \Delta\zeta_i/2}{\mu_k + \Delta\zeta_i/2} V_k^{i-1/2} + \frac{\Delta\zeta_i}{\mu_k + \Delta\zeta_i/2} q_k^i, \quad \mu \geq 0$$

Здесь q_k^i - значение правой части (7.149) при $\zeta = \zeta_i$, $\mu = \mu_k$. Отметим, что дифференциальное сечение упругого рассеяния имеет резкий пик в окрестности $\mu=1$, поэтому разложение дифференциального сечения упругого рассеяния по полиномам Лежандра содержит достаточно большое количество членов. При больших значениях l подынтегральная функция в (7.155) сильно осциллирует, и корректный расчет интегралов требует, чтобы расстояние между узлами квадратурной формулы было мало. Таким образом, число узлов n должно быть велико. Такое же требование оказывается необходимым для правильного учета влияния источника члена в задаче для v_0 . Как видно из (7.158), шаг по ζ , $\Delta\zeta_i$, не может быть больше $2 \cdot \min|\mu_k|$. При большом числе узлов величина минимального корня полинома Лежандра достаточно мала. Так например при $n=100$ минимальный корень равен 0.0156, и, следовательно, шаг по глубине не может быть больше 0.031. Если учесть, что расчет нужно проводить до глубин порядка нескольких десятков длин свободного пробега, то оказывается необходимым сделать порядка тысячи шагов.

Шаг интегрирования можно увеличить, если записать уравнение (7.149) в интегральной форме. Для этого проинтегрируем (7.149) в окрестности ζ_0 , считая правую часть известной. Тогда имеем

$$V(\varsigma_1) = V(\varsigma_0) \exp(-(\varsigma_1 - \varsigma_0)/\mu) + \exp(-\varsigma_1/\mu) \int_{\varsigma_0}^{\varsigma_1} q(\varsigma', \mu) \exp(\varsigma'/\mu) d(\varsigma'/\mu) \quad (7.159)$$

Для вычисления интеграла в (7.159) используем линейную интерполяцию

$$q(\varsigma', \mu) \approx ((\varsigma - \varsigma_0)q_1 + (\varsigma_1 - \varsigma)q_0)h^{-1} \quad (7.160)$$

Здесь $h = \varsigma_1 - \varsigma_0$, $q_0 = q(\varsigma_0, \mu)$, $q_1 = q(\varsigma_1, \mu)$. Подстановка (7.160) в (7.159) дает

$$V(\varsigma_1) = V(\varsigma_0) \exp(-h/\mu) + q_0 \left(\frac{1 - \exp(-h/\mu)}{h/\mu} - \exp(-h/\mu) \right) + q_1 \left(1 - \frac{1 - \exp(-h/\mu)}{h/\mu} \right) \quad (7.161)$$

Итерационные формулы приобретают вид

$$V_k^{i+1} = \exp\left(\frac{\Delta\varsigma}{\mu_k}\right) V_k^i + q_k^i \left(\frac{1 - \exp(\Delta\varsigma/\mu_k)}{\Delta\varsigma/|\mu_k|} - \exp(\Delta\varsigma/\mu_k) \right) + \\ + q_k^{i+1} \left(1 - \frac{1 - \exp(\Delta\varsigma/\mu_k)}{\Delta\varsigma/|\mu_k|} \right), \quad \mu < 0 \quad (7.162)$$

$$V_k^{i+1} = \exp\left(-\frac{\Delta\varsigma}{\mu_k}\right) V_k^i + q_k^i \left(\frac{1 - \exp(-\Delta\varsigma/\mu_k)}{\Delta\varsigma/\mu_k} - \exp(-\Delta\varsigma/\mu_k) \right) + \\ + q_k^{i+1} \left(1 - \frac{1 - \exp(-\Delta\varsigma/\mu_k)}{\Delta\varsigma/\mu_k} \right), \quad \mu \geq 0 \quad (7.163)$$

Правая часть уравнения (7.149) с учетом (7.155) выражается через $V_j^i = V(\varsigma_i, \mu_j)$ следующим образом

$$q_k^i \approx \sum_{l=0}^{\infty} \frac{2l+1}{2} a_l^{el}(E) P_l(\mu_k) \sum_{j=1}^n A_j P_l(\mu_j) V(\varsigma_i, \mu_j) + Q(\varsigma_i, \mu_k; E) = \sum_{j=1}^n B_k^j V_j^i + Q(\varsigma_i, \mu_k; E) \quad (7.164)$$

где матрица B_k^j есть

$$B_k^j = A_j \sum_{l=0}^{\infty} \frac{2l+1}{2} a_l^{el}(E) P_l(\mu_k) P_l(\mu_j) \quad (7.165)$$

Уравнения (7.162) – (7.165) полностью определяют итерационный процесс, причем величина шага по ς в нем не ограничена сверху (естественные ограничения накладываются точностью решения). При решении задачи производится расчет источникового члена с помощью текущей итерации. Новая итерация находится при проходе по лучам $\mu_k > 0$ в положительном направлении (формула (7.163)), а затем по лучам $\mu_k < 0$ в отрицательном направлении (формула (7.162)). На первом шаге при этом используется граничное условие. При достижении правого края сетки по глубине значения ФР для отрицательных μ_k определяются из условия отражения, т.е. $V_k^M = V_{n-k+1}^M$, $k = 1, \dots, n/2$. Это условие обеспечивает обращение потока в ноль.

Описанный метод был использован для решения уравнения (7.149) с граничными условиями (7.152). В качестве дифференциального сечения упругого рассеяния было взято сечение Мотта для Cu при $E = 10 \text{ кэВ}$ (о его расчете см. параграф 8.1), в разложении по полиномам Лежандра учитывалось 200 членов, шаг по глубине $\Delta\zeta$ был выбран равным 0.1, число шагов по глубине $M = 800$, число узлов в квадратурной формуле $n = 200$. Стартовой ФР для начала итераций было выбрано $V_k^i = 0$, $k = 1, \dots, n$, $i = 0, \dots, M$. При этом оказалось, что для сходимости решения требуется много итераций. Причина этого достаточно ясна. Каждая итерация соответствует изменению ФР в результате одного столкновения, а поскольку в одном столкновении средний угол рассеяния мал, то для формирования изотропного распределения в глубине требуется большое количество столкновений. Большое количество итераций требуется и для проникновения частиц на глубины порядка нескольких десятков свободных пробегов. В случае расчета функции V для определения v_0 можно частично исправить ситуацию учитывая уширение распространяющегося в мишени пучка с помощью малоуглового приближения. Для этого заменим в левой части уравнения (7.148) множитель μ на единицу и рассмотрим уравнение

$$\frac{\partial V^0}{\partial \zeta} + V^0 = \int_{4\pi} g_{el}(E, \cos \vartheta) \mathcal{V}^0(\zeta, \vec{\Omega}') d\vec{\Omega}' \quad (7.166)$$

с граничным условием

$$V^0(\xi, \mu; E) \Big|_{\substack{\mu > 0 \\ \zeta = 0}} = \frac{1}{2\pi} \delta(\mu - 1) \quad (7.167)$$

Его решение легко записывается в виде ряда по полиномам Лежандра

$$V^0(\xi, \mu; E) = \frac{1}{2\pi} \sum_{l=0}^{\infty} \frac{2l+1}{2} \exp(-\zeta(1 - a_l^{el}(E))) P_l(\mu) \quad (7.168)$$

Пусть

$$V(\zeta, \mu; E) = v_0(\zeta, \mu; E) - V^0(\zeta, \mu; E) \quad (7.169)$$

Подставляя (7.169) в (7.148), найдем

$$\begin{aligned} \mu \frac{\partial V}{\partial \zeta} + V = \int_{4\pi} g_{el}(E, \cos \vartheta) \mathcal{V}(\zeta, \vec{\Omega}') d\vec{\Omega}' + (1 - \mu) \frac{1}{2\pi} \left(\sum_{l=0}^{\infty} \frac{2l+1}{2} a_l^{el}(E) \exp(-\zeta(1 - a_l^{el}(E))) P_l(\mu) - \right. \\ \left. - \sum_{l=0}^{\infty} \frac{2l+1}{2} \exp(-\zeta(1 - a_l^{el}(E))) P_l(\mu) \right) \end{aligned} \quad (7.170)$$

Отметим, что $a_l^{el}(E)$ стремится к нулю при $l \rightarrow \infty$, поэтому коэффициенты при полиномах Лежандра в первом слагаемом в круглых скобках также стремятся к нулю. Коэффициенты при полиномах Лежандра во втором слагаемом стремятся к $\frac{2l+1}{2} \exp(-\zeta)$, поэтому ряд

сходится плохо. Для улучшения сходимости вычтем $\frac{2l+1}{2}\exp(-\varsigma)$ из коэффициентов второго слагаемого и добавим в правую часть (7.170) ряд $(1-\mu)\frac{1}{2\pi}\sum_{l=0}^{\infty}\frac{2l+1}{2}\exp(-\varsigma)P_l(\mu)$.

Замечая, что

$$(1-\mu)\frac{1}{2\pi}\sum_{l=0}^{\infty}\frac{2l+1}{2}\exp(-\varsigma)P_l(\mu)=\exp(-\varsigma)(1-\mu)\delta(\mu-1)=0, \quad (7.171)$$

найдем, что $V(\varsigma, \mu; E)$ удовлетворяет уравнению (7.149) с источником в виде

$$Q(\varsigma, \mu; E) = (1-\mu)\frac{1}{2\pi}\sum_{l=0}^{\infty}\frac{2l+1}{2} \times \\ \times (a_l^{el}(E)\exp(-\varsigma(1-a_l^{el}(E))) - \exp(-\varsigma(1-a_l^{el}(E))) + \exp(-\varsigma))P_l(\mu) \quad (7.172)$$

и нулевым граничным условием (7.150). Решение уравнения (7.149) с источником (7.172) описанным выше методом (формулы (7.162) – (7.164)) показало, что использование малоуглового приближения действительно ускоряет сходимость итераций.

С помощью изложенного алгоритма были определены погранслойные функции v_0 для мишеней из Al, Cu, Au и энергий налетающего электрона $E = 5, 10, 15, 20$ кэВ. Дифференциальные сечения упругого рассеяния рассчитывались по формуле Мотта. Поскольку при выбранных значениях энергии и атомных номеров мишени отношение транспортной длины упругого рассеяния к средней длине свободного пробега меняется в интервале $10 \leq \lambda(E)/l_{el}(E) \leq 80$, то расчет проводился до $\varsigma = 80$. Шаг по глубине был выбран равным 0.1.

В процессе расчета определялась зависимость концентрации от глубины, $n(\varsigma; E)$, и контролировалось значение потока $\psi(\varsigma; E)$. Концентрация и поток очевидным образом связаны с v_0 :

$$n(\varsigma; E) = 2\pi \int_{-1}^1 v_0(\varsigma, \mu; E) d\mu \quad (7.173)$$

$$\psi(\varsigma; E) = 2\pi \int_{-1}^1 \mu v_0(\varsigma, \mu; E) d\mu \quad (7.174)$$

Для установившегося решения значения потока во всех точках не превышали 0.001. На рисунке 7.14 приведена зависимость концентрации от глубины для мишени из Cu и энергий налетающего пучка электронов $E = 5, 10, 15, 20$ кэВ. По оси абсцисс отложена глубина в длинах среднего свободного пробега (зависящего от энергии E). Видно, что значения концентрации при различных энергиях выходят на одно и то же значение. Глубина,

на которой значение концентрации стабилизируется, соответствует транспортной длине упругого рассеяния. Зависимости концентрации от глубины для Al и Au имеют аналогичный вид.

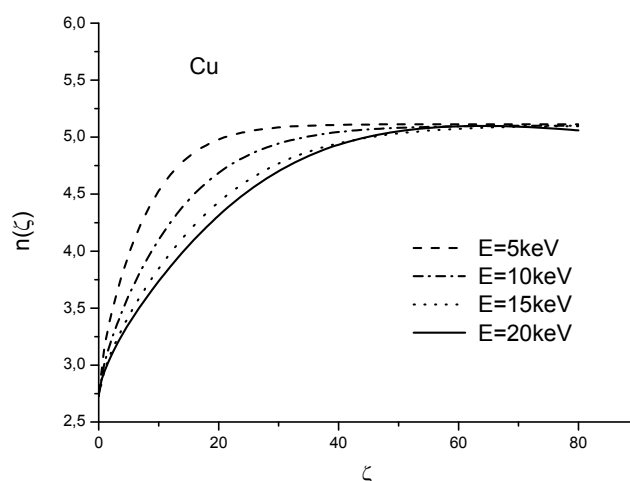


Рисунок 7.14. Зависимость концентрации электронов в пограничном слое эффективной изотропизации от глубины в нулевом приближении по малому параметру $\delta = \sqrt{\lambda(E)/s(E)}$ в мишени из Cu. Глубины измеряются в длинах свободного пробега по упругим столкновениям $l_{el}(E)$. Энергии налетающего пучка электронов $E = 5, 10, 15, 20$ кэВ.

Большой интерес представляет величина константы $C_0(E)$, на которую выходит решение при $\zeta \rightarrow \infty$. Именно эта величина используется в качестве граничного условия для области диффузии. Как показывают расчеты, эта константа в пределах погрешности расчета не зависит ни от энергии, ни от атомного номера мишени и составляет $C_0(E) = 0.405$ с точностью 0.5%.

Полученное решение позволяет построить зависимости v_0 от угла на разных глубинах. На рисунке 7.15 приведены угловые зависимости $v_0(\zeta, \mu)$ в Cu при начальной энергии пучка $E = 10$ кэВ на глубинах $\zeta = 0, 0.5, 1., 10., 20., 60$.

С помощью описанного алгоритма было решено также уравнение (7.148) с граничным условием (7.152). Решение этой задачи, $V_1(\zeta, \mu; E)$, как было показано, дает возможность определить погранслоиную функцию $v_1(\zeta, \mu; E)$. На рисунке 7.16 показаны угловые зависимости $V_1(\zeta, \mu; E)$ в Cu при начальной энергии пучка $E = 10$ кэВ на глубинах $\zeta = 0, 0.5, 1., 3., 10., 20., 60$. Предельное значение $V_1(\zeta, \mu; E)$ при $\zeta \rightarrow \infty$ в соответствии с (7.146)

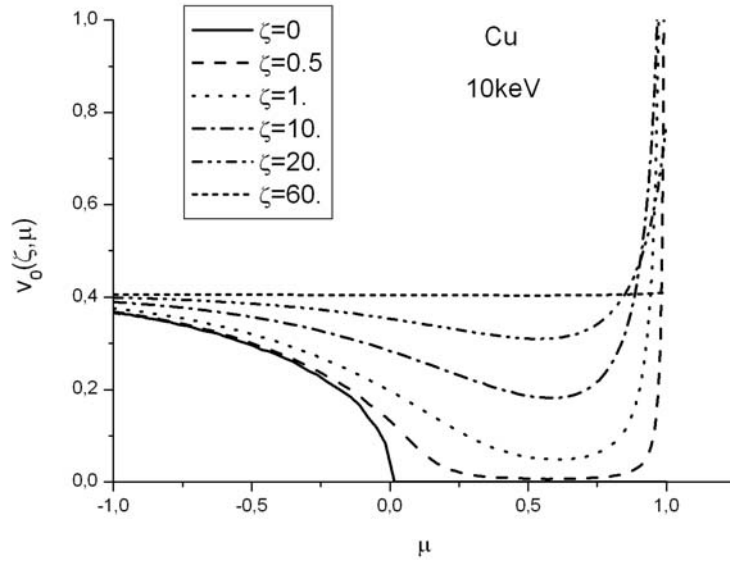


Рисунок 7.15. Угловые зависимости $v_0(\zeta, \mu)$ в Си при начальной энергии пучка $E = 10 \text{ кэВ}$ на глубинах $\zeta = 0, 0.5, 1., 10., 20., 60$. Глубины измеряются в длинах свободного пробега по упругим столкновениям $l_{el}(E)$.

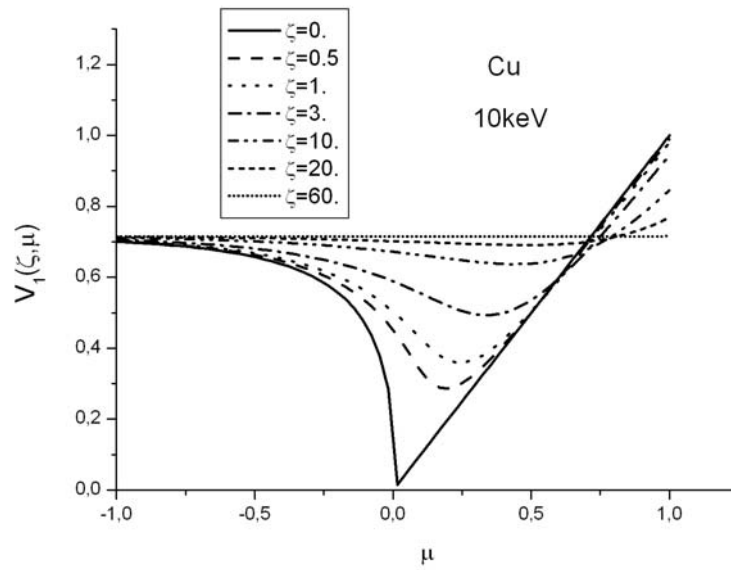


Рисунок 7.16. Угловые зависимости $V(\zeta, \mu; E)$ для $k=1$ в Си при начальной энергии пучка $E = 10 \text{ кэВ}$ на глубинах $\zeta = 0, 0.5, 1., 10., 20., 60$. Глубины измеряются в длинах свободного пробега по упругим столкновениям $l_{el}(E)$.

определяет константу $C_1(E)$, используемую в качестве граничного условия для первого приближения в области диффузии. Это предельное значение, так же как и $C_0(E)$, практически не зависит от атомного номера мишени и энергии пучка и равно 0.715.

Таким образом, в этом параграфе продемонстрирована методика использования ядер для решения задачи о взаимодействии электронного пучка с полубесконечной мишенью. При этом, как и в [52], оказывается удобным рассчитывать не коэффициенты разложения ФР по полиномам Лежандра, а непосредственно решать уравнение для ФР, вычисляя интеграл столкновений с помощью ядер.

Глава 8.

Численное моделирование транспорта электронов по методу Монте-Карло

Рассмотренный в главах 1 - 3 асимптотический подход к решению кинетического уравнения для электронов и аналитические решения, полученные на его основе, позволяют выявить характер зависимости распределения электронов от основных параметров задачи. Развитый численный метод решения дает возможность принять во внимание особенности взаимодействия электронов с веществом и получить детальную информацию о распределении электронов. Тем не менее, в ряде случаев для учета сложной геометрии мишени и различных способов регистрации сигнала оказывается удобным использовать метод прямого моделирования транспорта электронов – метод Монте-Карло. В рамках этого метода удастся особенно просто учитывать неоднородность мишени, наличие включений, тонкую структуру дифференциальных сечений рассеяния электронов и т.д. Перспективным представляется и подход, основанный на совместном использовании аналитического метода и метода Монте-Карло. При этом вид решения определяется аналитическим приближением, а значения входящих в него параметров уточняется с помощью моделирования по методу Монте-Карло.

При реализации моделирования транспорта электронов по методу Монте-Карло наибольшие трудности представляет расчет взаимодействия электронов с веществом. Как уже отмечалось в главе 1, процесс рассеяния удобно подразделить на упругое и неупругое рассеяние. Упругое рассеяние имеет место, если состояние атома после рассеяния совпадает с его начальным состоянием. Процесс упругого рассеяния обуславливается кулоновским взаимодействием электрона с ядром атома, экранированным атомными электронами. Неупругое рассеяние является результатом кулоновского взаимодействия налетающего электрона с атомными электронами.

В настоящей главе рассмотрены методы расчета дифференциальных сечений упругого и неупругого рассеяния (более точные, чем описанные в параграфе 1.1). В параграфе 8.3 описаны модели, разработанные для решения различных задач переноса электронов, и созданные на их основе программные пакеты. Качество разработанных моделей обсуждается в параграфе 8.4.

8.1 Дифференциальное сечение упругого рассеяния

Отклонение налетающего электрона при упругом рассеянии вызывается кулоновским взаимодействием с ядром атома, экранированным атомными электронами. Для упрощения

обычно полагают, что нет существенной разницы в атомном потенциале единичного атома и атома, входящего в состав твердого тела.

Дифференциальное сечение упругого рассеяния может быть рассчитано в разных аппроксимациях. В программных пакетах, реализующих расчеты кинетики электронов по методу Монте-Карло, широко используется формула Мотта [59].

$$\frac{d\sigma_{el}}{d\Omega} = |f(\theta)|^2 + |g(\theta)|^2. \quad (8.1)$$

Здесь $f(\theta)$, $g(\theta)$ - амплитуды рассеяния без изменения спина и с переворачиванием спина. Амплитуды могут быть вычислены через фазовые сдвиги сферических волн. Численный метод для определения фазовых сдвигов через решения уравнений для радиальных волновых функций был развит в работе [135].

Уравнения для радиальных волновых функций могут быть получены применением вариационного принципа к полной энергии всей системы (налетающий электрон и атом). Полный релятивистский Гамильтониан системы представляет собой сумму одноэлектронных Гамильтонианов связанных электронов и рассеивающегося электрона и потенциалов электрон-электронного взаимодействия. Использование вариационного принципа приводит к появлению так называемых обменных членов и экранированного ядерного потенциала в уравнениях для радиальных волновых функций [136, 137]. Обменные члены существенны только при низких энергиях налетающего электрона, когда он оказывается достаточно близко к рассеивающему атому и перекрытие его волновой функции с волновыми функциями атомных электронов оказывается значительным. При высоких энергиях налетающего электрона этот эффект пренебрежимо мал, что существенно упрощает уравнения для волновой функции. Экранированный ядерный потенциал связан с распределением плотности заряда в атоме. Распределение плотности зарядов может быть найдено из самосогласованного поля атома, что, вообще говоря, требует огромных вычислений. Поэтому для упрощения отыскания фазовых сдвигов используются явные аналитические выражения для потенциала.

Рассматриваемая модель упругого рассеяния включает только эффекты экранирования, обменные эффекты и поляризация атома не принимаются во внимание. В наших расчетах мы использовали аналитическую аппроксимацию атомного электростатического потенциала, даваемую моделью Томаса-Ферми-Дирака [138]. При этом использовался численный алгоритм, описанный в [135]. Для интегрирования уравнения для фазовых сдвигов был использован метод Рунге-Кутты четвертого порядка. При расчетах амплитуды рассеяния без изменения спина отбрасывались парциальные волны с фазовым сдвигом меньшим 10^{-4} . Для амплитуды с переворачиванием спина фазовые сдвиги

вычислялись до тех пор, пока разность между ними и фазовыми сдвигами для амплитуды без изменения знака не становилась менее 10^{-5} .

Рассчитанные данные не претендуют на высокую точность во всей области энергий электронов. Они находятся в хорошем согласии с некоторыми экспериментальными данными для энергий порядка 100 эВ и выше и описывают качественно поведение измеренных дифференциальных сечений при более низких энергиях (≥ 10 эВ). Данные по дифференциальным сечениям упругого рассеяния, вычисленные с использованием похожих алгоритмов, широко используются для моделирования транспорта электронов в твердых телах¹. Отметим, что основное предположение, используемое при таком моделировании, заключается в том, что твердое тело может рассматриваться как ансамбль невзаимодействующих атомов. Это предположение справедливо для электронов с энергиями порядка 10 эВ и выше. При более низких энергиях необходимо использовать другие подходы.

Нами были проведены систематические расчеты дифференциального сечения упругого рассеяния по изложенному алгоритму для атомов с атомными номерами в диапазоне $1 \leq Z \leq 103$. В 1997 году результаты расчетов были представлены в организованной нами базе данных <http://www.ioffe.ru/ES/>. Эта база дает возможность получать таблицы дифференциального сечения рассеяния для заданного элемента и заданной энергии налетающего электрона, представлять дифференциальное сечение в графическом виде, а также получать зависимость полного сечения упругого рассеяния,

$$\Sigma_{el}(E) = \int_{4\pi} \frac{d\sigma_{el}(E, \vec{\Omega})}{d\vec{\Omega}} d\vec{\Omega}, \text{ от энергии.}$$

Отметим, что указанная база пользуется достаточно

широкой популярностью, и число обращений к ней с российских и зарубежных сайтов достигает нескольких сотен в год.

На рисунке 8.1 приведены рассчитанные дифференциальные сечения упругого рассеяния для ряда элементов. Видно, что тонкая структура начинает появляться в дифференциальных сечениях для тяжелых элементов (Au) при энергии электрона порядка 4 кэВ. С уменьшением энергии структура проявляется более интенсивно. Для Al она не наблюдается даже при энергиях порядка 500 эВ. Этот факт был отмечен и в экспериментах по рассеянию, выполненных на парах различных элементов [140], и в расчетах других авторов [141].

¹ Расчет дифференциального сечения упругого рассеяния электронов с учетом обменных эффектов и поляризации реализован в разработанном недавно коде ELSEPA [139].

На рисунке 8.2 приведено сравнение дифференциального сечения Мотта с Резерфордским сечением (1.6) для Al, Cu, Au при энергиях налетающего электрона 4, 10

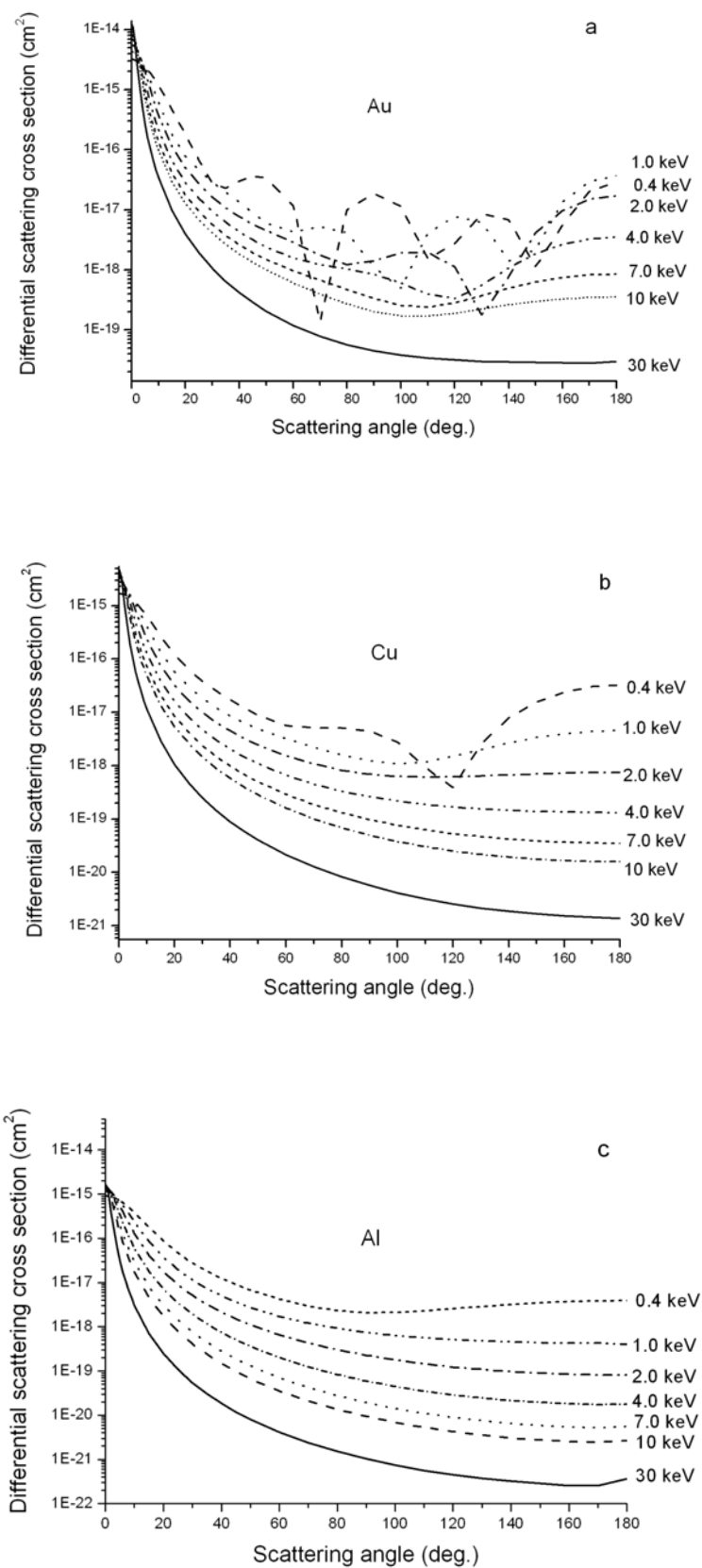


Рисунок 8.1 Зависимость дифференциального сечения упругого рассеяния от угла для Au (a), Cu (b), Al (c) при различных энергиях налетающего электрона.

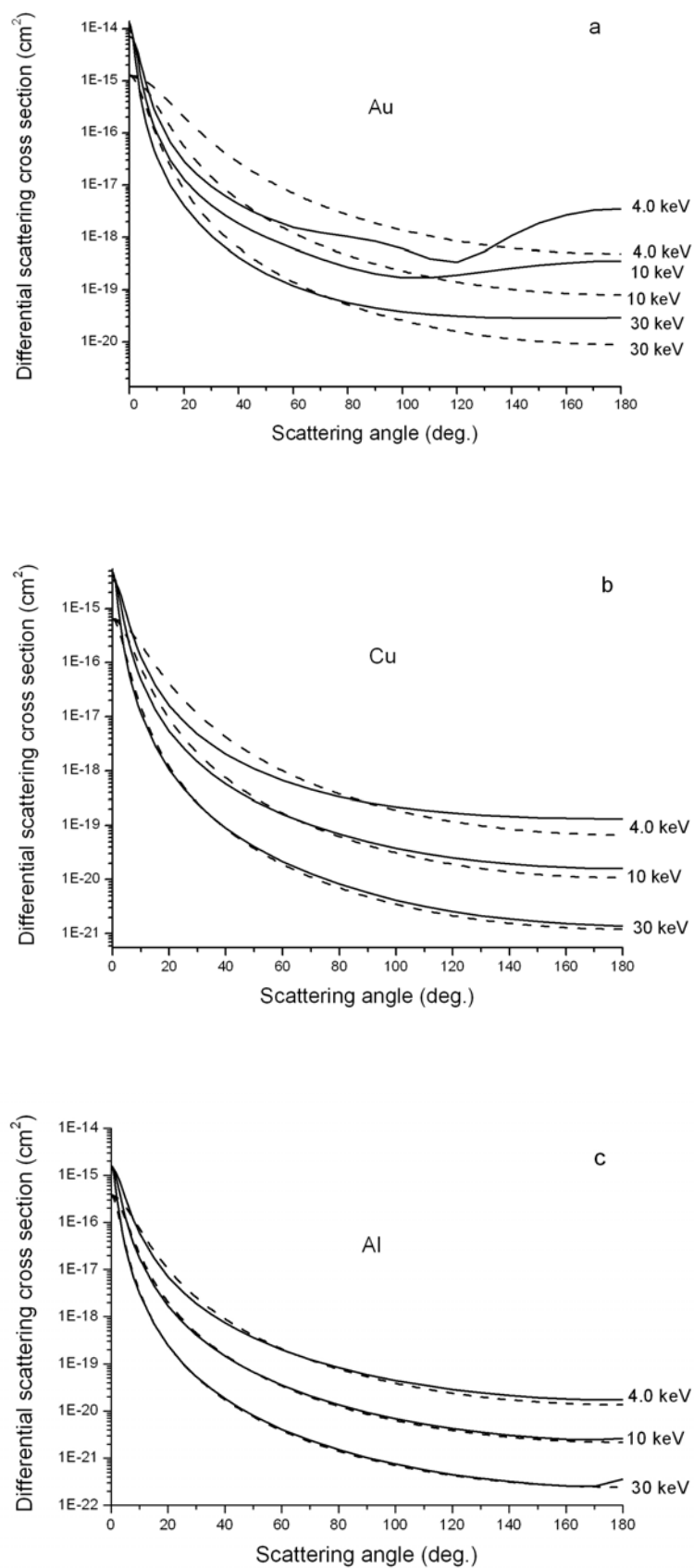


Рисунок 8.2 Сравнение дифференциальных сечений упругого рассеяния, рассчитанных по формуле Мота (сплошная кривая) и Резерфорда (пунктир) для Au (a), Cu (b), Al (c) при различных энергиях налетающего электрона.

и 30 кэВ. Сплошными кривыми обозначены сечения Мотта, пунктиром - сечения Резерфорда. Видно, что для Al имеет место хорошее совпадение сечений при всех рассмотренных энергиях, однако с ростом атомного номера рассеивателя сечение Резерфорда неплохо аппроксимирует Моттовское сечение лишь в окрестности малых углов при достаточно больших энергиях.

Полное сечение упругого рассеяния для ряда элементов приведено на рисунке 8.3. Видно, что при уменьшении атомного номера и росте энергии в области $E > 100$ эВ происходит монотонное уменьшение полного сечения.

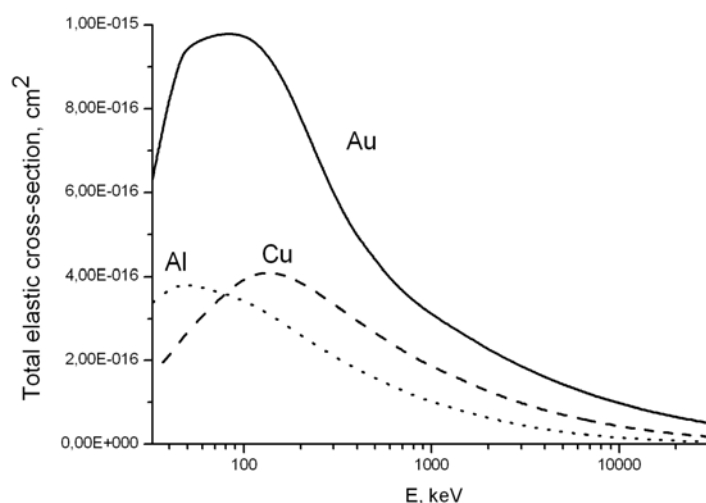


Рисунок 8.3 Зависимость полного сечения упругого рассеяния от энергии для Au, Cu, Al.

Отметим, что рассчитанные нами сечения упругого рассеяния находятся в хорошем согласии с данными недавно разработанных баз NIST [142] и ICRU-77 [143] для энергий больше 1 кэВ.

8.2 Дифференциальное сечение неупругого взаимодействия электронов с веществом

Основные формулы

Неупругое взаимодействие быстрого электрона с веществом приводит к возбуждению внутренних степеней свободы образца, или, другими словами, к изменению состояния мишени. В ходе неупругого рассеяния энергия и импульс электрона передаются электронам атомов и

происходят процессы возбуждения и ионизации дискретных атомных уровней и генерация плазмонов и электронно-дырочных пар.

Существуют различные подходы к описанию процесса неупругого рассеяния электрона. Одни из них основаны на рассмотрении процесса взаимодействия электрона с отдельным атомом, другие принимают во внимание взаимодействие электрона с мишенью в целом. Рассмотрим прежде всего теорию Бете, которая описывает возбуждение и ионизацию атомов на основе Борновской аппроксимации.

Пусть импульс, переданный налетающим электроном, есть $\hbar\vec{q} = \hbar\vec{k} - \hbar\vec{k}'$, где $\vec{k}$ и $\vec{k}'$ - волновые вектора налетающего и уходящего электронов. Величина q связана с углом рассеяния ϑ . Энергия $\Delta E = \hbar\omega$, потерянная электроном, передается мишени в процессе неупругого рассеяния. Следовательно, состояние мишени меняется от начального $|0\rangle$ до конечного $|n\rangle$, причем разность энергий этих состояний равна переданной энергии, $\hbar\omega_{n0} = \hbar\omega_n - \hbar\omega_0 = \hbar\omega$. Символ $|n\rangle$ означает здесь волновую функцию системы с Z электронами, а индекс n представляет ряд собственных значений всех квантовых наблюдаемых, характеризующих состояние. Считая, что состояние налетающего и уходящего электрона описывается плоской волной, а взаимодействие электрона с атомом определяется кулоновским потенциалом, легко найти скорость перехода из состояния $|0\rangle$ в состояние $|n\rangle$ по правилу Ферми. Дифференциальное сечение рассеяния в первом Борновском приближении получается делением скорости перехода на падающий поток и переходом от $\vec{q}$ к углу рассеяния. Это дает

$$\frac{d^2\sigma}{d\Omega d\omega} = \frac{4}{a_0^2 q^4} \frac{k'}{k} S(\vec{q}, \omega) \quad (8.2)$$

Здесь динамический структурный фактор $S(\vec{q}, \omega)$ определяется формулой

$$S(\vec{q}, \omega) = \sum_n |F_{n0}(\vec{q})|^2 \delta(\omega - \omega_{n0}), \quad (8.3)$$

Неупругий формфактор $F_{n0}(\vec{q})$, который имеет вид

$$F_{n0}(\vec{q}) = \langle n | \sum_{i=1}^Z e^{i\vec{q} \cdot \vec{r}_i} | 0 \rangle \quad (8.4)$$

полностью определяет результат рассеяния. Можно определить эквивалентную величину, обобщенную силу осциллятора

$$f_{n0}(\vec{q}) = \frac{\hbar\omega_{n0}}{(\hbar q)^2 / 2m} |F_{n0}(\vec{q})|^2 = \frac{\hbar\omega_{n0}}{E_R} \left(\frac{1}{a_0 q} \right)^2 |F_{n0}(\vec{q})|^2, \quad (8.5)$$

где $E_R = me^4 / 2\hbar^2 = 13.606$ эВ - энергия Ридберга, $a_0 = \hbar^2 / me^2 = 0.52918 \text{ \AA}$ - Боровский радиус. Обобщенная сила осциллятора $f_{n0}(\vec{q})$ является прямым обобщением оптической силы осциллятора f_{n0} , поскольку $\lim_{q \rightarrow 0} f_{n0}(\vec{q}) = f_{n0}$. Можно ввести дифференциальную силу осциллятора

$$\frac{\partial f(\vec{q}, \omega)}{\partial \omega} = \sum_n f_{n0}(\vec{q}) \delta(\omega - \omega_{n0}) = \frac{2m\omega}{\hbar q^2} S(\vec{q}, \omega) = \frac{\hbar\omega}{E_R} \left(\frac{1}{a_0 q} \right)^2 S(\vec{q}, \omega) \quad (8.6)$$

Заменяя элемент телесного угла $d\Omega$ на dq согласно закону сохранения импульса, $2\pi \sin \vartheta d\vartheta = \pi dq^2 / kk' = 2\pi q dq / kk'$, для дифференциального сечения рассеяния найдем

$$\frac{d^2 \sigma}{dq d\omega} = \frac{4\pi e^2}{a_0 q^3} \frac{1}{E} S(q, \omega) = \frac{2\pi e^4}{E \hbar \omega q} \frac{df(q, \omega)}{d\omega} \quad (8.7)$$

Очевидно, что если собственные состояния атома-мишени известны, то поведение атома при взаимодействии с налетающим электроном может быть исследовано точно. Проблема, таким образом, сводится к расчету атомной структуры.

Одной из универсальных особенностей дифференциальной силы осциллятора является наличие так называемого гребня Бете. Если изобразить $df(\vec{q}, \omega) / d\omega$ для атома в зависимости от q и ω , то можно увидеть широкий пик, максимум которого для больших q располагается вблизи дисперсионной кривой $\hbar\omega = (\hbar q)^2 / 2m$. Рисунок 8.4 демонстрирует этот факт для атома водорода (рисунок взят из работы [144]). Здесь горизонтальные оси $\hbar\omega / E_R$ и $\ln(qa_0)^2$ образуют базовую плоскость, а вертикальная ось представляет безразмерную дифференциальную силу осциллятора $E_R df(q, \omega) / d(\hbar\omega)$. Четырнадцать плоскостей расположены при

$\hbar\omega / E_R = \frac{3}{4}, \frac{8}{9}, 1, \frac{5}{4}, \frac{3}{2}, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9, 10$. Первые две плоскости представляют дискретный спектр,

в этом случае вертикальная шкала соответствует $\frac{1}{2} n^3 f_n(q)$. Пунктирная кривая и кривая,

обозначенная точками, показывает на базовой плоскости положение максимума гребня Бете и зависимость $\hbar\omega = (\hbar q)^2 / 2m$, соответственно. Близость этих кривых объясняется следующим образом. Для достаточно больших переданных импульсов выбитый электрон получает энергию много большую, чем энергия связи электрона в атоме. Поэтому этот электрон практически «забывает» свое начальное состояние и взаимодействие налетающего и атомного электронов можно рассматривать как классическое бинарное столкновение. При этом энергия и импульс связаны соотношением $\hbar\omega = (\hbar q)^2 / 2m$. Угол рассеяния вдоль этой дисперсионной кривой определяется моделью бинарных столкновений. Связь атомных электронов с ядром отражается в

том, что гребень Бете сохраняет конечную ширину. Поскольку дифференциальная сила осциллятора представляет собой дифференциальное сечение по переданному импульсу и по переданной энергии, ненулевая ширина гребня при фиксированной переданной энергии означает неопределенность в переданном импульсе. Его значение может лежать в некоторой окрестности наиболее вероятного значения.

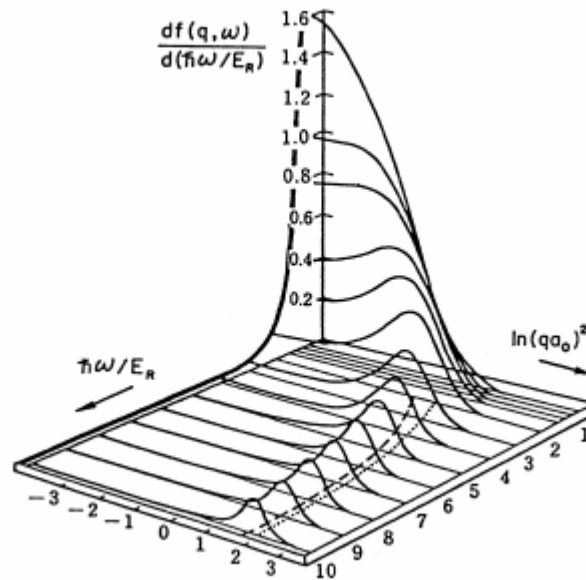


Рисунок 8.4 Гребень Бете для атома водорода. Горизонтальные оси $\hbar\omega / E_R$ и $\ln(qa_0)^2$ образуют базовую плоскость, а вертикальная ось представляет безразмерную дифференциальную силу осциллятора $E_R df(q, \omega) / d(\hbar\omega)$ (рисунок взят из работы [144]).

Отмеченные особенности процесса неупругого рассеяния электронов на атомах позволяют считать, что при больших передачах энергии дифференциальное сечение по переданной энергии может быть найдено из модели бинарных столкновений (свободно-свободного электронного взаимодействия [145]), что дает

$$\frac{d\sigma}{d(\hbar\omega)} = \left[\frac{d\sigma}{d(\hbar\omega)} \right]_{bin} = \frac{Z\pi e^4}{E} \frac{1}{(\hbar\omega)^2} \quad \text{при } \hbar\omega \gg E_{boun}, \quad (8.8)$$

где E_{boun} - характерная энергия связи атомных электронов. Эта формула была использована нами в главе 1 (формула (1.12)) при анализе дифференциального сечения неупругого взаимодействия.

Рассмотрим более подробно сечение ионизации атома водорода с вылетом вторичного электрона. Будем считать, что энергия вторичного электрона мала по сравнению с энергией первичного электрона и поэтому обменные эффекты несущественны. Решение такой задачи

приведено в [61]. Проинтегрированное по всем углам испускания вторичного электрона дифференциальное сечение рассеяния имеет вид

$$d\sigma = \left(\frac{\hbar^2}{me^2} \right)^2 \frac{2^{10} \bar{k}' \bar{v}}{\bar{k} \bar{q}^2} \frac{\left[\bar{q}^2 + \frac{1}{3}(1 + \bar{v}^2) \right] \exp\left(-\frac{2}{\bar{v}} \operatorname{arctg} \frac{2\bar{v}}{\bar{q}^2 - \bar{v}^2 + 1} \right)}{\left[(\bar{q} + \bar{v})^2 + 1 \right]^3 \left[(\bar{q} - \bar{v})^2 + 1 \right]^3 (1 - \exp(-2\pi/\bar{v}))} d\Omega d\bar{v} \quad (8.9)$$

Здесь $\bar{k}$, $\bar{k}'$ - безразмерные волновые векторы налетающего и уходящего электронов в единицах $\frac{me^2}{\hbar^2}$, $\bar{q} = \bar{k} - \bar{k}'$, $\bar{v}$ - волновой вектор вылетевшего электрона. Безразмерные

энергии налетающего и вылетевшего электронов в единицах E_R при этом будут иметь вид

$$\bar{E} = E/E_R = \bar{k}^2, \quad \bar{\varepsilon} = \varepsilon/E_R = \bar{v}^2 \quad (8.10)$$

Интегрируя выражение (8.9) по углам, можно найти дифференциальное сечение, рассчитанное на интервал энергии вторичного электрона. Для выполнения этого интегрирования удобно перейти от угла рассеяния θ к величине $\bar{q}$ по формуле

$$\bar{q}^2 = \bar{k}^2 + \bar{k}'^2 - 2\bar{k}\bar{k}' \cos \theta \quad (8.11)$$

При этом

$$\frac{d\sigma}{d\varepsilon} = \left(\frac{\hbar^2}{me^2} \right)^2 \frac{2^9 \pi}{E} \int_{\bar{q}_{\min}^2}^{\bar{q}_{\max}^2} \frac{\left[\bar{q}^2 + \frac{1}{3}(1 + \bar{v}^2) \right] \exp\left(-\frac{2}{\bar{v}} \operatorname{arctg} \frac{2\bar{v}}{\bar{q}^2 - \bar{v}^2 + 1} \right)}{\bar{q}^2 \left[(\bar{q} + \bar{v})^2 + 1 \right]^3 \left[(\bar{q} - \bar{v})^2 + 1 \right]^3 (1 - \exp(-2\pi/\bar{v}))} d\bar{q}^2 \quad (8.12)$$

$$\bar{q}_{\min}^2 = \bar{k}^2 + \bar{k}'^2 - 2\bar{k}\bar{k}', \quad \bar{q}_{\max}^2 = \bar{k}^2 + \bar{k}'^2 + 2\bar{k}\bar{k}'$$

Легко показать, что при энергии вылетевшего электрона много большей, чем энергия ионизации, дифференциальное сечение (8.12) асимптотически совпадает с (8.8). Действительно, при $\bar{\varepsilon} \gg 1$ величина $\bar{v}$ тоже велика, и подынтегральная функция в (8.12) имеет пик при $\bar{q} = \bar{v}$. Заменяя коэффициент при $\left[(\bar{q} - \bar{v})^2 + 1 \right]^3$ в подынтегральной функции его значением при $\bar{q} = \bar{v}$ и распространяя пределы интегрирования до бесконечности, найдем

$$\frac{d\sigma}{d\varepsilon} = \left(\frac{\hbar^2}{me^2} \right)^2 \frac{\pi}{E} \frac{1}{(\bar{\varepsilon}/2)^2} = \frac{e^4 \pi}{E \varepsilon^2} \quad (8.13)$$

Поскольку энергия, потерянная налетающим электроном, связана с ε соотношением $\hbar\omega = \varepsilon + \Delta E$, где ΔE - энергия ионизации, то

$$\frac{d\sigma}{d(\hbar\omega)} = \frac{e^4 \pi}{E(\hbar\omega - \Delta E)^2} \quad (8.14)$$

Это выражение совпадает с (8.8), так как энергия вылетевшего электрона в рассматриваемых условиях близка к энергии, потерянной налетающим электроном.

Формула (8.12) позволяет оценить $\frac{d\sigma}{d(\hbar\omega)}$ и в том случае, когда $\bar{\varepsilon}$ не является большой. Как показывают численные оценки, отношение $\frac{d\sigma}{d(\hbar\omega)} / \left[\frac{d\sigma}{d(\hbar\omega)} \right]_{bin}$ имеет большой пик, максимум которого находится приблизительно на расстоянии $1.2 E_R$ от порога ионизации.

Проведение подобного анализа для атомов других элементов достаточно затруднительно. При моделировании транспорта электронов по методу Монте-Карло в модели однократного рассеяния необходимо выражение для дифференциального сечения неупругого рассеяния. Расчет такого сечения на основе вышеприведенных формул для произвольных атомов весьма непросто. В то же время, детальное знание сечения является необходимым далеко не во всех задачах теории переноса электронов средних энергий. Зачастую детальная информация о поведении сечения неупругого рассеяния при малой потере энергии не оказывает существенного влияния на вычисление интегральных характеристик электронного распределения. В связи с этим можно предложить некоторую модельную аппроксимацию дифференциального сечения, которая обладала бы следующими свойствами:

- а) Отношение $\frac{d\sigma}{d(\hbar\omega)} / \left[\frac{d\sigma}{d(\hbar\omega)} \right]_{bin}$ имеет пик в области малых потерь энергии и стремится к единице при потерях энергии, существенно превышающих энергию ионизации
- б) Полное сечение и средние потери энергии, рассчитанные с помощью модельного дифференциального сечения, совпадают с соответствующими значениями для истинного дифференциального сечения неупругого рассеяния.

Представим такую аппроксимацию в виде модификации формулы (1.12):

$$\frac{d\sigma_{in}(E, Q)}{dQ} = \frac{\pi Z e^4}{E} \cdot f(E, Q),$$

$$f(E, Q) = A Q \exp(-\alpha Q) + \frac{1}{Q^2 + \varepsilon^2} \quad (8.15)$$

Здесь параметр ε выбирается как величина порядка J , а величины A , α определяются по известным значениям полного сечения $\Sigma_{in}(E)$ и средних потерь энергии $\bar{Q}$. Для вычисления $\Sigma_{in}(E)$ можно использовать, например, сечение полного рассеяния, полученное в приближении Хартри [146],

$$\Sigma(E) = \Sigma_{el}(E) + \Sigma_{in}(E) = \frac{4\pi m^2 e^4 a^2}{3\hbar^2 p^2} \left\{ 7Z^2 - 13Z - 24Z \ln \left(a \frac{m\Delta}{\hbar p} \right) \right\} \quad (8.16)$$

Здесь p - импульс налетающего электрона, $a = (8/27)a_0$, a_0 - боровский радиус, Δ - средняя потерянная энергия. Средние потери находятся по формуле Бете (1.17) или по формуле Джоя и Луо [90]

$$\bar{Q} = \frac{2\pi Z e^4}{E} \ln \left(\sqrt{\frac{e}{2}} \frac{E + kJ}{J} \right). \quad (8.17)$$

Формула (8.15) обеспечивает непрерывность и гладкость сечения и весьма удобна для моделирования дифференциального сечения рассеяния при энергиях налетающего электрона, существенно превосходящих потенциалы ионизации оболочек атома. Понятно, что при энергиях налетающего электрона, сопоставимых с энергией ионизации оболочек, использовать ее нельзя. Тем не менее она верно отражает поведение дифференциального сечения рассеяния при больших Q . Как уже отмечалось в параграфе 1.1, использование формул, обладающих свойствами а и б, для аппроксимации дифференциальных сечений рассеяния приводит к асимптотически эквивалентным результатам при разложении интеграла столкновений по малому параметру J/E .

Связь между теорией Бете для отдельного атома и многочастичной теорией нелокального возбуждения дана в работе [147], где было отмечено, что флуктуации электронной плотности ответственны за неупругое рассеяние электронов. Динамический структурный фактор $S(\vec{q}, \omega)$ при этом является просто преобразованием Фурье по пространству и времени от корреляционной функции плотности:

$$\begin{aligned} S(\vec{q}, \omega) &= \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \langle 0 | \rho_q(t) \rho_q(0) | 0 \rangle e^{i\omega t} dt = \\ &= \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{i\omega t} \iint d\vec{r} d\vec{r}' e^{-i\vec{q} \cdot (\vec{r} - \vec{r}')} \langle 0 | \rho(\vec{r}, t) \rho(\vec{r}', 0) | 0 \rangle \end{aligned} \quad (8.18)$$

Здесь $\rho_q(t) = e^{i\hat{H}t} \rho_q e^{-i\hat{H}t}$ - Гейзенберговское представление преобразования Фурье оператора электронной плотности,

$$\rho_q = \int d\vec{r} e^{-i\vec{q} \cdot \vec{r}} \rho(\vec{r}) = \int d\vec{r} e^{-i\vec{q} \cdot \vec{r}} \sum_i \delta(\vec{r} - \vec{r}_i) = \sum_i e^{-i\vec{q} \cdot \vec{r}_i}, \quad (8.19)$$

$\hat{H}$ означает невозмущенный гамильтониан мишени. Суммирование в (8.19) производится по всем электронам. Поэтому формфактор неупругого рассеяния может быть представлен как $F_{n0}(\vec{q}) = (\rho_q^+)_{n0} = (\rho_{-q})_{n0}$, и структурный фактор приобретает вид

$$S(\vec{q}, \omega) = \sum_n \left| (\rho_q^+)_{n0} \right|^2 \delta(\omega - \omega_{n0}). \quad (8.20)$$

Заметим, что замена оператора плотности ρ_q на оператор флуктуации плотности $\bar{\rho}_q = \rho_q - (\rho_q)_{n_0}$ в выражении (8.20) для $S(\vec{q}, \omega)$ не изменяет результат. В теории Бете для атомного возбуждения величина $\langle 0 | \rho_q(t) \rho_q(0) | 0 \rangle$ просто представляет перераспределение атомных электронов от момента времени 0 до момента t в импульсном пространстве, и, следовательно, такая флуктуация плотности заряда является результатом неупругого рассеяния.

Из зависящей от времени теории возмущений можно вывести макроскопическую диэлектрическую функцию, $\varepsilon(\vec{q}, \omega)$, для Z -электронной системы, которая описывает отклик системы на возмущение, внесенное внешним зарядом. С помощью оператора плотности, определенного в (8.19), диэлектрическая функция может быть записана [148]

$$\frac{1}{\varepsilon(\vec{q}, \omega)} - 1 = \frac{4\pi e^2}{\hbar q^2} \sum_n |(\rho_q^+)_{n_0}|^2 \left\{ \frac{1}{\omega - \omega_{n_0} + i0^+} - \frac{1}{\omega + \omega_{n_0} + i0^+} \right\}. \quad (8.21)$$

Величина ω здесь положительна. Второй член в фигурных скобках соответствует увеличению энергии электрона в столкновении, и его следует опустить, поскольку в качестве начального состояния мишени рассматривается основное состояние. Принимая во внимание соотношение

$$\frac{1}{\omega \pm i0^+} = P\left(\frac{1}{\omega}\right) \mp i\pi\delta(\omega) \quad (8.22)$$

можно найти связь между диэлектрической функцией, динамическим структурным фактором и дифференциальной силой осциллятора

$$\text{Im}\left\{\frac{-1}{\varepsilon(\vec{q}, \omega)}\right\} = \frac{4\pi^2 e^2}{\hbar q^2} S(\vec{q}, \omega) = \frac{2\pi^2 e^2}{m\omega} \frac{df(\vec{q}, \omega)}{d\omega}. \quad (8.23)$$

Отметим, что при выводе (8.23) нет больше никаких дополнительных ограничений, накладываемых на мишень. То есть это соотношение может быть приложено и к атому, и к нелокальной многочастичной системе (валентным электронам в твердом теле), если собственные состояния мишени известны. Для электронов в твердом теле оператор плотности (8.19) должен включать суммирование по всем рассматриваемым электронам. Подстановка (8.23) в (8.7) позволяет найти дифференциальную вероятность рассеяния электрона на единице пути в твердом теле

$$\frac{d^2 \lambda^{-1}}{d(\hbar\omega)dq} = \frac{1}{\pi a_0 E q} \text{Im}\left\{\frac{-1}{\varepsilon(q, \omega)}\right\}. \quad (8.24)$$

Здесь E – энергия электрона, отсчитываемая от дна зоны проводимости, $\hbar\omega$ и $\hbar q$ – изменение энергии и импульса электрона в результате неупругого рассеяния, $a_0 = \hbar^2 / me^2$ –

боровский радиус. Таким образом, диэлектрическая функция дает возможность детально описать угловое и энергетическое перераспределение электронов в процессе неупругого взаимодействия с твердым телом.

Аналитическое выражение для диэлектрической проницаемости $\tilde{\epsilon}(q, \omega)$, зависящей от частоты и волнового вектора, известно лишь в некоторых простых случаях, например, когда применимо приближение газа невзаимодействующих электронов. В этом случае диэлектрическая функция была получена Линдхардом [149]. На основе этой диэлектрической функции в работах [150, 151] было рассчитано дифференциальное сечение неупругого рассеяния, которое описывало плазмонное возбуждение и генерацию электронно-дырочных пар. К сожалению, функция Линдхарда справедлива для очень ограниченного класса материалов (так называемых свободно-электронных металлов) и вряд ли может быть использована для других материалов, таких как переходные или благородные металлы. В этих материалах оптические диэлектрические данные имеют особенности, обусловленные межзонными переходами. Теоретический расчет зависимости диэлектрической функции от q весьма затруднителен. Это демонстрируют работы [152–155], в которых диэлектрическая функция была рассчитана численно только для некоторых значений q и нескольких первых обратных векторов решетки с использованием реальных данных о зонной структуре для некоторых простых металлов и полупроводников. Поэтому оказывается невозможным использовать диэлектрическую функцию, рассчитанную из данных о зонной структуре, для оценки результатов неупругого рассеяния.

Выход из ситуации заключается в использовании экспериментальных данных о диэлектрической функции, полученных оптическим методом и спектроскопией электронных потерь энергии (метод EELS). Результаты экспериментов по EELS относятся к области малых q , а оптические эксперименты дают лишь значения $\tilde{\epsilon}(0, \omega)$. Таким образом, функция $\text{Im}(-1/\tilde{\epsilon}(q, \omega))$ оказывается определенной лишь в окрестности прямой $\square$. Для расширения области определения $\text{Im}(-1/\tilde{\epsilon}(0, \omega))$ на всю плоскость можно воспользоваться методом экстраполяции, предложенным в работах [156–159]. Суть его заключается в том, что $\text{Im}(-1/\tilde{\epsilon}(q, \omega))$ представляется в виде интеграла по частотам возможных возбуждений плазмонов от функций потерь, определяемых Линдхардовской диэлектрической функцией $\tilde{\epsilon}_L(q, \omega)$. В приближении SPA (Single-Pole Approximation) $\text{Im}(-1/\tilde{\epsilon}_L(q, \omega))$ переходит в δ -функцию, и величины ω , q , ω_p оказываются связанными дисперсионным соотношением

$$\omega = \omega_q(q, \omega_p). \quad (8.25)$$

Полученное в результате экстраполяции $\text{Im}(-1/\varepsilon(0, \omega))$ выражение для дважды дифференциального сечения неупругого рассеяния имеет вид [159]:

$$\frac{d^2\sigma}{d(\hbar\omega)dq} = \frac{1}{\pi a_0 q E} \frac{\omega_0}{\omega} \text{Im} \left(-\frac{1}{\varepsilon(\hbar\omega_0)} \right). \quad (8.26)$$

где $\varepsilon(\hbar\omega) = \varepsilon(0, \omega)$ – оптическая диэлектрическая проницаемость, ω_0 – положительное решение уравнения

$$\omega = \omega_q(q, \omega_0). \quad (8.27)$$

Интегрирование дважды дифференциального сечения (8.26) по всем возможным значениям переданного импульса (т. е. по всем возможным углам неупругого рассеяния) дает выражение для дифференциального сечения по потерям энергии:

$$\frac{d\sigma}{d(\hbar\omega)} = \int_0^{\hbar q_{\max}} \frac{d^2\sigma}{d(\hbar\omega)dq} dq. \quad (8.28)$$

Здесь $\hbar q_{\max}$ – максимально возможное значение переданного импульса.

Конкретная форма зависимости $\omega_0(\omega, q)$, а, следовательно, и дифференциальных сечений (8.26) и (8.28), определяется выбором дисперсионного соотношения. В столкновениях с большой передачей энергии и импульса электрон ведет себя как классический объект, поэтому $\omega_q \rightarrow \hbar q^2/2m$ при $q \rightarrow \infty$. Дисперсионные соотношения, удовлетворяющие этому условию, могут быть выбраны в различных формах. В работах [160, 161] дисперсионное соотношение аппроксимировалось полученным в [162] выражением

$$\omega_q^2 = \omega_0^2 + \frac{1}{2} \cdot v_F^2(\omega_0) \cdot q^2 + (\hbar q^2/2m)^2 \quad (8.29)$$

где v_F – скорость Ферми. Выбор дисперсионного соотношения в виде

$$\omega_q = \omega_p + \frac{\hbar q^2}{2m}, \quad (8.30)$$

предложенном в [163, 164], приводит к наиболее простому выражению для решения ω_0 уравнения (8.27)

$$\omega_0 = \omega - \frac{\hbar q^2}{2m}. \quad (8.31)$$

Использование (8.31) существенно облегчает расчет величин, описывающих неупругое взаимодействие электрона с веществом. В то же время, как показано в [158], различие в длинах свободного пробега, найденных с помощью выражений (8.29) и (8.30), при $E > 100$ eV незначительно.

Подстановка (8.26), (8.31) в (8.28) дает:

$$\frac{d\sigma}{d\hbar\omega} = \frac{1}{4\pi^2 a_0 E} \cdot \int_0^{2 \cdot (\hbar\omega - E) + \sqrt{E(E - \hbar\omega)}} \frac{x}{(\hbar\omega - x)\hbar\omega} \operatorname{Im}\left(\frac{-1}{\varepsilon(x)}\right) dx \quad (8.32)$$

Реализация расчета дифференциального сечения неупругого рассеяния на основе диэлектрической функции

Ресурсы современной вычислительной техники позволяют использовать в методе Монте-Карло модели однократного рассеяния, в которых результаты каждого акта взаимодействия электрона с веществом определяются дифференциальными сечениями различных процессов. При этом оптимальность, а можно сказать, что и сама возможность программной реализации метода Монте-Карло зависит от формы представления информации о дифференциальных сечениях.

В настоящем разделе излагается способ расчета результатов неупругого взаимодействия электрона с веществом, базирующийся на использовании дважды дифференциального сечения неупругого рассеяния и ориентированный на эффективную реализацию метода Монте-Карло. Этот способ был предложен в работе [165].

Как видно из обзора, приведенного в предыдущем разделе, дифференциальное сечение по потерям энергии может быть рассчитано на основе диэлектрического подхода с помощью формулы (8.32). Нами были выполнены по этой формуле расчеты для Al, Au и Ge в диапазоне энергий $5 \text{ eV} < E < 30 \text{ keV}$. Анализ полученных зависимостей позволил сделать некоторые выводы о свойствах (8.32). Так, оказалось, что для энергий электрона порядка единиц keV и выше (8.32) может быть приближенно представлено в виде

$$\frac{d\sigma}{d\hbar\omega} \approx C(E) \cdot W(\hbar\omega), \quad (8.33)$$

то есть, в этом диапазоне энергий форма зависимости дифференциальных сечений от потери энергии для данного вещества описывается универсальной функцией $W(\hbar\omega)$ и не зависит от энергии налетающего электрона E . При энергиях E и потерях энергии $\hbar\omega$, много больших потенциалов ионизации всех электронных оболочек, дифференциальное сечение (8.32) асимптотически приближается к сечению свободно-свободного электронного взаимодействия (8.8), в связи с чем функции $W(\hbar\omega)$ и $C(E)$ имеют асимптотику:

$$W(\hbar\omega) \rightarrow 1/(\hbar\omega)^2, \quad C(E) \rightarrow C_0 / E \quad (8.34)$$

Здесь C_0 – константа, зависящая от состава мишени.

При $\hbar\omega$ порядка десятков eV функция $W(\hbar\omega)$ имеет достаточно сложную структуру, отражающую форму $\operatorname{Im}(-1/\varepsilon(\hbar\omega))$. Тем не менее, она может быть аппроксимирована аналитическим выражением, в которое, естественно, входит большое число параметров,

определяющих положение и характер основных особенностей. Этот способ описания $W(\hbar\omega)$ оказывается все же эффективнее, чем просто задание $W(\hbar\omega)$ массивом значений, и несет в себе больше информации об ее структуре. Аналитическое выражение, аппроксимирующее $W(\hbar\omega)$, имеет вид:

$$W(x) = x^{-2-\rho} \cdot \prod_{k=1}^n \left[1 + \left(\frac{x}{d_k} \right) \right]^{r_k} \cdot W_0(x), \quad \rho = \sum_{k=1}^n r_k, \quad (8.35)$$

$$W_0(x) = \prod_{i=1}^m \left[\arctg \left(\alpha_i \left(\frac{x}{w_i} - 1 \right) \right) + \frac{\pi}{2} \right]^{\gamma_i} \cdot \left[\arctg \left(\beta_i \left(\frac{w_i}{x} - 1 \right) \right) + \frac{\pi}{2} \right]^{\gamma_i} \quad (8.36)$$

Первые два сомножителя в (8.35) определяют общую форму кривой $W(x)$ и обеспечивают ее правильное асимптотическое поведение при больших x , а каждый из сомножителей в произведении (8.36) задает положение и форму одного из пиков. В таблице 8.1 представлены значения параметров r_k , d_k , α_i , β_i , γ_i , w_i , n , m , найденные для Al, Au и Ge. На рисунках 8.5 – 8.7 приведены графики дифференциальных сечений рассчитанных по формуле (8.32) и аппроксимированных зависимостью (8.35) при энергиях 2, 10 и 30 keV.

При численном моделировании траектории методом Монте-Карло для расчета потери энергии электрона и изменения направления его движения в результате неупругого взаимодействия с веществом последовательно решаются два трансцендентных уравнения. Уравнение для определения потери энергии имеет вид:

$$R = \int_0^{Q \cdot \hbar\omega_{\max}} \frac{d\sigma}{d\hbar\omega} d\hbar\omega \bigg/ \int_0^{\hbar\omega_{\max}} \frac{d\sigma}{d\hbar\omega} d\hbar\omega = \frac{G_1(E, Q)}{G_1(E, 1)}, \quad (8.37)$$

где Q – относительная потеря энергии в неупругом столкновении, R – случайное число, равномерно распределенное в интервале $[0, 1]$, $\hbar\omega_{\max}$ – максимально возможная потеря энергии.

Величина $\hbar\omega_{\max}$ определяется соотношением $\hbar\omega_{\max} = \min(E, E - E_F)$, где E_F – уровень Ферми.

Использование выражения (8.32) и перемена порядка интегрирования дает возможность привести интегралы, входящие в (8.37), к виду:

$$G_1(E, Q) = \frac{1}{2\pi a_0 E} \int_0^{A(E, Q)} \text{Im} \left(\frac{-1}{\varepsilon(x)} \right) \ln \left[\frac{E(Q) \cdot (E_1 + x)}{E_1 \cdot (E(Q) + x)} \right] dx \quad (8.38)$$

где

$$E(Q) = \min(Q \cdot \hbar\omega_{\max} - x, (\sqrt{E} + \sqrt{E - 2x})^2 / 4), \quad E_1 = (\sqrt{E} - \sqrt{E - 2x})^2 / 4, \\ A(E, Q) = \min(Q \cdot \hbar\omega_{\max}, E / 2).$$

Заметим, что в области справедливости соотношения (8.33) функция G_1 может быть представлена в виде

$$G_1(E, Q) = C(E) \cdot S(Q \cdot \hbar \omega_{\max}), \quad (8.39)$$

где $S(x)$ – первообразная $W(x)$. Определение результатов неупругого рассеяния из (8.37) неэффективно, так как требует решения трансцендентного уравнения на каждом шаге численного моделирования траектории. В связи с этим имеет смысл рассмотреть функцию $Q(E, R)$, неявно определяемую соотношением (8.37).

Ge		Ge		Au	
$n = 1; m = 4$ $d_1 = 14; r_1 = -3.3;$ $w_1 = 1.4, w_2 = 14.8,$ $w_3 = 72, w_4 = 160;$ $\alpha_1 = 155, \alpha_2 = 55,$ $\alpha_3 = 5, \alpha_4 = 2;$ $\beta_1 = 25, \beta_2 = 15,$ $\beta_3 = 50, \beta_4 = 4;$ $\gamma_1 = 0.4, \gamma_2 = 1.85,$ $\gamma_3 = -0.5, \gamma_4 = 0.8;$		$n = 2; m = 5$ $d_1 = 0.5, d_2 = 18;$ $r_1 = 1.55, r_2 = -3.3;$ $w_1 = 0.68, w_2 = 2,$ $w_3 = 4, w_4 = 15,$ $w_5 = 200;$ $\alpha_1 = 1.7, \alpha_2 = 3,$ $\alpha_3 = 8, \alpha_4 = 3.1,$ $\alpha_5 = 2.5;$ $\beta_1 = 18, \beta_2 = 10,$ $\beta_3 = 4, \beta_4 = 4.55,$ $\beta_5 = 3;$ $\gamma_1 = -4.2, \gamma_2 = -0.8,$ $\gamma_3 = -1, \gamma_4 = 1.6,$ $\gamma_5 = 0.6;$		$n = 1; m = 4$ $d_1 = 62; r_1 = -2.95;$ $w_1 = 1, w_2 = 2.3,$ $w_3 = 50, w_4 = 140;$ $\alpha_1 = 1, \alpha_2 = 14,$ $\alpha_3 = 1.5, \alpha_4 = 9;$ $\beta_1 = 100, \beta_2 = 1,$ $\beta_3 = 2, \beta_4 = 5;$ $\gamma_1 = 0.14, \gamma_2 = 1.6,$ $\gamma_3 = 3.8, \gamma_4 = -0.4;$	
E (eV)	C(E) (eV·cm) ⁻¹	E (eV)	C(E) (eV·cm) ⁻¹	E (eV)	C(E) (eV·cm) ⁻¹

2000	52000	2000	0.35	2000	55.5
4000	29000	4000	0.2	4000	31.6
6000	21000	6000	0.145	6000	22.5
8000	16000	8000	0.115	8000	17.6
10000	12900	10000	0.093	10000	14.5
12000	10700	12000	0.08	12000	12.4
14000	9400	14000	0.07	14000	10.9
16000	8400	16000	0.06	16000	9.6
20000	6700	20000	0.05	20000	7.9
25000	5400	25000	0.042	25000	6.5
30000	4500	30000	0.034	30000	5.5

Таблица 8.1. Параметры аппроксимации дифференциального сечения неупругого взаимодействия электрона с веществом.

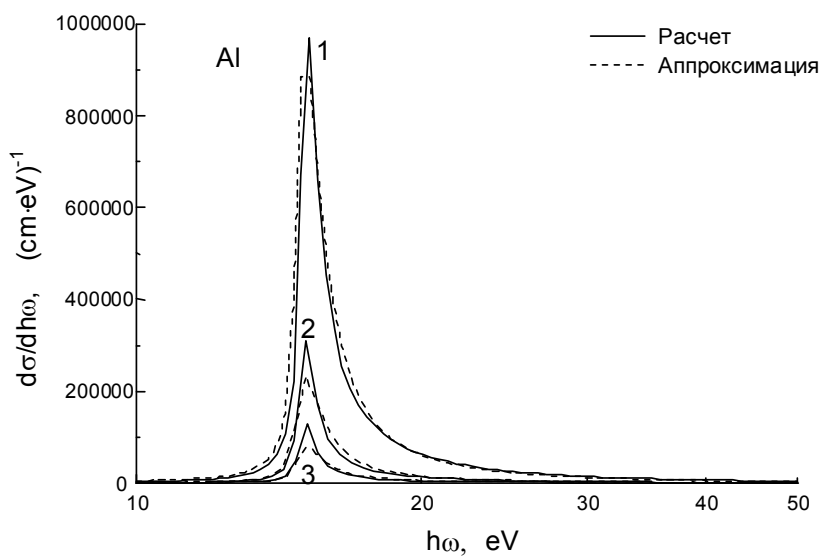


Рисунок 8.5 Аппроксимация дифференциального сечения по потерям энергии аналитической зависимостью для Al. Кривые 1, 2, 3 рассчитаны при значениях начальной энергии электрона $E=2, 10, 30 \text{ keV}$ соответственно.

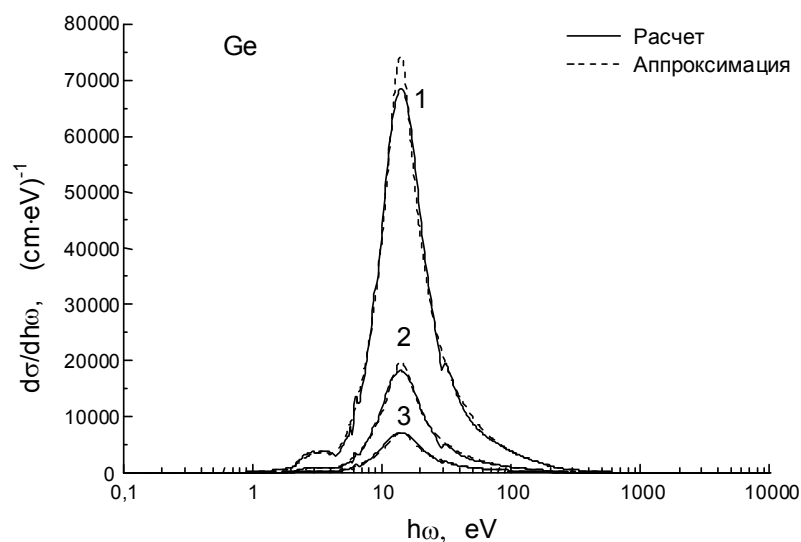


Рисунок 8.6 Аппроксимация дифференциального сечения по потерям энергии аналитической зависимостью для Ge. Кривые 1, 2, 3 рассчитаны при значениях начальной энергии электрона $E=2, 10, 30 \text{ keV}$ соответственно.

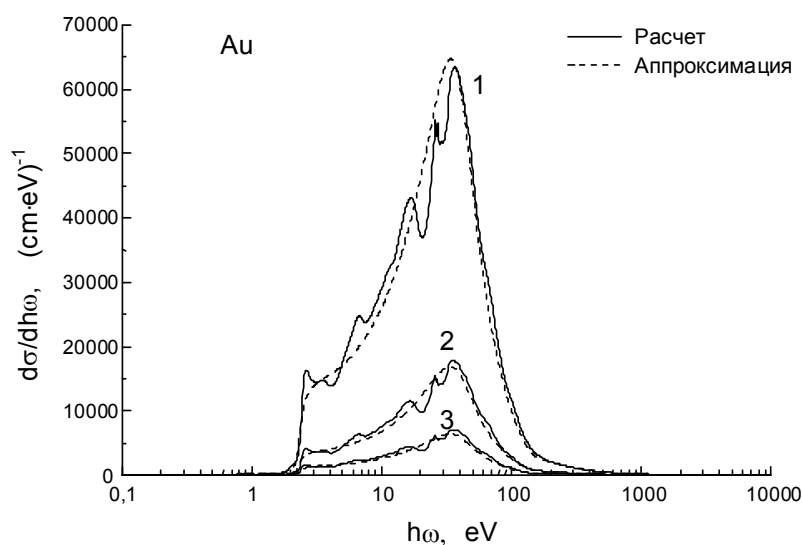


Рисунок 8.7 Аппроксимация дифференциального сечения по потерям энергии аналитической зависимостью для Au. Кривые 1, 2, 3 рассчитаны при значениях начальной энергии электрона $E=2, 10, 30 \text{ keV}$ соответственно.

Выясним прежде всего некоторые свойства $Q(E, R)$, обусловленные асимптотическими свойствами (8.33), (8.34) дифференциального сечения неупругого рассеяния. При выполнении соотношения (8.39) зависимость Q от E сводится лишь к изменению масштаба, т.е.

$$Q = \frac{S^{-1}(R \cdot S(\hbar\omega_{\max}))}{\hbar\omega_{\max}}. \quad (8.40)$$

и не зависит от $C(E)$ в выражении (8.33). Используя выражение (8.33) и предполагая, что величины Q , Q_0 выбраны в области справедливости асимптотики функции W , для G_1 получим

$$G_1(E, Q) = G_1(E, Q_0) + \int_{Q_0 \cdot \hbar\omega_{\max}}^{Q \cdot \hbar\omega_{\max}} \frac{C(E)}{(\hbar\omega)^2} d\hbar\omega, \quad (8.41)$$

откуда следует, что

$$Q(E, R) = \frac{C_1}{C_2 - R}. \quad (8.42)$$

Здесь

$$C_1 = \frac{C(E)}{G_1(E, 1) \cdot \hbar\omega_{\max}}, \quad C_2 = \frac{G_1(E, Q_0)}{G_1(E, 1)} + \frac{C(E)}{G_1(E, 1) \cdot Q_0 \cdot \hbar\omega_{\max}}. \quad (8.43)$$

Отметим, что соотношение (8.42) справедливо для $R > G_1(E, Q_0)/G_1(E, 1)$, что следует из положительности интеграла в (8.41).

Анализ свойств функции $Q(E, R)$ позволил найти для нее аналитическую аппроксимацию в виде пятипараметрической зависимости

$$Q(E, R) = F(a(E), b(E), g(E), p(E), m(E), R) \quad (8.44)$$

где параметры a , b , g , p – кусочно-непрерывные функции E , а параметр m – кусочно-постоянная, определяющая общую форму кривой $F(R)$ (здесь и далее параметры a , b , g , p , m в списке аргументов опускаются). Функция $F(R)$ определяется выражениями:

$$\begin{aligned} F(R) &= Z(R)/Z(1), \\ Z(R) &= (G(R) + H(R) - H(0)) \cdot \arctg(5000cR) \\ G(R) &= b \left[1 + \left(\frac{cR}{g} \right)^m \right]^{-\frac{p}{m}} \cdot (cR)^p, \quad H(R) = \left[\left(\frac{1}{1-g} \right)^{|m|} + \left(\frac{1}{1-cR} \right)^{|m|} \right]^{\frac{1}{|m|}}, \quad c = \frac{1}{1+a}. \end{aligned} \quad (8.45)$$

Легко видеть, что при $cR \rightarrow 1$ главную роль в выражении для $Z(R)$ играет слагаемое $H(R)$, при этом $F(R)$ стремится к виду (8.42). При положительных значениях параметра m это соответствует значениям аргумента $R > g/c$, а при $R < g/c$ функция $F(R)$ представляет собой степенную зависимость. Переход от одного участка зависимости $F(R)$ к другому тем более резок, чем больше значение параметра m . При отрицательных значениях параметра m функция $F(R)$ стремится к константе в области малых значений аргумента $R < g/c$, а в области $R > g/c$ оба слагаемых $H(R)$ и $G(R)$ дают вклад в функцию $Z(R)$. При выборе вида функции (8.45) учитывалось соотношение (8.40), из которого видно, что в выражение для аппроксимирующей функции должен входить масштабный множитель. В выражении (8.45) масштабным множителем

является величина c . Из сравнения выражений (8.40) и (8.45) следует, что при начальных энергиях электрона $E > E_0$, где E_0 величина порядка keV, зависимость аппроксимирующей функции от энергии выражается функцией $a(E)$, остальные параметры аппроксимации в этом диапазоне энергий постоянны.

При небольших энергиях, сравнимых с энергиями возбуждения плазмонов, форма $Q(E, R)$ обусловлена сложной структурой дифференциального сечения (8.32) в области плазменных пиков, а соотношения (8.33) и (8.34) не выполняются, поэтому выражение для аппроксимирующей функции $F_0(R)$ отличается от (8.45):

$$F_0(R) = 1 - Y(1 - R)^{g(1-Y(1-R))}$$

$$Y(R) = R \left(a + \frac{1-a}{1-p} \cdot \frac{1 - (1-R^b)^p - pR^b}{R^b} \right). \quad (8.46)$$

Функция $F_0(R)$ гибко меняет форму в зависимости от значений параметров.

Итак, при использовании аппроксимирующих зависимостей (8.45), (8.46) потери энергии в каждом неупругом столкновении вычисляются по простой аналитической формуле. Полная информация, необходимая для расчета потерь энергии в неупругом столкновении, содержится в пяти одномерных массивах $a(E)$, $b(E)$, $g(E)$, $p(E)$, $m(E)$, а при энергиях $E > E_0$ – в одном массиве $a(E)$.

Перейдем теперь к расчету угла рассеяния в неупругом взаимодействии. Изменение направления движения электрона в результате неупругого столкновения определяется из трансцендентного уравнения:

$$R = G_2(E, \hbar\omega, \theta) / G_2(E, \hbar\omega, \theta_{\max}) \quad (8.47)$$

где R , как и раньше, случайное число, равномерно распределенное в интервале $[0,1]$, а через $G_2(E, Q, \theta)$ обозначен интеграл

$$G_2(E, \hbar\omega, \theta) = \int_{B(E, \hbar\omega, \theta)}^{B(E, \hbar\omega, 0)} \frac{x}{\hbar\omega - x} \operatorname{Im} \left(\frac{-1}{\varepsilon(x)} \right) dx \quad (8.48)$$

$$B(E, \hbar\omega, \theta) = 2(\hbar\omega - E + \cos \theta \cdot \sqrt{E \cdot (E - \hbar\omega)}) .$$

Максимально возможный угол рассеяния $\theta_{\max}$ определяется уравнением

$$B(E, \hbar\omega, \theta_{\max}) = 0 \quad (8.49)$$

Для отыскания угла рассеяния из соотношения (8.47) необходим трехмерный массив значений интеграла $G_2(E, \hbar\omega, \theta)$. Однако, вследствие того, что $G_2(E, \hbar\omega, \theta)$ зависит от E и θ лишь через пределы интегрирования, объем данных, необходимых для определения угла рассеяния, может быть значительно уменьшен. Действительно, вводя функцию

$$G(\hbar\omega, A) = \int_0^{D(\hbar\omega, A)} \frac{x}{\hbar\omega - x} \operatorname{Im} \left(\frac{-1}{\varepsilon(x)} \right) dx \quad (8.50)$$

$$D(\hbar\omega, A) = B(A, \hbar\omega, 0) = 2 \cdot (\hbar\omega - A + \sqrt{A \cdot (A - \hbar\omega)}) ,$$

где параметр A связан с E и θ соотношением

$$\hbar\omega - E + \cos\theta \cdot \sqrt{E \cdot (E - \hbar\omega)} = \hbar\omega - A + \sqrt{A \cdot (A - \hbar\omega)} , \quad (8.51)$$

легко заметить, что

$$G_2(E, \hbar\omega, \theta) = G(\hbar\omega, A(E, 0)) - G(\hbar\omega, A(E, \theta)) . \quad (8.52)$$

При численном моделировании неупругого столкновения значения $G(\hbar\omega, A)$ для произвольных $\hbar\omega$ и A находятся с помощью интерполяции. Можно оценить, как влияет ошибка интерполяции на точность определения угла рассеяния. Дифференцируя (8.50) по θ , найдем:

$$d\theta = \frac{dG}{G'_D \sqrt{E(E - \hbar\omega)} \cdot \sin\theta} , \quad (8.53)$$

$$G'_D = \frac{D(\hbar\omega, A)}{\hbar\omega - D(\hbar\omega, A)} \cdot \operatorname{Im} \left(-\frac{1}{\varepsilon(D(\hbar\omega, A))} \right) \quad (8.54)$$

Отсюда следует, что наиболее высоки требования к качеству интерполяции в области больших энергий, где $G'_D \sim \operatorname{Im}(-1/\varepsilon(\hbar\omega)) \sim 10^{-6} \div 10^{-5} \text{ (cm}\cdot\text{eV)}^{-1}$. Это область энергий значительно больших, чем энергии возбуждения плазмонов и электронов из валентной зоны, поэтому подынтегральная функция меняется плавно везде, за исключением конечного числа точек, соответствующих возбуждению глубоких электронных оболочек. В этих точках подынтегральная функция в (8.50) терпит разрыв. Чтобы повысить точность интерполяции в окрестности точек разрыва, вместо $G(\hbar\omega, A)$ рассматривался интеграл от гладкой функции

$$\tilde{G}(\hbar\omega, A) = \int_0^{D(\hbar\omega, A)} \frac{xP(x)}{\hbar\omega - x} dx , \quad (8.55)$$

где

$$P(x) = \begin{cases} \operatorname{Im}(-1/\varepsilon(x)), & x > x_n \\ \operatorname{Im}(-1/\varepsilon(x)) + \sum_{i=k}^n U_i, & x_{k-1} < x < x_k \end{cases} , \quad (8.56)$$

x_k — координаты точек разрыва подынтегральной функции,

$$U_i = \operatorname{Im}(-1/\varepsilon(x_i + 0)) - \operatorname{Im}(-1/\varepsilon(x_i - 0)) . \quad (8.57)$$

Значения $G(\hbar\omega, A)$ легко получить из $\tilde{G}(\hbar\omega, A)$:

$$G(\hbar\omega, A) = \tilde{G}(\hbar\omega, A) - \sum_{i=1}^k \int_0^{x_i} \frac{U_i x}{\hbar\omega - x} dx - \int_0^A \left(\sum_{i=k+1}^n U_i \right) \frac{x}{\hbar\omega - x} dx \quad (8.58)$$

$$x_k < D(\hbar\omega, A) < x_{k+1}.$$

Использование этого приема позволило уменьшить максимальные ошибки в определении угла неупругого рассеяния электронов в окрестности скачков подинтегральной функции с 0.2 до 0.05 радиан.

Нами были оценены относительные ошибки в определении такой важной характеристики процесса рассеяния как средние потери энергии на единицу длины δ_β . Расчет показал, что для Al при энергиях 0.1÷15 keV относительные ошибки в определении средних потерь энергии на единицу длины $\delta_\beta < 0.015$; при энергиях 15÷30 keV $\delta_\beta < 0.025$. Для Au $\delta_\beta < 0.015$ при энергиях 0.1÷30 keV. Для Ge $\delta_\beta < 0.02$ при энергиях 0.1÷15 keV; $\delta_\beta < 0.04$ при энергиях 15÷30 keV. Значения дифференциальных сечений рассеяния, рассчитанные по формуле (8.32) для ряда материалов, а также таблицы параметров аппроксимирующей функции для зависимости $Q(E, R)$ находятся на сайте <http://www.ioffe.rssi.ru/ES>.

В заключение отметим, что в последние годы для расчета дифференциального сечения неупругого рассеяния в области энергий ниже 100эВ рядом авторов используются и другие способы аппроксимации функции потерь $\text{Im}\left\{\frac{-1}{\varepsilon(q, \omega)}\right\}$. Так, в работе Динга [166] вместо описанной выше SPA аппроксимации (single-pole approximation) используется полный алгоритм Пенна (Full Penn Algorithm [167]), в котором

$$\text{Im}\left\{\frac{-1}{\varepsilon(q, \omega)}\right\} = \int_0^\infty \text{Im}\left\{\frac{-1}{\varepsilon_L(q, \omega; \omega_p)}\right\} g(\omega_p) d\omega_p \quad (8.59)$$

где $g(\omega) = (2/\pi\omega)\text{Im}\{-1/\varepsilon(\omega)\}$, $\varepsilon_L(q, \omega; \omega_p)$ - Линдхардовская диэлектрическая функция свободно-электронного газа в длинноволновом пределе. Динг приводит сравнение средних потерь и IMFP для Al и Cu, рассчитанных разными авторами с использованием нескольких вариантов диэлектрического подхода, а также сравнивает их с имеющимися экспериментальными данными. Все варианты диэлектрического подхода неплохо согласуются между собой и с экспериментом для энергий выше 100эВ. Полный алгоритм Пена использовался и группой авторов из NIST, которые провели систематические расчеты неупругого среднего свободного пробега (IMFP) и средних потерь. На основе этих расчетов ими была предложена эмпирическая аналитическая формула для IMFP [168, 169] и создана база данных [170].

8.3 Метод Монте-Карло

Принципы

Метод Монте-Карло впервые был использован фон Нейманом и Уламом в 1945 году как математический способ решения детерминированных задач с использованием случайных чисел. С тех пор этот метод находит широкое применение практически во всех областях физики для исследования как детерминированных, так и стохастических задач. Развитое на его основе компьютерное моделирование позволяет оценивать такие физические величины, которые трудно найти другими способами. К числу таких величин относится и функция распределения электронов.

Экспериментально измеренный результат взаимодействия электронного пучка с образцом требует последующей теоретической обработки для получения диагностической информации. Метод Монте-Карло является мощным инструментом, который обеспечивает физическое понимание не только результатов, но и деталей процесса взаимодействия. В отличие от аналитических методов решения уравнения Больцмана, в рамках этого метода можно легко учесть реальные законы взаимодействия электронов с веществом и произвольные граничные условия.

Моделирование электронного транспорта базируется на стохастическом описании процесса рассеяния. Распространение электрона в веществе описывается классической зигзагообразной траекторией. В точках, где электрон испытывает рассеяние, направление его движения и энергия меняются. Конкретные значения угла рассеяния и потери энергии в индивидуальном акте рассеяния определяются с помощью случайных чисел. Для получения некоторой физической величины, связанной с распределением электронов, необходимо просуммировать вклады в эту величину от каждой траектории. Для подавления статистической погрешности в получаемых результатах необходимо рассмотреть достаточно большое количество электронных траекторий.

При моделировании траектории электрона будем предполагать, что образец является аморфным и атомы (рассеивающие центры) случайно распределены по его объему. Дифракционные эффекты, таким образом, исключаются из рассмотрения. Отметим, что идеальный аморфный образец отличается от реального еще и тем, что в нем отсутствует и ближний порядок. Такая аппроксимация справедлива, например, в тех ситуациях, когда объем вещества, в котором распространяется электрон, много больше размера зерна поликристаллического образца, поскольку дифракционные эффекты смазываются эффектами многократного рассеяния.

Отметим, что, вообще говоря, использование концепции траектории противоречит квантовому характеру электрона. Состояние электрона характеризуется импульсом, и принцип неопределенности запрещает одновременное определение импульса и положения. В

этой ситуации необходимо выполнить моделирование в импульсном пространстве, а затем перейти в реальное пространство через волновую функцию, $\Psi_{\vec{k}}(\vec{r})$. В действительности, именно импульсное пространство является базовым для моделирования по методу Монте-Карло в такой области, как исследование транспорта горячих электронов в полупроводниках [171]. Однако, при моделировании транспорта электронов в электронной микроскопии и спектроскопии рассматривают электроны с энергией порядка 10 keV, так что длина волны составляет $0.12 \text{ \AA}$, что много меньше постоянной решетки. Поэтому описание электрона как частицы работает очень хорошо. В настоящей работе мы будем использовать это описание и в области меньших энергий до значений порядка 10 eV, где длина волны электрона составляет $3.9 \text{ \AA}$ и сравнима с постоянной решетки.

Модели

В настоящее время существует огромная литература по использованию метода Монте-Карло для моделирования транспорта электронов средних энергий в твердых телах. Все модели, используемые различными авторами, могут быть разбиты на три группы. В наиболее простой группе моделей результаты упругого взаимодействия электрона с атомом рассчитываются с помощью дифференциального сечения, а перераспределение по энергии учитывается в приближении непрерывного замедления. В рамках этого приближения потеря энергии электрона однозначно связана с длиной пути s пройденного электроном между столкновениями

$$\Delta E = s \left(- \frac{dE}{ds} \right). \quad (8.60)$$

Дифференциальное сечение упругого рассеяния рассчитывается как по формуле Резерфорда, так и по формуле Мотта. Такие модели были развиты еще в 60-70 годы [172–175], и применяются до настоящего времени. Получаемые с их помощью функции распределения электронов не учитывают стохастического разброса электронов по энергии в результате неупругого рассеяния, что приводит к значительным ошибкам в энергетическом распределении. Этот недостаток до некоторой степени учтен в моделях второй группы. Ее составляют так называемые “гибридные” модели, в которых столкновения с большой потерей энергии (катастрофические столкновения) моделируются точно, а малые потери учитываются в рамках приближения непрерывного замедления. Такая модель была предложена в [176] и использована рядом авторов [177–182]. При этом потеря энергии между столкновениями рассчитывается по формуле

$$\Delta E = s \left(-\frac{dE}{ds} \right)_{small} = s \left(\left(-\frac{dE}{ds} \right) - \left(-\frac{dE}{ds} \right)_{col} \right), \quad (8.61)$$

где

$$\left(-\frac{dE}{ds} \right)_{col} = \int_{E_c}^E Q \frac{d\sigma_{col}(E, Q)}{dQ} dQ \quad (8.62)$$

- потери энергии при катастрофических столкновениях. В качестве сечения катастрофических столкновений использовалось дифференциальное сечение свободно-свободного электронного взаимодействия (8.8) (или его аналог, учитывающий неразличимость электронов). Иногда в такой модели неупругие столкновения разбиваются на столкновения, приводящие к ионизации внутренних оболочек, и столкновения с «валентными» электронами. К группе «валентных» электронов относятся все электроны, не находящиеся на глубоких уровнях. В качестве дифференциальных сечений ионизации внутренних оболочек используется сечение Гризинского (1.23) [66].

Использование моделей второй группы повышает точность моделирования, но не дает возможности продвинуться в область малых энергий, поскольку в этой области существенным оказывается детальный вид дифференциального сечения неупругого рассеяния.

К недостаткам моделей первой и второй групп относится и тот факт, что в их рамках невозможно описать генерацию каскада вторичных электронов. Использование приближения непрерывного замедления исключает возможность учета появления вторичного электрона в результате ионизации атома.

Отметим, что для оценки тормозной способности $\frac{dE}{ds}$ в (8.60), (8.61) обычно используется формула Бете (5.26). Однако при энергиях меньших потенциала ионизации глубоких оболочек эта формула перестает быть справедливой, а при $E < J/1.166$ логарифм в (5.26) вообще становится отрицательным. Для исправления этой ситуации в работе [183] была предложена эмпирическая экстраполяция тормозной способности в области энергий $E < 6.338J$

$$\left(-\frac{dE}{ds} \right) = \frac{2\pi e^4}{1.259\sqrt{E}\sqrt{J}}. \quad (8.63)$$

Это выражение было использовано в работах [184, 185] для расчета вторичной эмиссии. Несмотря на то, что такая экстраполяция позволила получить разумный результат, формула (8.63) не обоснована физически и расходится при $E \rightarrow 0$. Такое поведение противоречит поведению тормозной способности, рассчитанной с помощью диэлектрического подхода. Расчеты на основании формулы (8.32) показывают, что с уменьшением энергии тормозная

способность достигает максимума (при энергии порядка нескольких сотен eV) и стремится к нулю при $E \rightarrow 0$. Поэтому использование (8.63) в области малых энергий необоснованно.

Неплохая оценка тормозной способности для малых энергий предложена в работе [186]. Если нет необходимости учитывать вторичные электроны, генерированные при ионизации внешних оболочек, то для потери энергии между столкновениями можно использовать формулу (8.61) с $\frac{dE}{ds}$ вычисленной в [186]. В работе [90] также предложена формула для тормозной способности, которая асимптотически совпадает с формулой Бете при больших энергиях и может быть использована в области малых энергий.

Наконец, третья группа моделей состоит из алгоритмов, в которых как упругие, так и неупругие взаимодействия рассчитываются с помощью дифференциальных сечений рассеяния. Модели этой группы позволяют проследивать траекторию электрона во всей области энергий, учитывать генерацию вторичных электронов и адекватно описывать перераспределение электронов по энергии в результате неупругого рассеяния. При этом обычно используется дифференциальное сечение неупругого рассеяния, полученное на основе диэлектрического подхода. Приведенное нами в параграфе 8.2 выражение (8.32) не имеет подгоночных параметров, и возбуждение валентных электронов и электронов внутренних оболочек учитываются точно (в соответствии с силой осциллятора или функцией энергетических потерь). Дважды дифференциальное неупругое сечение рассеяния позволяет рассчитать не только потерю энергии, но и изменение угла в неупругом столкновении. Единственным недостатком моделей этой группы является то, что хранение таблиц дифференциального сечения неупругого рассеяния требует большой памяти.

Процедуры

Алгоритмы, реализующие расчеты по методу Монте-Карло, широко известны и не нуждаются в детальном описании. В этом пункте мы отметим лишь основные этапы расчета траектории электрона в мишени. Найденная в процессе моделирования траектория электрона используется в дальнейшем для определения ее вклада в исследуемый сигнал.

Для реализации расчета траектории в методе Монте-Карло используются случайные числа с различным распределением. Такие случайные числа могут быть получены из равномерно распределенных в интервале (0, 1) случайных чисел (см., например, [18]). Если ξ - равномерно распределенное в (0, 1) случайное число, $p(x)$ - функция, такая, что

$$\int_a^b p(\tau) d\tau = 1, \quad F(x) = \int_a^x p(\tau) d\tau, \text{ то числа}$$

$$\eta = F^{-1}(\xi) \tag{8.64}$$

будут распределены в (a, b) с плотностью $p(x)$.

Распределение длины свободного пробега электрона в однородной среде имеет вид

$$P(s) = \frac{1}{l_t} \exp(-s/l_t), \quad (8.65)$$

где l_t - полный средний свободный пробег, связанный с упругим, l_{el} , и неупругим, l_{in} , свободными пробегами соотношением

$$l_t^{-1} = l_{el}^{-1} + l_{in}^{-1} \quad (8.66)$$

Длина свободного пробега по упругим столкновениям для материала, состоящего из чистого элемента, определяется формулой

$$l_{el} = \frac{1}{N \Sigma_{el}} = 1 / \left(\frac{N_A \rho}{A} \Sigma_{el} \right), \quad (8.67)$$

где N - концентрация атомов, N_A - число Авогадро, ρ - плотность материала, A - атомный вес. Для материалов, состоящих из нескольких компонент, таких как соединения или сплавы, средний свободный пробег по упругим столкновениям определяется по формуле

$$\frac{1}{l_{el}} = \sum_i \frac{C_i}{l_{el}^i}, \quad (8.68)$$

где C_i - атомная концентрация i -ой компоненты. Что касается длины свободного пробега по неупругим столкновениям, то при вычислении ее для соединения с использованием диэлектрического подхода, вообще говоря, необходимо использовать диэлектрическую функцию именно этого соединения. На практике это трудно реализовать из-за недостатка экспериментальных оптических данных для соединений. Поэтому для образца, состоящего из нескольких элементов, для которых имеются оптические данные, используются диэлектрические функции для каждого элемента и длина свободного пробега аппроксимируется формулой

$$\frac{1}{l_{in}} = \sum_i \frac{C_i}{l_{in}^i}, \quad (8.69)$$

Пользуясь формулой (8.64) найдем, что длина пробега между двумя столкновениями имеет вид

$$s = -l_t \ln(1 - R) = -l_t \ln R_1, \quad (8.70)$$

где R , а, следовательно, и $R_1 = 1 - R$ - равномерно распределенное в интервале $(0,1)$ случайное число. Следующее случайное число, R_2 , определяет тип столкновения:

$$\begin{aligned} \text{если } R_2 < l_{el}^{-1} / l_t^{-1} & \quad - \text{столкновение упругое} \\ \text{если } l_{el}^{-1} / l_t^{-1} \leq R_2 \leq 1 & \quad - \text{столкновение неупругое} \end{aligned} \quad (8.71)$$

Тип атома, с которым произошло столкновение, определяется случайным числом R_3 . Для упругого рассеяния столкновение произошло с атомом i -ого элемента, если

$$\frac{\sum_{j=1}^{i-1} C_j / l_{el}^j}{1/l_{el}} < R_3 < \frac{\sum_{j=1}^i C_j / l_{el}^j}{1/l_{el}} \quad (8.72)$$

Аналогичное соотношение справедливо для неупругого взаимодействия в том случае, когда для его описания используется формула (8.69). При этом l_{el} заменяется на l_{in} , l_{el} - на l_{in}^j . Смысл такого соотношения при использовании диэлектрического формализма для образца типа соединения заключается не в том, что рассеяние произошло на атоме i -ого элемента, а в том, что в результате неупругого рассеяния дали вклад электроны, относящиеся к i -ому компоненту. Однако, если неупругое рассеяние рассчитывается в рамках другого подхода, например, используется дифференциальное сечение ионизации внутренних оболочек, то с помощью соотношения типа (8.72) определяется тип атома и тип оболочки.

Если произошло упругое рассеяние, то на следующем шаге определяется угол рассеяния. Поскольку распределение угла рассеяния θ задается дифференциальным сечением рассеяния, то для его нахождения, согласно формуле (8.64), необходимо решать трансцендентное уравнение

$$R_4 = \int_0^\theta \frac{d\sigma_{el}}{d\Omega} \sin \theta d\theta \left/ \int_0^\pi \frac{d\sigma_{el}}{d\Omega} \sin \theta d\theta \right. \quad (8.73)$$

Следующее случайное число определит азимутальный угол φ :

$$\varphi = 2\pi R_5 \quad (8.74)$$

В случае неупругого рассеяния вычисляются потери энергии из соотношения

$$R_6 = \int_{E_{\min}}^Q \frac{d\sigma_{in}(E, Q')}{dQ'} dQ' \left/ \int_{E_{\min}}^{E_{\max}} \frac{d\sigma_{in}(E, Q')}{dQ'} dQ' \right. \quad (8.75)$$

где $\frac{d\sigma_{in}(E, Q)}{dQ} = \int_{4\pi} \frac{d^2\sigma_{in}}{d\Omega dQ} d\Omega$. Величины $E_{\min}$, $E_{\max}$ определяются используемой моделью.

При использовании диэлектрического формализма $E_{\min} = 0$, $E_{\max} = E - E_F$, где E_F - энергия Ферми. В модели катастрофических столкновений величина $E_{\min}$ определяется энергией обрезки, $E_{\max} = E$. В том случае, когда в модели второй группы используются сечения ионизации внутренних оболочек, величина $E_{\min}$ есть порог ионизации оболочки, $E_{\max} = E$.

В рамках моделей второй группы угловое отклонение в процессе неупругого рассеяния связывается с потерей энергии соотношением

$$\sin \theta = \sqrt{\frac{\Delta E}{E}}, \quad (8.76)$$

которое следует из законов сохранения энергии и импульса. Если неупругий процесс описывается с помощью дважды дифференциального сечения рассеяния, то угол рассеяния находится из уравнения

$$R_7 = \int_0^\theta \frac{d^2 \sigma_{in}}{d\Omega dQ} \sin \theta d\theta \bigg/ \int_0^\pi \frac{d^2 \sigma_{in}}{d\Omega dQ} \sin \theta d\theta. \quad (8.77)$$

Здесь потери энергии фиксированы и равны значению, найденному на предыдущем шаге. Азимутальный угол рассчитывается по аналогии с (8.74).

Если в модели учитывается генерация вторичных электронов, то предполагается, что потери энергии в акте неупругого рассеяния передаются электрону оболочки или электрону, находящемуся ниже уровня Ферми. Следовательно, каждое неупругое рассеяние приводит к появлению двух электронов, один из которых имеет энергию $E_1 = E - \Delta E$, а другой - E_2 . В модели катастрофических столкновений $E_2 = \Delta E$. В том случае, когда используется модель второй группы с дифференциальным сечением ионизации внутренних оболочек, величина E_2 есть $E_2 = \Delta E - E_B$, где E_B - энергия связи оболочки. Если неупругое взаимодействие рассчитывается с помощью диэлектрического подхода, то $E_2 = \Delta E + E_F$. Начальное положение генерированного вторичного электрона совпадает с точкой неупругого взаимодействия. Направление движения вторичного электрона определяется или из закона сохранения импульса, или из предположения, что вторичные электроны генерируются изотропно. В первом случае полярный θ' и азимутальный φ' углы вторичного электрона находятся из соотношений

$$\sin \theta' = \cos \theta = \sqrt{\frac{E - \Delta E}{E}}, \quad \varphi' = \pi + \varphi. \quad (8.78)$$

При изотропной генерации имеем

$$\sin \theta' = 1 - 2R_8, \quad \varphi' = 2\pi R_9. \quad (8.79)$$

После розыгрыша всех результатов столкновения определяются новые параметры электрона (положение, направление движения, энергия) и вся процедура повторяется. Параметры всех вторичных электронов, рожденных на траектории первичного электрона, запоминаются. Путь первичного электрона прослеживается либо до выхода электрона из образца, либо до достижения им некоторой фиксированной энергии обрезки E_c . После этого прослеживаются траектории всех вторичных электронов, рожденных первичным электроном. В процессе их распространения могут, в свою очередь, генерироваться

вторичные электроны. Расчет траектории заканчивается после обработки всех рожденных вторичных электронов.

Поверхностный потенциальный барьер влияет на энергию электронов, проходящих через поверхность. Энергия электронов внутри образца отсчитывается от дна зоны проводимости, а в вакууме – от вакуумного уровня. Поэтому энергия первичного падающего электрона в образце принимается равной

$$E = E_p + U, \quad (8.80)$$

где E_p - начальная энергия, отсчитываемая от вакуумного уровня, E - энергия, отсчитываемая от дна зоны проводимости, а потенциал U представляет собой сумму энергии Ферми и работы выхода

$$U = E_F + \Phi. \quad (8.81)$$

Аналогичным образом пересчитывается энергия электронов, выходящих из образца. Если внутри образца их энергия, отсчитываемая от дна зоны проводимости, есть E , то при переходе в вакуум их энергия, отсчитываемая от вакуумного уровня, будет

$$E' = E - U \quad (8.82)$$

Электроны, выходящие из образца, претерпевают преломление на поверхностном потенциальном барьере. Изменение угла при этом рассчитывается из соотношения

$$\sqrt{E'} \sin \theta' = \sqrt{E} \sin \theta, \quad (8.83)$$

где θ' - угол между нормалью к поверхности и направлением движения электрона в вакууме.

Электроны, подходящие к поверхности изнутри образца под углами, большими

$\theta^* = \arcsin\left(\sqrt{\frac{E-U}{E}}\right)$, не выходят из образца.

При моделировании предполагается, что падающий на поверхность образца электрон испытывает первое рассеяние в толще материала, проходя поверхность без рассеяния. Если электроны распространяются в матрице, содержащей включения других материалов, то необходимо модифицировать расчет длины свободного пробега при пересечении траектории электрона и границы. Дело в том, что в разных материалах длины свободного пробега различны, и длина пробега, рассчитываемая между точками, находящимися по разные стороны границы, должна учитывать этот факт. Для корректного расчета длины свободного пробега заметим, что электрон, испущенный в точке $\vec{r}$ и распространяющийся в направлении $\vec{\Omega}$, будет поглощен на интервале $[s, s + ds]$ с вероятностью

$$P = \frac{1}{l_t(E, \vec{r} + s\vec{\Omega})} \exp\left(-\int_0^s \frac{ds'}{l_t(E, \vec{r} + s'\vec{\Omega})}\right) ds, \quad (8.84)$$

где $l_t(E, \vec{r} + s\vec{\Omega})$ - полный средний свободный пробег, зависящий от энергии электрона и точки образца. Пусть $\{l^{(k)}\}_{k=1}^N$ - отрезки, на которые границы различных областей рассекают луч, проведенный из точки испускания в направлении движения электрона, а $\{l_t^{(k)}\}_{k=1}^N$ - соответствующие этим областям полные средние свободные пробеги. Тогда, в соответствии с формулой (8.64), длина пробега между столкновениями будет

$$s = \sum_{k=1}^m l^{(k)} - l_t^{(m+1)} \left[\sum_{k=1}^m \frac{l^{(k)}}{l_t^{(k)}} + \ln R \right] \quad (8.85)$$

Здесь m - это максимальное значение индекса k , для которого $\sum_{i=1}^k \frac{l^{(i)}}{l_t^{(i)}} < -\ln R$. Подобная коррекция длины свободного пробега учитывалась в работе [187].

На основе описанных моделей в ходе исследований были разработаны программные пакеты, имеющие различное назначение. Первый пакет предназначен для моделирования взаимодействия электронного пучка с мишенью и позволяет получать различные характеристики, связанные с дифференциальной плотностью потока электронов (коэффициент обратного рассеяния, энергетический и угловой спектр обратнорассеянных электронов, распределение потерянной энергии в образце и т.д.). Второй пакет предназначен для расчета функции выхода электронов, рожденных в глубине образца. Третий пакет моделирует процесс электронной фотоэмиссии, возникающий при облучении образца рентгеновским излучением. Все пакеты сконструированы по модульному принципу, что позволяет легко модифицировать программу и проводить расчеты по моделям различных групп, использовать различные способы описания дифференциальных сечений, средней потерянной энергии, учитывать различные процессы в процессе переноса электронов. Выполнение моделирования разбито на два этапа. На первом этапе в диалоговом режиме пользователь определяет тип модели, вид различных физических величин, используемых для расчета, и тип получаемого результата. Так, например, для первого пакета можно выбрать:

1. Используемую формулу дифференциального сечения упругого рассеяния
 - Экранированное сечение Резерфорда
 - Сечение Мотта
2. Модель для описания неупругого взаимодействия электрона с веществом
 - Приближение непрерывного замедления
 - Модель катастрофических столкновений
 - Модель однократного неупругого рассеяния

3 Формулу для тормозной способности и выражение для среднего потенциала ионизации (если в предыдущем пункте выбрана модель 1 или 2)

- Формула Бете для тормозной способности
- Формула Бете с переходом на формулу Рао-Сахиба-Виттри
- Формула Танга для тормозной способности

4 Генерация вторичных электронов

- Учитывается
- Не учитывается

5 Угловое распределение генерированных вторичных электронов

- Изотропное
- Рассчитывается по закону сохранения импульса

6 Дифференциальное сечение неупругого рассеяния в модели однократного рассеяния

- Модельное
- Рассчитанное на базе диэлектрического подхода

7 Угловое перераспределение в неупругом рассеянии

- Не учитывается
- Рассчитывается по законам сохранения энергии и импульса
- Рассчитывается в соответствии с двойным дифференциальным сечением неупругого

рассеяния

8 Тип образца

- Многослойный полубесконечный образец со слоями, параллельными поверхности
- Многослойная пленка со слоями, параллельными граничным поверхностям
- Полубесконечный образец с прямоугольными включениями

9 Тип получаемого результата

- Коэффициент обратного рассеяния
- Энергетический спектр обратно рассеянных электронов
- Угловой спектр обратнорассеянных электронов
- Распределение источников рентгеновского излучения по глубине
- Коэффициент прошедших через пленку электронов
- Энергетический спектр обратно прямо прошедших электронов

Естественно, что в диалоге задаются не все эти вопросы, а только те, которые возможны при данных ранее ответах. В результате после окончания диалога формируется программа для моделирования с заданными пользователем свойствами.

На втором этапе происходит собственно запуск программы, в начале которого пользователь вводит начальные данные либо с помощью диалога, либо заранее

подготавливая стартовый файл. В процессе расчета программа периодически записывает полученные результаты в специальный (рестартовый) файл, что позволяет прервать программу в процессе выполнения и затем продолжить счет без потери ранее рассчитанных результатов. Результаты работы заносятся в выходные файлы, один из которых содержит всю информацию об использованной модели и начальных данных, а другой - результаты расчета в виде файла, пригодного для использования в программах для построения графиков.

Разработанные пакеты могут использоваться как на персональных компьютерах, так и на кластерах (при расчете большого количества траекторий).

8.4 Сравнение с известными результатами

В настоящем параграфе приводится сравнение результатов, полученных с помощью разработанных пакетов, с некоторыми экспериментальными результатами и результатами других авторов. Прежде всего, было проведено сравнение зависимости коэффициента обратного рассеяния от энергии электронного пучка с экспериментальными данными. Результаты расчета для мишеней из Al, Cu, Au вместе с экспериментальными данными, полученными разными авторами и собранными в базу данных по взаимодействию электронов с веществом (D.Joy, <http://web.utk.edu/~srcutk>, 2001) приведены на рисунках 8.8, 8.9, 8.10. Как видно из этих рисунков, при $E > 10 \text{ keV}$ рассчитанные зависимости находятся в хорошем согласии с измеренными значениями. При меньших значениях энергии разброс экспериментальных данных очень велик (порядка 50%), и определить истинное значение коэффициента обратного рассеяния затруднительно. Однако и в этом диапазоне поведение рассчитанных зависимостей соответствует результатам измерений.

Одним из важных критериев качества моделирования процесса обратного рассеяния является соответствие рассчитанного и экспериментально измеренного энергетического спектра обратнорассеянных электронов. Моделирование энергетического спектра было проведено для полубесконечных мишеней из Al, Cu и Au. Энергия первичного пучка выбиралась равной 10 keV. Результаты моделирования энергетического спектра электронов, вышедших с поверхности образца в полусферу, представлены на рисунках 8.11, 8.12, 8.13. Там же приведены экспериментальные результаты Дарлингтона [188]. Видно, что рассчитанные спектры неплохо согласуются с измеренными. Необходимо отметить, что каскад вторичных электронов, учтенный при моделировании, приводит к появлению пика в области малых энергий. На рассчитанных спектрах можно также увидеть так называемый упругий пик в окрестности начальной энергии электронов.

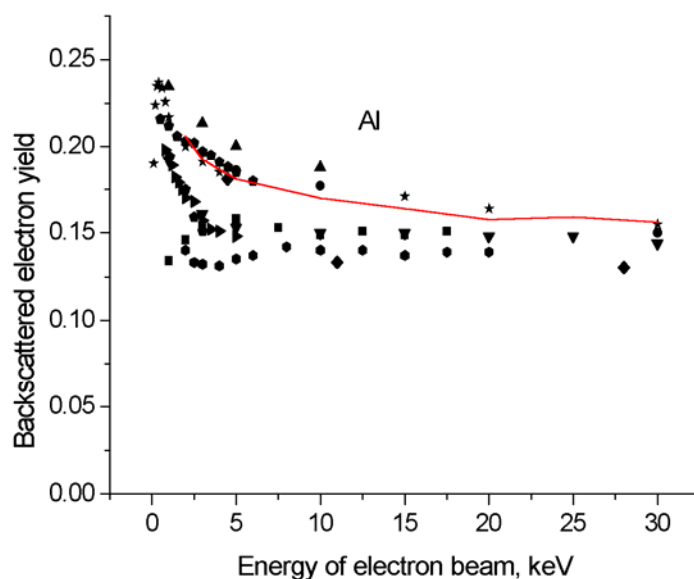


Рисунок 8.8 Сравнение результатов численного моделирования коэффициента обратного рассеяния для Al по методу Монте Карло в модели однократного рассеяния с экспериментальными результатами, представленными в базе данных <http://web.utk.edu/~srcutk> (D.Joy, 2001)

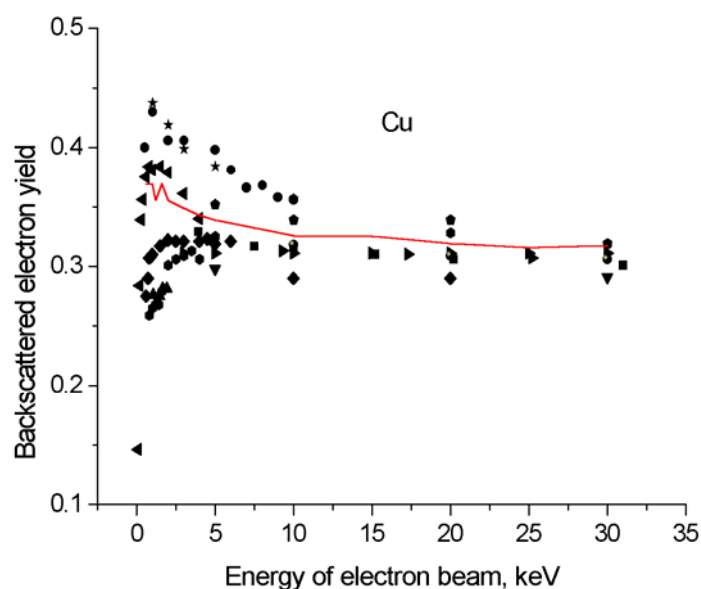


Рисунок 8.9 Сравнение результатов численного моделирования коэффициента обратного рассеяния для Cu по методу Монте Карло в модели однократного рассеяния с экспериментальными результатами, представленными в базе данных <http://web.utk.edu/~srcutk> (D.Joy, 2001)

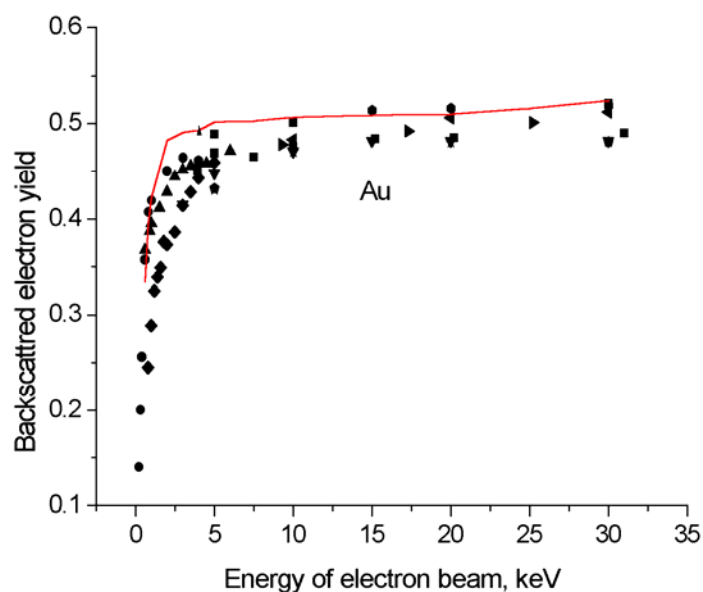


Рисунок 8.10 Сравнение результатов численного моделирования коэффициента обратного рассеяния для Au по методу Монте Карло в модели однократного рассеяния с экспериментальными результатами, представленными в базе данных <http://web.utk.edu/~srcutk> (D.Joy, 2001)

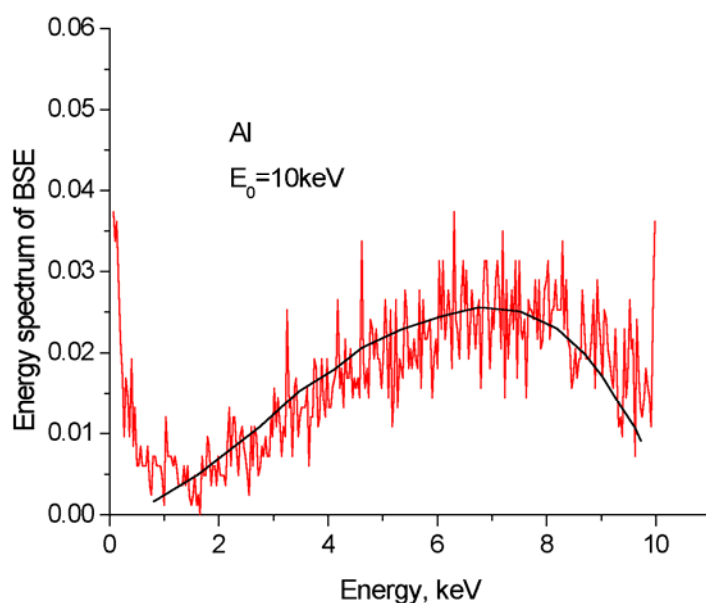


Рисунок 8.11 Сравнение результатов численного моделирования энергетического спектра обратнорассеянных электронов по методу Монте Карло в модели однократного рассеяния для Al с экспериментальными результатами Дарлингтона [188]

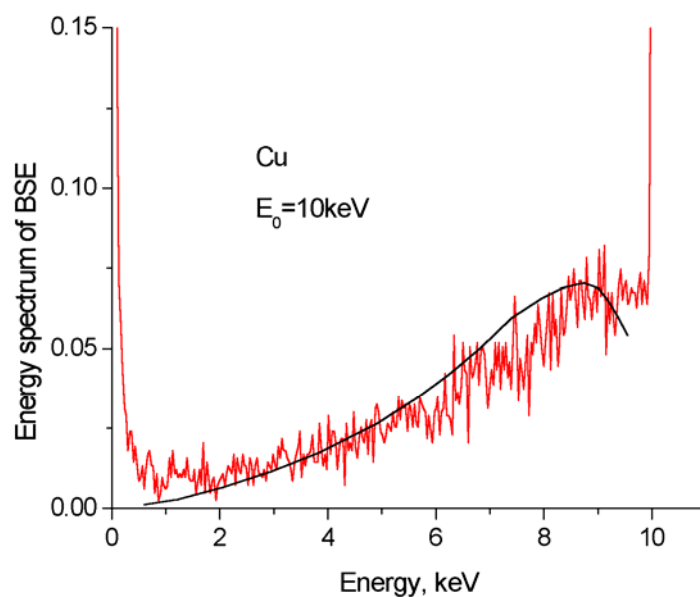


Рисунок 8.12 Сравнение результатов численного моделирования энергетического спектра обратнорассеянных электронов по методу Монте Карло в модели однократного рассеяния для Cu с экспериментальными результатами Дарлингтона [188]

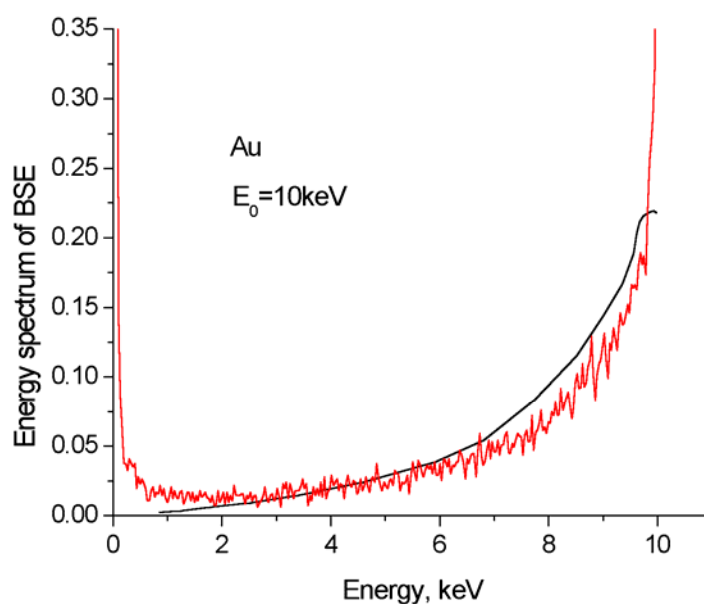


Рисунок 8.13 Сравнение результатов численного моделирования энергетического спектра обратнорассеянных электронов по методу Монте Карло в модели однократного рассеяния для Au с экспериментальными результатами Дарлингтона [188]

Использование модели однократного рассеяния позволяет получить тонкую структуру энергетического спектра обратнорассеянных электронов. Начальный участок такого спектра от алюминиевого образца, облучаемого электронным пучком с энергией 3keV, был

про моделирован при помощи разработанного пакета. При моделировании были рассчитаны 9000000 траекторий. Полученный результат был свернут с гауссовским распределением с шириной 3eV для учета конечного энергетического разрешения. Рассчитанный спектр вместе с экспериментальными данными [189] приведен на рисунке 8.14. Малые пики в экспериментальных кривых связаны с поверхностными плазмонами и не воспроизводятся в рассчитанной кривой.

Другой важной характеристикой процесса обратного рассеяния является плотность поверхностного распределения точек эмиссии электронов. Радиальное распределение точек выхода обратнорассеянных электронов изучалось в работе [190]. В использованной ими модели упругое рассеяние описывалось с помощью дифференциального сечения рассеяния Мотта. Для описания процесса неупругого рассеяния использовалась модель катастрофических столкновений. Ионизация внутренних электронных оболочек описывалась с помощью дифференциального сечения Вриенса, а внешних – с помощью сечения Моллера. Оставшаяся часть энергетических потерь учитывалась в рамках модели непрерывного

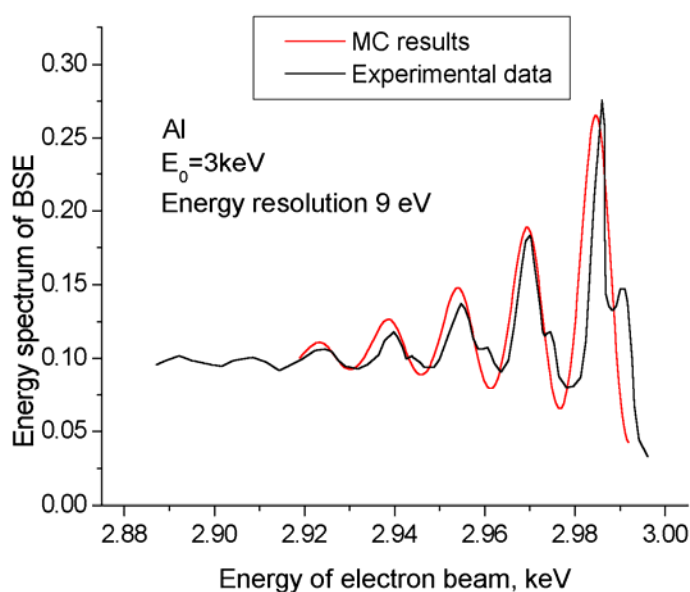


Рисунок 8.14 Начальный участок энергетического спектра обратнорассеянных электронов для Al. Энергия электронного пучка 3keV.

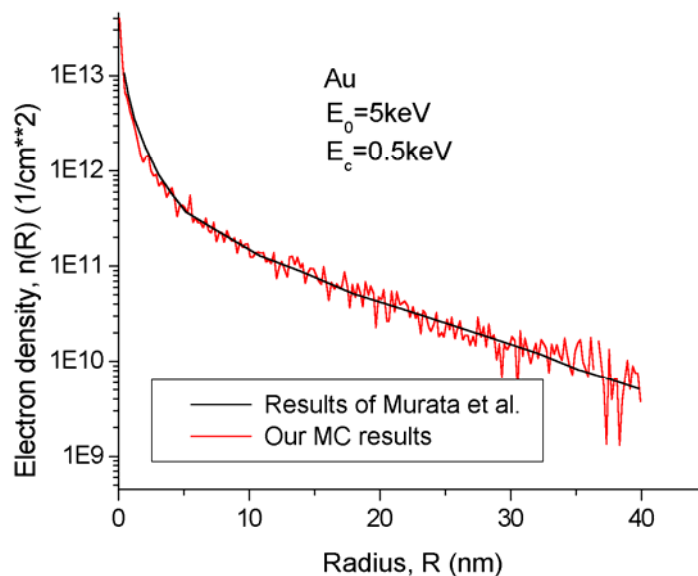


Рисунок 8.15 Радиальное распределение точек эмиссии обратнорассеянных электронов для Au. Начальная энергия электронного пучка $E_0 = 5 \text{ keV}$, энергия обрезки $E_c = 0.5 \text{ keV}$.

замедления. Радиальное распределение точек эмиссии обратнорассеянных электронов было рассчитано для Au мишени при начальных энергиях пучка в диапазоне 5-20keV. Рисунки 8.15 и 8.16 демонстрируют полное совпадение этих распределений с результатами наших расчетов.

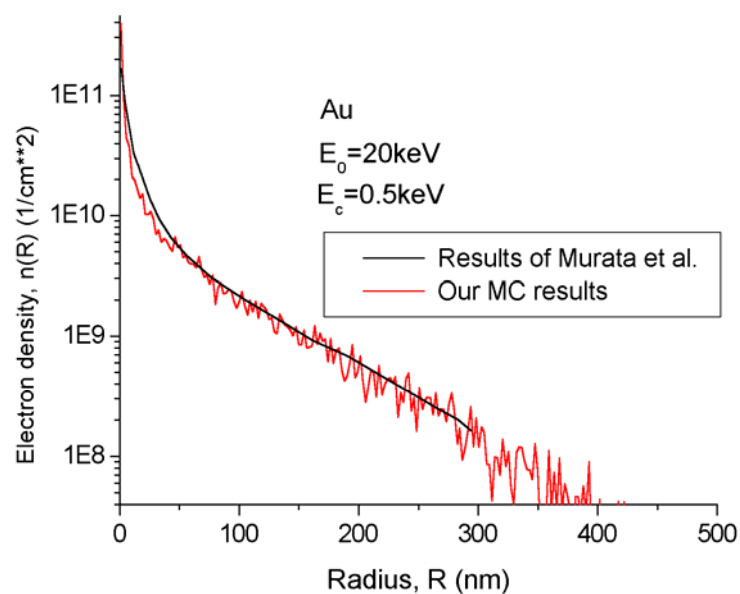


Рисунок 8.16 Радиальное распределение точек эмиссии обратнорассеянных электронов для Au. Начальная энергия электронного пучка $E_0 = 20 \text{ keV}$, энергия обрезки $E_c = 0.5 \text{ keV}$.

Таким образом, реализованный подход к моделированию транспорта электронов по методу Монте-Карло позволяет адекватно описывать существенные характеристики этого процесса и может быть использован для исследования электронного распределения в твердотельных мишенях.

Глава 9.

Приложение разработанных методов к решению прикладных задач, связанных с транспортом электронов средних энергий

Разработанные в предыдущих главах аналитический и численный подходы к решению кинетического уравнения Больцмана представляют собой эффективный инструмент решения самых разнообразных проблем, связанных с транспортом электронов. В настоящей главе его применение иллюстрируется решением целого ряда прикладных задач.

9.1 Расчет функции выхода электронов средних энергий из однородных образцов и образцов типа «слой на подложке»

Развитие методов диагностики, позволяющих определять параметры исследуемых объектов с высоким разрешением, приобретает особую важность в связи с созданием и использованием структур со сверхмалыми размерами активных областей. В настоящее время существует широкий ряд методов диагностики материалов, использующих рентгеновское излучение или электронные или ионные пучки для получения различной информации об

исследуемых объектах. Методы, основанные на явлении электронной эмиссии, занимают в этом ряду особое место, поскольку, являясь неразрушающими, позволяют получать информацию о приповерхностных слоях сверхмалых размеров вследствие малой эффективной глубины выхода эмитируемых электронов.

Несмотря на широкое практическое использование методов диагностики, основанных на явлении электронной эмиссии, они во многом являются полуэмпирическими. В связи с этим создание количественных методик получения информации о материале требует развития адекватных теоретических подходов к описанию базового явления – электронной эмиссии. Для описания электронной эмиссии может быть использована трехступенчатая модель. Согласно этой модели процесс индуцированной рентгеновским излучением электронной эмиссии может быть подразделен на три стадии: поглощение рентгеновского фотона веществом; генерация первичных электронов, т.е. фотоэлектронов и электронов, родившихся в ходе релаксации фотоионизованного атома; распространение первичных электронов в веществе с генерацией каскада вторичных электронов и выход рожденных электронов из образца. Последняя стадия характеризуется функцией выхода $q(E_0, z_0)$. Эта функция представляет собой вероятность выхода из образца электрона, родившегося на расстоянии z_0 от поверхности с энергией E_0 .

Изучению функции выхода для фото- и Оже-электронов посвящено большое количество работ. В этих работах исследовалась, в частности, вероятность выхода электронов из образца с глубины z_0 без потерь энергии с фиксированным направлением эмиссии. Если пренебречь упругим рассеянием электронов в образце, то, очевидно, вероятность достижения электроном поверхности образца без неупругого рассеяния имеет вид (см., например, [191])

$$q^{nel}(z_0, \alpha) = \exp\left(-\frac{z_0}{l_{in} \cos \alpha}\right). \quad (9.1)$$

Здесь α - угол между направлением эмиссии и нормалью к поверхности, а индекс “nel” означает, что упругое рассеяние не учитывается. Как показано в работах [192–194], упругое рассеяние может значительно влиять на форму $q(z_0, \alpha)$. В работе [195] было получено аналитическое выражение для $q^{el}(z_0, \alpha)$ с учетом упругого рассеяния из решения односкоростного уравнения Больцмана в транспортном приближении для изотропного источника. В этом приближении дифференциальное сечение упругого рассеяния предполагается изотропным. Выражение для $q^{el}(z_0, \alpha)$ в случае анизотропного источника с угловым распределением, пропорциональным дифференциальному сечению фотоионизации, т.е. пропорциональным выражению

$$\frac{1}{4\pi} \left\{ 1 - \frac{\beta}{4} [3(\cos \theta_0)^2 - 1] \right\}, \quad (9.2)$$

где $\cos \theta_0$ - угол между направлением фотона и вылетевшего электрона, найдено в [191]. В работах [191, 195] проводился расчет функций $q^{el}(z_0, \alpha)$ по методу Монте-Карло с использованием Моттовского дифференциального сечения рассеяния. Было показано, что рассчитанные зависимости хорошо согласуются с аналитическими результатами, несмотря на значительное отличие формы дифференциального сечения упругого рассеяния, использованного в транспортном приближении уравнения Больцмана, от дифференциального сечения Мотта.

В работе [196] рассчитаны функции выхода электронов, $q_{nb,ns}^{nel}(z_0, \alpha)$, испытавших nb неупругих столкновений в объеме образца и ns неупругих столкновений на поверхности. Показано, что зависимость $q_{nb,ns}^{nel}(z_0, \alpha)$ от глубины может значительно отличаться от зависимости $q_{0,0}^{nel}(z_0, \alpha)$.

Полученные в вышеперечисленных работах результаты не могут быть использованы для расчета полного выхода электронов из образца, поскольку (за исключением работы [196]) основаны на рассмотрении односкоростного переноса.

Влияние упругого и неупругого рассеяния на энергетический спектр электронов, испускаемых образцом, рассмотрено в работе [197]. В этой работе оценивается вероятность $p(E', \vec{\Omega}', z_0, E, \vec{\Omega})$ того, что электрон, рожденный в состоянии $(E', \vec{\Omega}')$ на глубине z_0 , выходит из образца в состоянии $(E, \vec{\Omega})$. При этом учитывается тот факт, что процессы упругого и неупругого рассеяния могут быть разделены, что позволяет представить $p(E', \vec{\Omega}', z_0, E, \vec{\Omega})$ в виде

$$p(E', \vec{\Omega}', z_0, E, \vec{\Omega}) = \int dR \cdot Q(E', \vec{\Omega}', z_0, R, \vec{\Omega}) \cdot T(E', R, E). \quad (9.3)$$

Здесь $Q(E', \vec{\Omega}', z_0, R, \vec{\Omega})$ - вероятность того, что электрон выйдет с поверхности в направлении $\vec{\Omega}$ после прохождения пути длиной R , $T(E', R, E)$ - вероятность того, что электрон, прошедший путь R , будет иметь энергию E . Функции $Q(E', \vec{\Omega}', z_0, R, \vec{\Omega})$, $T(E', R, E)$ оцениваются в различных приближениях, что позволяет записать спектр выходящих электронов в окрестности пика Оже-электронов и вдали от него. С помощью рассмотренных приближений оценивается вероятность выхода электронов в окрестности пика для неоднородного источника. Эта вероятность аппроксимируется функцией

$$q_A(z_0) = \frac{4\pi}{1 + \exp(z_0 / L_A)}, \quad L_A = (l_{in} \lambda / 3)^{1/2}. \quad (9.4)$$

Приведенные в [197] результаты весьма затруднительно использовать для расчета полного выхода электронов. Для оценки полного выхода, как уже отмечалось в параграфе 3.2, часто используют эмпирическую формулу (3.39), в которой вероятность выхода электрона линейно зависит от глубины

$$q(z_0) = \left(1 - \frac{z_0}{L}\right) / 2 \quad (9.5)$$

Наряду с этим используется и экспоненциальная форма зависимости функции выхода от глубины [98, 198]:

$$q(z_0) = \exp\left(-\frac{z_0}{L}\right) \quad (9.6)$$

Функция выхода для быстрых электронов, вычисленная на основе диффузионного приближения, уже обсуждалась нами в параграфах 3.2, 3.3 для случая однородной мишени и мишени типа слой на подложке. В следующем разделе мы более детально обсудим аппроксимации (9.6), (7.35) функции выхода, уточним предположения, в которых они справедливы, и проведем их сравнение с результатами численного моделирования по методу Монте-Карло.

Сравнение результатов аналитической и численной аппроксимации функции выхода электронов средних энергий для полубесконечных образцов.

В этом разделе мы получим и проанализируем приближенные аналитические выражения для функций выхода в различных областях энергии электрона. Для детального выявления областей пригодности полученных решений и определения их точности проводится сравнение аналитических оценок с численным расчетом функций выхода.

Как уже указывалось в параграфе 3.2, для отыскания функции выхода может быть использовано кинетическое уравнение, описывающее распространение электронов, родившихся на расстоянии z_0 от поверхности с энергией E_0 . Для полубесконечного образца с плоской границей это уравнение имеет вид (3.26) с граничным условием (3.27). Функция выхода при этом определяется формулой (3.28). Как уже неоднократно отмечалось, разномасштабность процессов угловой и энергетической релаксации позволяет заменить кинетическое уравнение для дифференциальной плотности потока в области диффузии уравнением для изотропной части распределения U_0 , зависящей лишь от глубины и энергии.

Функция U_0 является решением одномерного обобщенного уравнения диффузии, отличающегося от (3.5) лишь наличием источникового члена. В безразмерных переменных это уравнение имеет вид

$$\frac{1}{3\nu_1(E)} \frac{\partial^2 U_0}{\partial z^2} - s(E_0) \hat{I}_{in} U_0 - \delta(z - z_0) \delta(E - 1) = 0 \quad (9.7)$$

Здесь за единицу длины принята величина $\sqrt{\lambda(E_0)s(E_0)}$, за единицу энергии – начальная энергия электрона E_0 , а ν_1 – первое собственное число упругой части интеграла столкновений. Возможности дальнейшего упрощения описания кинетики электронов связаны с особенностями неупругого взаимодействия электронов с веществом. При этом форма функции выхода определяется соотношением между длиной свободного пробега по неупругим столкновениям l_{in} и полным пробегом электрона s . При рассмотрении быстрых электронов длина свободного пробега по неупругим столкновениям оказывается много меньше полного пробега, что позволяет воспользоваться приближением непрерывного замедления, перейти к уравнению (3.29) и получить функцию выхода в виде (3.35):

$$q(z_0) = C_1 \left[1 - \operatorname{erf} \left(\frac{z_0}{L_1} \right) \right]. \quad (9.8)$$

Здесь длина выхода L_1 связана с длинами угловой и энергетической релаксации соотношением

$$L_1 = 2\sqrt{\lambda(E_0)s(E_0)\tau^*}, \quad \tau^* = \int_{E_0}^0 \frac{dE}{3s(E_0)\lambda(E_0)\gamma(E)\nu_1(E)} \quad (9.9)$$

Другая ситуация возникает при рассмотрении электронов с малыми энергиями. Если потери энергии в неупругом столкновении сравнимы с энергией электронов и электрон теряет всю энергию за несколько неупругих столкновений, то длина свободного пробега по неупругим столкновениям будет величиной порядка полного пробега электрона. При рассмотрении электронов с малыми энергиями возможна ситуация, когда электрон полностью теряет свою энергию в первом неупругом столкновении. В этом случае увеличение числа частиц в элементарном фазовом объеме за счет столкновений отсутствует, и неупругий интеграл столкновений может быть представлен в виде

$$\hat{I}_{in} U_0 = -\frac{U_0}{l_{in}(E)} \quad (9.10)$$

Подстановка (9.10) в уравнение (9.7) приводит к

$$\frac{\partial^2 U_0}{\partial z^2} - \frac{3|\nu_1(E)s(E_0)}{l_{in}(E)} U_0 + 3|\nu_1(E)|\delta(z - z_0)\delta(E - 1) = 0. \quad (9.11)$$

Решение этого уравнения будем искать в виде

$$U_0(z, E) = n(z)\delta(E - 1) \quad (9.12)$$

Тогда $n(z)$ подчиняется обыкновенному дифференциальному уравнению

$$\frac{d^2 n}{dz^2} - \frac{n}{L_2^2} = -3|v_1(E_0)|\delta(z - z_0) \quad (9.13)$$

Здесь $L_2^2 = l_{in}(E_0)/3s(E_0)|v_1(E_0)|$. Учитывая, что $n(z)|_{z \rightarrow \infty} \rightarrow 0$, получим

$$n(z) = \begin{cases} \exp(-\frac{z_0}{L_2}) \cdot \left(a \cdot \operatorname{ch}(\frac{z}{L_2}) + b \cdot \operatorname{sh}(\frac{z}{L_2}) \right) & z < z_0 \\ \left(a \cdot \operatorname{ch}(\frac{z_0}{L_2}) + b \cdot \operatorname{sh}(\frac{z_0}{L_2}) \right) \cdot \exp(-\frac{z}{L_2}) & z > z_0 \end{cases} \quad (9.14)$$

Константы a и b определяются граничным условием при $z = 0$:

$$a = n(0)\exp(z_0/L_2), \quad b = 3|v_1(E)|L_2 - a \quad (9.15)$$

Как видно из (3.4, 3.28), поток электронов через поверхность в рассматриваемом случае почти изотропного распределения электронов пропорционален производной dn/dz . Поэтому, с учетом (3.28), функция выхода может быть записана в виде

$$q(z_0) = \frac{1}{3|v_1(E_0)|} \frac{dn}{dz}(0) = \frac{b}{L_2 3|v_1(E_0)|} \exp\left(-\frac{z_0}{L_2}\right) = C_2 \exp\left(-\frac{z_0}{L_2}\right), \quad (9.16)$$

где z_0 - размерная глубина, а размерная длина выхода L_2 определяется выражением

$$L_2 = \sqrt{l_{in}(E_0)\lambda(E_0)/3|v_1(E_0)|}. \quad (9.17)$$

Отметим, что зависящий от энергии множитель C_2 , так же, как и C_1 , определяется граничными условиями. Однако, вследствие того, что диффузионное приближение применимо лишь вдали от поверхности (на глубинах порядка длины изотропизации и больших), граничное условие для решений в области диффузии должно определяться сращиванием диффузионного решения с решением в пограничном слое. Эта процедура достаточно трудоемка, и, кроме того, для справедливости диффузионного приближения требуется, чтобы параметр $\varepsilon = \sqrt{\lambda(E_0)/s(E_0)}$ был достаточно мал. Это условие для электронов средних и малых энергий выполняется не всегда, в силу чего выражения (9.8), (9.16) можно рассматривать как общую форму зависимости функции выхода от глубины, где параметры C_i , L_i определяются с помощью результатов численного расчета.

Интересно отметить, что приведенная в конце предыдущего раздела формула (9.5), в которой функция выхода линейно зависит от глубины, также может быть легко получена из кинетического уравнения, однако предположения, которые необходимо при этом сделать,

противоречат реально наблюдаемым для электронов соотношениям между длинами релаксации. Действительно, если длина энергетической релаксации $s(E)$ значительно меньше длины угловой релаксации $\lambda(E)$, то можно считать, что направление распространения электрона остается постоянным в процессе его движения от источника к поверхности. Если, кроме того, $l_{in}(E) \ll s(E)$, то энергия электрона меняется в соответствии с моделью непрерывного замедления, и интеграл столкновений может быть аппроксимирован дифференциальным оператором

$$\hat{I}_{col}\Phi \approx \frac{\partial}{\partial E}(\gamma(E)\Phi), \quad (9.18)$$

Такое предположение было использовано Арчардом в работе [199]. Используя (3.26) и (9.18), можно записать кинетическое уравнение в виде

$$\cos\theta \cdot \frac{\partial \Phi}{\partial z} - \frac{\partial}{\partial E}(\gamma(E)\Phi) = 0 \quad (9.19)$$

Наличие источника на глубине приводит к условию

$$\Phi(z_0, \theta, E) = \frac{1}{4\pi \cos\theta} \cdot \delta(E - E_0). \quad (9.20)$$

Заменим $\Phi(z_0, \theta, E)$ на $W(z_0, \theta, E) = \gamma(E)\Phi(z_0, \theta, E)$, а переменную E - на τ в соответствии с формулой $\tau = \int_E^{E_0} \frac{dE}{\gamma(E)}$. Тогда уравнение (9.19) перейдет в

$$\cos\theta \cdot \frac{\partial w}{\partial z} - \frac{\partial w}{\partial \tau} = 0. \quad (9.21)$$

Прямые $z/\cos\theta + \tau = Const$ являются характеристиками этого уравнения. Поэтому решение (9.21) запишется в виде

$$w(z, \theta, \tau) = \frac{1}{4\pi \cos\theta} \cdot \delta\left(\frac{z - z_0}{\cos\theta} + \tau\right) \quad (9.22)$$

Подстановка (9.22) в (3.28) дает формулу (9.5) с $L \equiv s(E_0) = \int_0^{E_0} \frac{dE}{\beta(E)}$, где $\beta(E) = N\bar{Q}(E)$ - средняя потеря энергии на единице длины.

Перейдем теперь к численному анализу функции выхода. Прежде всего, при помощи разработанных программ расчета дифференциальных сечений упругого и неупругого рассеяния нами были определены характерные длины процессов релаксации для веществ с существенно различающимися атомными номерами Al ($Z=13$), Ge ($Z=32$), Au ($Z=79$) в широком диапазоне начальных энергий электрона (от десятков eV до десятков keV). Результаты этих расчетов приведены в таблицах 9.1 - 9.3. Из приведенных данных видно, что

начиная с некоторой энергии порядка сотен eV отношение λ/s не превосходит 0.2 для всех элементов. При этом значение λ/s уменьшается с ростом атомного номера вещества. При меньших энергиях, за исключением области очень малых энергий ($E < 20$ eV для Al и Ge, $E < 50$ eV для Au) это отношение нельзя считать малым и разделение процессов угловой и энергетической релаксации необоснованно. Как видно из таблиц 9.1 – 9.3, длина свободного пробега по неупругим столкновениям в области энергий $E > 1$ keV много меньше полного пробега, что позволяет использовать приближение непрерывного замедления. В связи с этим использование выражения (9.8) для функции выхода в этой области энергий вполне оправдано. При энергиях порядка десятков eV длина свободного пробега сопоставима с полным пробегом, следовательно, для описания формы функции выхода может оказаться применимым выражение (9.16).

Для решения вопроса о точности того или иного аналитического приближения было проведено сравнение полученных в результате численного моделирования зависимостей функции выхода от глубины $q_{MC}(z)$ с выражениями (9.8), (9.16). При этом величины L_1 , L_2 , C_1 , C_2 трактовались как свободные параметры, которые определялись путем численной минимизации функционала

$$I = \sqrt{\frac{1}{M} \sum_{i=1}^M [q_{MC}(z_i) - q(z_i)]^2}, \quad (9.23)$$

где M - число точек по глубине. Найденные значения параметров вместе со значениями

E , keV	$l_{el} \cdot 10^{-9} m$	$l_{in} \cdot 10^{-9} m$	$\lambda \cdot 10^{-9} m$	$s \cdot 10^{-9} m$	λ/s
0.01	1.15	41.7	1.12	69.6	0.016
0.015	0.890	26.3	0.857	42.8	0.020
0.02	0.693	4.44	0.640	5.25	0.122
0.025	0.576	0.589	0.496	0.726	0.684
0.03	0.508	0.448	0.413	0.635	0.650
0.04	0.447	0.429	0.340	0.771	0.441
0.05	0.429	0.411	0.322	0.895	0.360
0.06	0.422	0.430	0.319	1.10	0.290
0.07	0.423	0.451	0.326	1.32	0.246
0.08	0.453	0.473	0.379	1.56	0.242
0.09	0.462	0.497	0.402	1.83	0.220
0.1	0.474	0.523	0.428	2.11	0.203
0.2	0.631	0.769	0.879	5.40	0.163
0.3	0.780	0.977	1.48	8.53	0.174
0.4	0.919	1.18	2.21	12.0	0.185

0.5	0.106	1.37	3.14	15.9	0.198
0.6	0.117	1.56	3.96	19.9	0.199
0.7	0.129	1.74	4.92	25.0	0.197
0.8	0.141	1.92	6.08	30.1	0.202
0.9	0.152	2.10	7.17	36.0	0.199
1.0	0.163	2.27	8.54	42.1	0.203
2.0	0.266	3.94	25.4	130	0.196
3.0	0.363	5.49	49.2	262	0.188
4.0	0.458	6.98	79.4	425	0.187
5.0	0.553	8.41	116	620	0.186
6.0	0.647	9.82	158	850	0.186
7.0	0.739	11.2	206	1120	0.184
8.0	0.831	12.6	259	1420	0.183
9.0	0.922	13.9	317	1740	0.182
10.0	10.1	15.2	381	2080	0.184
15.0	14.6	21.6	774	4320	0.179
20.0	19.1	27.7	1280	7080	0.181

Таблица 9.1 Средние длины свободного пробега по упругим и неупругим столкновениям, l_{el} и l_{in} , длина изотропизации λ , длина энергетической релаксации s и отношение λ/s для Al.

E , keV	$l_{el} \cdot 10^{-9} m$	$l_{in} \cdot 10^{-9} m$	$\lambda \cdot 10^{-9} m$	$s \cdot 10^{-9} m$	λ/s
0.01	0.188	19.9	0.235	42.4	0.00553
0.15	0.316	8.67	0.379	17.6	0.0215
0.02	0.455	3.71	0.579	7.06	0.082
0.025	0.577	1.97	0.807	3.70	0.218
0.03	0.659	1.29	1.00	2.50	0.4
0.04	0.701	0.868	1.12	1.85	0.606
0.05	0.664	0.759	1.02	1.82	0.562
0.06	0.626	0.748	0.925	1.98	0.467
0.07	0.595	0.750	0.845	2.18	0.389
0.08	0.566	0.764	0.757	2.40	0.316
0.09	0.548	0.784	0.714	2.64	0.270
0.1	0.536	0.808	0.683	2.90	0.236
0.2	0.575	1.08	0.713	5.59	0.128

0.3	0.656	1.33	0.908	8.45	0.108
0.4	0.737	1.57	1.17	11.6	0.101
0.5	0.817	1.81	1.48	15.2	0.0977
0.6	0.889	2.04	1.82	19.3	0.0942
0.7	0.958	2.28	2.18	23.6	0.0924
0.8	1.03	2.50	2.60	28.4	0.0917
0.9	1.09	2.73	3.01	33.1	0.0908
1.0	1.15	2.95	3.50	38.0	0.0923
2.0	1.69	4.98	9.44	107	0.0885
3.0	2.14	6.88	17.3	203	0.0855
4.0	2.56	8.70	26.9	320	0.0840
5.0	2.96	10.5	38.0	461	0.0825
6.0	3.34	12.2	50.6	620	0.0815
7.0	3.71	13.8	64.5	803	0.0803
8.0	4.06	15.5	79.7	1010	0.0792
9.0	4.41	17.1	96.1	1230	0.0784
10.0	4.75	18.7	114	1470	0.0774
15.0	6.40	26.5	219	2950	0.0743
20.0	7.99	34.0	352	4830	0.0728

Таблица 9.2 Средние длины свободного пробега по упругим и неупругим столкновениям, l_{el} и l_{in} , длина изотропизации λ , длина энергетической релаксации s и отношение λ/s для Ge.

$E, \text{ keV}$	$l_{el} \cdot 10^{-9} m$	$l_{in} \cdot 10^{-9} m$	$\lambda \cdot 10^{-9} m$	$s \cdot 10^{-9} m$	λ/s
0.01	0.510	3.49	0.212	5.75	0.0369
0.015	0.735	2.30	0.226	4.20	0.0538
0.02	0.612	1.76	0.211	3.41	0.0621
0.025	0.430	1.44	0.188	2.88	0.0652
0.03	0.313	1.22	0.169	2.51	0.0672
0.04	0.211	0.999	0.161	2.20	0.0731
0.05	0.181	0.852	0.183	1.91	0.0959
0.06	0.168	0.736	0.218	1.68	0.130
0.07	0.161	0.650	0.262	1.50	0.175
0.08	0.174	0.592	0.322	1.39	0.232
0.09	0.173	0.554	0.394	1.33	0.296
0.1	0.174	0.530	0.483	1.31	0.368
0.2	0.222	0.542	0.869	1.90	0.457
0.3	0.290	0.644	0.873	3.03	0.288
0.4	0.351	0.760	0.891	4.49	0.199
0.5	0.405	0.871	0.982	6.07	0.153
0.6	0.442	0.980	0.982	7.80	0.126

0.7	0.475	1.09	1.04	9.63	0.108
0.8	0.507	1.19	1.11	11.6	0.0965
0.9	0.533	1.29	1.19	13.6	0.0878
1.0	0.560	1.39	1.28	15.6	0.0819
2.0	0.766	2.32	2.46	41.3	0.0596
3.0	0.932	3.18	4.05	76.4	0.0531
4.0	1.08	4.01	5.97	121	0.0491
5.0	1.21	4.80	8.13	174	0.0469
6.0	1.33	5.57	10.5	231	0.0456
7.0	1.45	6.32	13.1	299	0.0439
8.0	1.56	7.06	15.9	371	0.0430
9.0	1.67	7.70	18.9	451	0.0420
10.0	1.77	8.51	22.1	535	0.0413
15.0	2.23	12.0	40.3	1060	0.0381
20.0	2.66	15.4	62.0	1720	0.0361

Таблица 9.3 Средние длины свободного пробега по упругим и неупругим столкновениям, l_{el} и l_{in} , длина изотропизации λ , длина энергетической релаксации s и отношение λ/s для Au.

функционала I для Al, Ge и Au приведены в таблицах 9.4 - 9.6. Оказалось, что в области малых энергий (порядка десятков eV) выражение (9.16) приводит к меньшим значениям I , чем выражение (9.8), т.е. выражение (9.16) лучше аппроксимирует функцию выхода. Обратная ситуация имеет место при энергиях $E > 1$ keV. В этой области энергий функция выхода лучше аппроксимируется выражением (9.8). Наконец, в области промежуточных энергий обе аналитические аппроксимации имеют приблизительно одинаковую точность. Значение функционала при этом оказывается приблизительно вдвое большим, чем для областей $E > 1$ keV, $E < 50$ eV. Полученные данные находятся в хорошем согласии с результатами анализа характерных длин процесса транспорта электронов.

Большой интерес представляет сравнение длин выхода, найденных путем минимизации функционала (9.23), с длинами выхода, рассчитанными по формулам (9.9),

E , keV	$L_1 \cdot 10^{-9} m$	C_1	I_1	$L_2 \cdot 10^{-9} m$	C_2	I_2
0.015	5.79	0.694	0.0203	2.93	0.827	0.0010
0.02	2.40	0.534	0.0265	1.22	0.633	0.0102
0.025	0.652	0.348	0.0180	0.339	0.417	0.0119
0.03	6.19	0.321	0.0181	3.19	0.380	0.0776
0.04	4.64	0.314	0.0389	2.16	0.426	0.0212
0.05	5.71	0.331	0.0299	2.83	0.410	0.0173
0.1	4.93	0.363	0.0282	2.46	0.446	0.0188
0.2	4.50	0.559	0.0238	2.15	0.716	0.0076
0.3	5.03	0.654	0.0143	2.51	0.801	0.0046
0.4	6.13	0.669	0.1012	3.11	0.809	0.0089

0.5	7.56	0.663	0.0087	3.78	0.805	0.0104
0.6	8.93	0.667	0.0061	4.41	0.812	0.0139
0.7	10.7	0.659	0.0056	5.32	0.795	0.0137
0.8	12.3	0.659	0.0047	6.21	0.789	0.0144
0.9	14.3	0.649	0.0050	7.12	0.786	0.0140
1.0	16.4	0.652	0.0042	8.22	0.782	0.0147
1.5	29.3	0.629	0.0039	14.8	0.750	0.0156
2.0	43.6	0.642	0.0026	22.1	0.766	0.0160
2.5	62.2	0.641	0.0014	31.9	0.758	0.0172
3.0	83.7	0.637	0.0030	43.2	0.748	0.0166
4.0	131	0.645	0.0025	67.6	0.760	0.0179
5.0	190	0.647	0.0020	98.8	0.754	0.0194
6.0	259	0.646	0.0023	135	0.747	0.0194
7.0	333	0.649	0.0026	176	0.750	0.0203
8.0	420	0.652	0.0028	221	0.751	0.0200
9.0	517	0.648	0.0035	275	0.744	0.0210
10.0	617	0.650	0.0036	327	0.745	0.0211
15.0	1260	0.649	0.0038	671	0.740	0.0205
20.0	2080	0.649	0.0049	1100	0.747	0.0233

Таблица 9.4 Параметры аналитической аппроксимации функции выхода и погрешность аппроксимации для Al.

(9.17). Зависимости от энергии длин выхода, минимизирующих функционал (9.23), и длин выхода, рассчитанных по формулам (9.9), (9.17), представлены на рисунке 9.1. В случае золота и германия при энергиях электрона $E > 2$ keV, т.е. в той области энергий, где выполняются условия $\lambda \ll s$, $l_{in} \ll s$, обе зависимости совпали с точностью до

E , keV	$L_1 \cdot 10^{-9} m$	C_1	I_1	$L_2 \cdot 10^{-9} m$	C_2	I_2
0.012	3.24	0.651	0.0183	1.61	0.800	0.0008
0.014	3.23	0.628	0.0182	1.59	0.778	0.0008
0.015	3.24	0.608	0.0181	1.59	0.758	0.0007
0.016	3.15	0.599	0.0173	1.58	0.737	0.0010
0.017	3.16	0.579	0.0185	1.57	0.709	0.0026
0.018	3.13	0.558	0.0174	1.55	0.688	0.0018
0.02	3.15	0.534	0.0171	1.57	0.657	0.0022
0.025	3.24	0.528	0.0169	1.62	0.646	0.0025
0.03	3.26	0.552	0.0161	1.62	0.676	0.0011
0.04	3.26	0.570	0.0157	1.65	0.692	0.0007
0.05	3.31	0.577	0.0147	1.66	0.699	0.0014
0.1	3.60	0.628	0.0144	1.77	0.770	0.0041
0.2	3.93	0.703	0.0124	1.97	0.859	0.0077
0.3	4.61	0.721	0.0096	2.34	0.872	0.0106
0.4	5.44	0.729	0.0085	2.69	0.891	0.0129

0.5	6.35	0.726	0.0079	3.13	0.884	0.0135
0.6	7.37	0.727	0.0081	3.63	0.887	0.0136
0.7	8.50	0.715	0.0076	4.18	0.873	0.0135
0.8	9.69	0.712	0.0070	4.77	0.870	0.0141
0.9	10.8	0.715	0.0069	5.32	0.874	0.0148
1.0	12.2	0.708	0.0072	6.07	0.853	0.0136
1.1	13.5	0.710	0.0065	6.70	0.861	0.0143
1.2	15.2	0.698	0.0063	7.56	0.844	0.0140
1.3	16.9	0.694	0.0066	8.45	0.834	0.0136
1.5	20.6	0.699	0.0061	10.3	0.840	0.0143
2.0	29.2	0.709	0.0058	14.5	0.862	0.0155
2.5	40.7	0.688	0.0050	20.3	0.832	0.0153
3.0	52.1	0.699	0.0047	25.7	0.855	0.0162
4.0	79.6	0.693	0.0046	39.3	0.845	0.0160
5.0	112	0.699	0.0040	56.1	0.840	0.0165
6.0	148	0.702	0.0038	74.0	0.847	0.0170
7.0	188	0.698	0.0029	94.3	0.839	0.0178
8.0	229	0.709	0.0023	117	0.843	0.0181
9.0	277	0.708	0.0021	144	0.830	0.0184
10.0	331	0.700	0.0031	168	0.833	0.0176
11.0	385	0.705	0.0026	194	0.841	0.0184
12.0	442	0.709	0.0015	225	0.844	0.0190
15.0	639	0.707	0.0026	324	0.842	0.0187
20.0	1030	0.711	0.0037	612	0.774	0.0133

Таблица 9.5 Параметры аналитической аппроксимации функции выхода и погрешность аппроксимации для Ge.

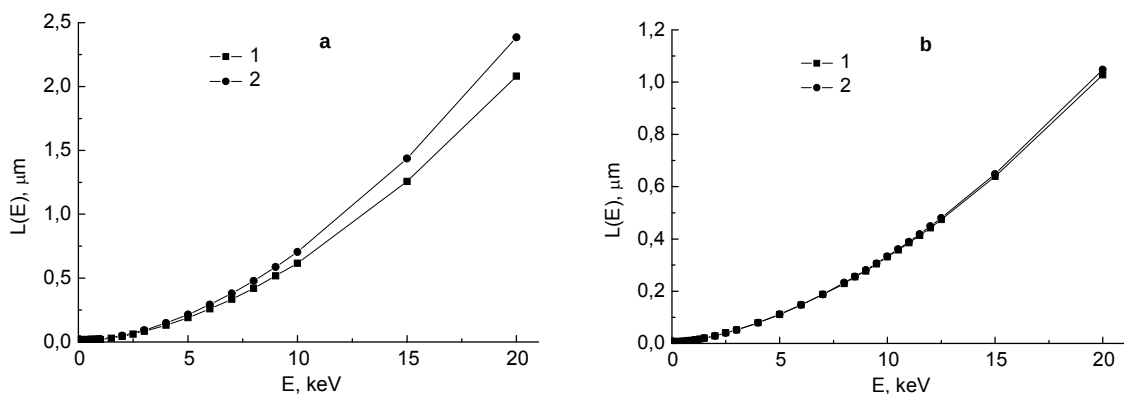
$E, \text{ keV}$	$L_1 \cdot 10^{-9} m$	C_1	I_1	$L_2 \cdot 10^{-9} m$	C_2	I_2
0.012	1.27	0.513	0.0197	0.626	0.624	0.0050
0.015	1.28	0.506	0.0188	0.631	0.625	0.0047
0.02	1.26	0.540	0.0191	0.626	0.666	0.0043
0.025	1.26	0.559	0.0183	0.616	0.696	0.0025
0.03	1.26	0.574	0.0189	0.616	0.715	0.0027
0.04	1.29	0.612	0.0189	0.640	0.754	0.0019
0.05	1.30	0.632	0.0166	0.654	0.771	0.0013
0.06	1.34	0.634	0.0161	0.668	0.780	0.0019
0.08	1.34	0.652	0.0147	0.691	0.799	0.0038
0.1	1.43	0.662	0.0132	0.721	0.802	0.0056
0.2	1.81	0.665	0.0084	0.888	0.815	0.0114
0.3	2.18	0.675	0.0061	1.08	0.821	0.0138
0.4	2.55	0.684	0.0053	1.26	0.832	0.0150
0.5	2.95	0.693	0.0054	1.45	0.846	0.0151
0.6	3.35	0.698	0.0053	1.65	0.854	0.0154
0.7	3.75	0.709	0.0052	1.84	0.868	0.0160
0.8	4.23	0.707	0.0060	2.08	0.864	0.0149

0.9	4.65	0.714	0.0062	2.30	0.869	0.0149
1.0	5.07	0.718	0.0063	2.56	0.870	0.0141
1.5	7.72	0.717	0.0077	3.84	0.873	0.0132
2.0	10.6	0.719	0.0072	5.25	0.877	0.0137
2.5	14.1	0.714	0.0074	6.98	0.871	0.0133
3.0	17.1	0.729	0.0066	8.69	0.881	0.0142
4.0	25.8	0.725	0.0070	12.6	0.888	0.0145
5.0	35.3	0.727	0.0068	17.5	0.880	0.0145
6.0	45.4	0.731	0.0064	22.3	0.892	0.0153
7.0	56.8	0.738	0.0050	27.9	0.902	0.0168
8.0	69.1	0.738	0.0050	33.9	0.904	0.0169
9.0	81.7	0.745	0.0042	40.8	0.898	0.0174
10.0	96.9	0.743	0.0057	48.4	0.895	0.0161
15.0	178	0.751	0.0045	89.1	0.905	0.0175
20.0	278	0.755	0.0039	137	0.921	0.184

Таблица 9.6 Параметры аналитической аппроксимации функции выхода и погрешность аппроксимации для Au.

погрешности процедуры минимизации. В этом диапазоне энергий длины выхода, рассчитанные обоими способами для германия и для золота, различаются не более, чем на 3%, в то время, как точность определения длин выхода путем минимизации функционала (9.23) составляет около 10%. В случае алюминия различие в длинах выхода оказалось равным приблизительно 15%. Причиной этого является, по-видимому, относительно большое значение величины $\lambda(E_0)/s(E_0)$.

При энергиях электрона настолько низких, что с большой вероятностью энергия полностью теряется в результате первого неупругого столкновения, можно ожидать, что длина выхода L_2 , входящая в выражение (9.16), удовлетворяет соотношению (9.17). Для проверки этого предположения длины выхода L_2 , определяемые путем минимизации



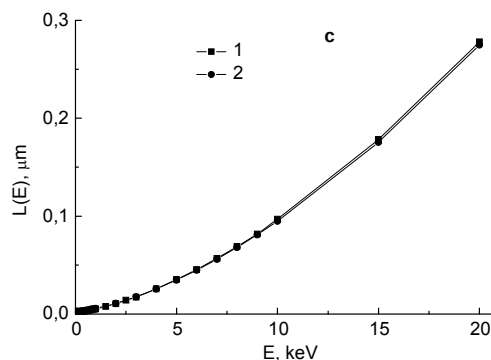


Рисунок 9.1 Длины выхода, найденные из приближенного решения кинетического уравнения (1) и из результатов моделирования методом Монте-Карло (2): *a* – алюминий, *b* – германий, *c* – золото.

функционала (9.23), сравнивались с длинами, рассчитанными по формуле (9.17). Для электронов с энергиями 10-25 eV расхождение в значениях длин выхода составляет около 10%.

Таким образом, анализ соотношений между средними длинами свободного пробега по упругим и неупругим взаимодействиям, длиной изотропизации и длиной полного пробега позволяет определить области справедливости предположений, сделанных при выводе аналитических выражений для функции выхода. Сравнение полученных аналитически и численно результатов подтверждает вывод о виде аналитической аппроксимации функции выхода для электронов различных энергий и показывает пригодность найденных аналитических выражений для длин выхода.

Отметим, что с помощью полученных выражений для функции выхода нами был рассчитан полный выход фотоэмиссии κ для образцов $Al_xGa_{1-x}As$, облучаемых рентгеном с энергией до и после края скачка поглощения Ga (κ_1, κ_2) и As (κ_3, κ_4), и получена зависимость $R = \frac{\kappa_2 - \kappa_1}{\kappa_4 - \kappa_3}$ от концентрации алюминия x [200]. Значения R , измеренные для образцов $Al_xGa_{1-x}As$ при $x = 0$, $x = 0.185$, $x = 0.33$, $x = 0.54$, $x = 0.69$ находятся в полном согласии с рассчитанной зависимостью.

Сравнение результатов аналитической и численной аппроксимации функции выхода электронов средних энергий для образцов типа «слой на подложке»

Функция выхода из образцов типа «слой на подложке» в диффузионном приближении была получена в параграфе 3.3. При выводе этого выражения было сделано дополнительное

предположение о независимости от энергии отношения потерь энергии, $\gamma^{(2)}(E)/\gamma^{(1)}(E)$, и отношения первых собственных значений упругой части интеграла столкновений, $\nu_1^{(2)}(E)/\nu_1^{(1)}(E)$, в слое и подложке. Справедливость предположения о применимости диффузионного приближения детально проанализирована в предыдущем разделе. Постоянство отношений $\gamma^{(2)}(E)/\gamma^{(1)}(E)$, $\nu_1^{(2)}(E)/\nu_1^{(1)}(E)$, вообще говоря, имеет место при больших энергиях, и для определения пригодности полученных выражений (3.56), (3.57) можно было бы найти нижнюю границу диапазона энергий, в котором это условие выполняется. Имеется, однако, и другой путь – сравнение (3.56), (3.57) с результатами численного моделирования функции выхода по методу Монте-Карло. В некоторых случаях аналитические выражения описывают общую форму полученных зависимостей даже несмотря на то, что сделанные при их выводе предположения нарушаются. При этом значения входящих в них параметров могут отличаться от найденных и должны быть скорректированы по результатам численного расчета.

С помощью разработанного нами пакета, описанного в главе 8, был проведен ряд расчетов функции выхода для образцов с различным контрастом атомных номеров: «алюминий на золоте» (слой алюминия на подложке из золота, в дальнейшем будем обозначать такие образцы Al/Au), «золото на алюминии» (Au/Al), «алюминий на меди» (Al/Cu) и «медь на алюминии» (Cu/Al). Толщина слоя варьировалась от нескольких десятков ангстрем до толщин, сравнимых с характерной глубиной выхода электронов (порядка тысяч ангстрем).

Анализ дифференциальных сечений упругого рассеяния показывает, что толщина слоя порядка сотен ангстрем сравнима с характерной длиной изотропизации, то есть при распространении электронов в слое не успевает произойти перераспределение по углам. Кроме того, электроны испытывают отражение от подложки, и различие рассеивающих свойств материалов подложки и слоя влияет на распределение электронов. Поэтому значения длин выхода из слоя L , входящие в выражения (3.56), (3.57), не совпадают с длинами выхода из однородных образцов того же состава $L^{(1)}$ и должны определяться в зависимости от толщины слоя.

Скорректированные длины выхода из слоя L и коэффициенты C определялись с помощью минимизации функционала

$$I(C, L; E, a) = \sqrt{\frac{1}{M} \sum_{i=1}^M [q_{MC}(z_i; E, a) - q_{Theor}(z_i; E, a)]^2}, \quad (9.24)$$

где $q_{Theor}(z; E, a)$ определяется выражениями (3.56) или (3.57), z_i – точки, в которых известна функция выхода $q_{MC}(z, E, a)$, найденная методом Монте-Карло. Полученные таким образом

значения L подставлялись в (3.56) и (3.57), куда они входят в явном виде и через коэффициент D . При расчете D по формуле (3.48) длина выхода из слоя $L^{(1)}$ заменялась на L . В подложке справедливо диффузионное приближение, поэтому в качестве длины выхода из подложки $L^{(2)}$ в формуле (3.48) использовались длины выхода из однородных образцов.

Сравнение аналитических зависимостей (3.56), (3.57), в которые входили скорректированные длины выхода L , с результатами расчета методом Монте-Карло показало хорошее совпадение для всех энергий (в диапазоне 0.5÷10 keV) при различной толщине слоя (5÷160 нм). Типичные значения функционала (9.24) при этом оказались порядка тысячных.

На рисунке 9.2 приведены результаты аналитического и численного расчета функции выхода для образцов типа Al/Au и Au/Al при начальной энергии электрона 10 keV. Видно, что кривые, полученные аналитическим и численным методами, практически совпадают.

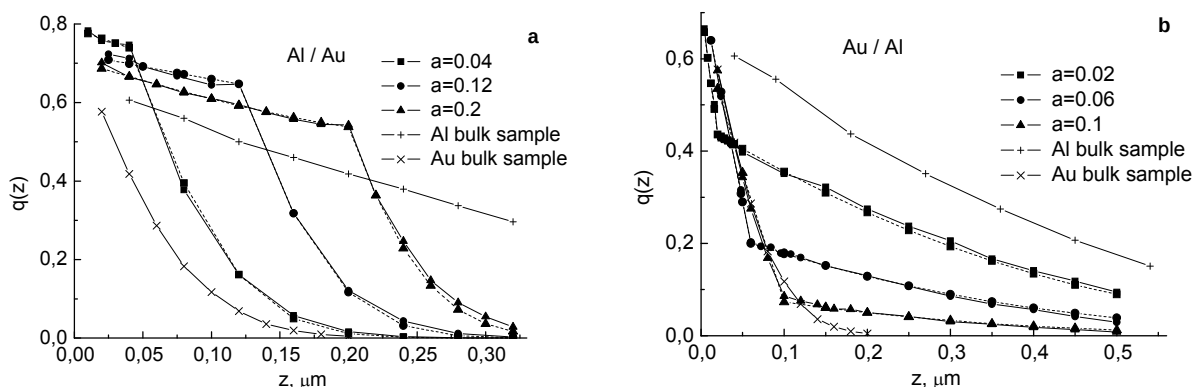


Рисунок 9.2 Функции выхода в зависимости от глубины, рассчитанные численно (сплошные кривые) и аналитически (пунктирные кривые) для образцов Al/Au (a) и Au/Al (b).

Важно оценить величину поправок к длинам выхода из слоя по сравнению с длинами выхода из однородного образца в зависимости от энергии электронов, толщины слоя и соотношения атомных номеров слоя и подложки. Расчеты показали, что длины выхода из слоя легкого вещества на тяжелой подложке уменьшаются по сравнению с длинами выхода из однородного образца, а в случае слоя тяжелого вещества на легкой подложке длины выхода увеличиваются. Эти эффекты усиливаются с уменьшением толщины слоя и увеличением контраста атомных номеров. На рисунке 9.3 приведены отношения длин выхода L из слоя толщиной 10 и 60 нм к длинам выхода $L^{(1)}$ из однородного образца для образцов Al/Au и Al/Cu в зависимости от начальной энергии электрона.

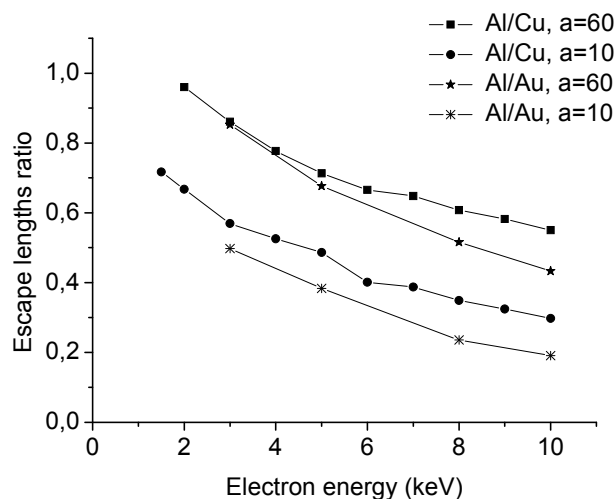


Рисунок 9.3 Отношения длин выхода из слоя к длинам выхода из полубесконечного Al в случае образцов Al/Cu и Al/Au с толщиной слоя 100 и 600 ангстрем.

Таким образом, использование численного моделирования функции выхода по методу Монте-Карло позволяет скорректировать длину выхода электронов из слоя, учитывая отличие условий транспорта от диффузии и влияние подложки.

9.2 Расчет теплового воздействия электронного зонда на образец нитрида галлия

Анализ температурных полей, возникающих в результате взаимодействия электронного зонда с образцом, имеет важное значение для интерпретации экспериментальных данных в катодолюминесценции, Оже- и рентгеноспектральном микроанализе [201-203]. Учет температурного воздействия может оказаться достаточно актуальным и при обработке образцов электронными пучками. Такие проблемы возникают, в частности, при активации р-типа проводимости в образцах GaN [204, 205], одного из наиболее перспективных материалов для создания оптоэлектронных приборов во всем видимом диапазоне. В этом параграфе изложены результаты проведенного нами исследования теплового воздействия электронного зонда на образец [206].

Исследованию этого явления посвящен целый ряд работ как экспериментального [207, 208], так и теоретического характера [201-203, 209, 210]. Необходимо отметить, что экспериментальное определение температуры перегрева [207, 208] сильно осложнено малым размером области генерации тепла, вследствие чего полученные результаты имеют невысокую точность и могут рассматриваться лишь как качественные. В связи с этим

особую ценность приобретают теоретические подходы к оценке распределения плотности источников тепла и температуры нагрева образца электронным зондом.

В работе [201] получено решение стационарной задачи теплопроводности и на его основе найдена широко используемая формула для максимальной величины перегрева. Отметим, что в процессе получения этой формулы считалось, что область генерации тепла представляет собой полусферу с радиусом, совпадающим с радиусом зонда. В работе [202] дано решение задачи теплопроводности для образца, покрытого пленкой материала с высокой теплопроводностью, причем для области генерации была использована такая же аппроксимация. Соотношение для оценки температуры на поверхности образца включает в себя несобственный интеграл от комбинации функции Бесселя нулевого порядка и экспоненты. В работе [209] проведено рассмотрение тепловой задачи с областью источника, представляющей собой цилиндр. Высота этого цилиндра принималась равной глубине проникновения электронов зонда, а диаметр основания представлял собой сумму диаметра зонда и удвоенной глубины проникновения. Результат представлен в виде интеграла от специальных функций. В работе [210] область генерации тепла аппроксимировалась полусферой с радиусом, равным сумме радиуса электронного зонда и глубины проникновения электронов. При этом были получены простые аналитические выражения для максимальной температуры перегрева, размера теплового источника и времени установления стационарного температурного поля.

Заметим, что реальная форма источников тепла, естественно, не совпадает с указанными аппроксимациями. Главной причиной их использования в вышеперечисленных работах является возможность получения аналитических соотношений для оценки основных параметров температурного поля. Определение формы области генерации и распределения источников тепла возможно лишь при детальном изучении процесса потери энергии электронами зонда.

В настоящем параграфе проводится исследование распределения температуры в образце с учетом реальной плотности источника тепла. Задача при этом разбивается на две части. Первая часть связана с определением плотности источников тепла, и ее решение базируется на рассмотрении кинетического уравнения для электронов зонда. Вторая часть заключается в решении тепловой задачи с найденным распределением тепловой генерации.

Расчет распределения плотности тепловых источников

Релаксация электронов зонда, в ходе которой электроны передают свою энергию веществу мишени, приводит к генерации тепла. Если считать, что вся энергия электронов

идет на нагрев, то распределение тепловых источников будет совпадать с распределением потерянной энергии. Одномерное распределение потерянной энергии по глубине dE/dz рассчитывалось многими авторами. В частности, в [211] приведено широко используемое универсальное эмпирическое выражение для dE/dz . Однако, для определения пространственного распределения плотности потерянной энергии информации о распределении по глубине недостаточно. Для получения такого распределения необходимо решение кинетического уравнения, описывающего транспорт электронов зонда в мишени. С этой целью нами было проведено моделирование электронных траекторий по методу Монте-Карло в рамках описанной выше модели однократных столкновений. Упругое взаимодействие электронов с атомами рассчитывалось с помощью дифференциального сечения Мотта, вычисленного нами на основе атомного потенциала Томаса-Ферми-Дирака [212]. Неупругое взаимодействие электронов с веществом описывалось с помощью модельного дифференциального сечения (8.15).

Оценка адекватности результатов осуществлялась сопоставлением рассчитанных зависимостей плотности потерянной энергии от глубины с универсальными зависимостями для малых [213] и больших [211] энергий пучка. Двумерное распределение потерянной энергии сравнивалось с распределением в GaAs, предложенным в работе [214]. Сравнение показало, что полученные результаты находятся в удовлетворительном согласии с данными вышеуказанных работ.

С помощью разработанной программы было рассчитано распределение плотности потерянной энергии, а, значит, и тепловых источников $q_f(\rho, z)$ в GaN для энергий $E_0 = 5, 10, 15$ keV, где глубина z и радиус ρ отсчитывались от точки падения сфокусированного пучка электронов на образец. Ток зонда при этом считался равным 100 нА. Изолинии полученного распределения приведены на рисунке 9.4. Заметим, что распределение плотности тепловых

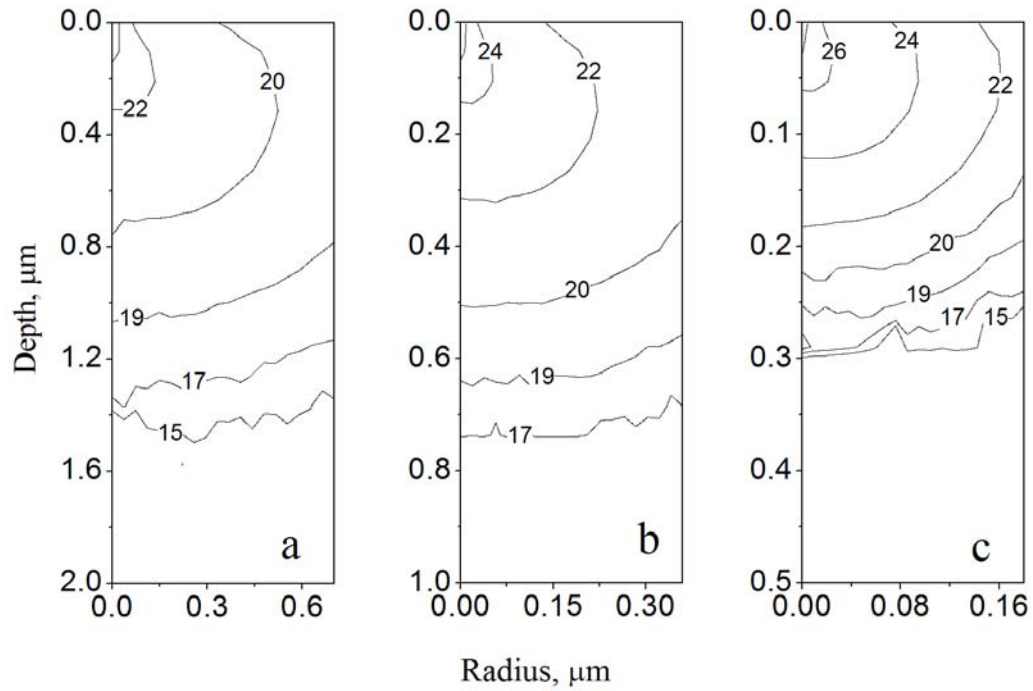


Рисунок 9.4 Изолинии распределения плотности тепловых источников $q_f(\rho, z)$ по радиусу ρ и глубине z в полубесконечном образце GaN, облучаемом сфокусированным пучком электронов с энергией $E_0 = 15 \text{ keV}$ (a). $E_0 = 10 \text{ keV}$ (b) и $E_0 = 5 \text{ keV}$ (c), Глубина и радиус отсчитываются от точки падения зонда. На изолиниях указаны значения $\ln(q_f(\rho, z))$.

источников, возникающее в образце при облучении его пучком электронов с конечным диаметром d , связано с распределением q_f для сфокусированного пучка соотношением

$$q(x, y, z) = \iint q_f(x - x_0, y - y_0, z) I_d(x_0, y_0) dx_0 dy_0, \quad (9.25)$$

где $I_d(x_0, y_0)$ - распределение интенсивности в поперечном сечении пучка.

Расчет температурного поля

Перейдем теперь к рассмотрению второй части задачи - расчету температурного поля в образце при заданной плотности генерации тепла.

Из полученного распределения q_f для сфокусированного пучка (рисунок 9.4) видно, что распределение плотности генерации тепла в объеме образца значительно отличается от сферически симметричного. Аналогичная ситуация имеет место и в более общем случае для

пучков с конечным диаметром. В связи с этим возникает вопрос о возможности использования аппроксимации области генерации тепла полусферой [210]. Полученное в [209] решение задачи теплопроводности для источника, равномерно распределенного в цилиндре, в принципе позволяет оценить влияние формы области тепловыделения на распределение температуры, однако представление результата в виде интеграла от специальных функций затрудняет его использование. Кроме того, граница области генерации не является гладкой, что противоречит рисунку 9.4.

Для учета различия характерных размеров источника тепла в поперечном и продольном направлениях мы будем рассматривать задачу с равномерной генерацией тепла в объеме полуэллипсоида с полуосями a, b . Температурное поле при этом описывается уравнением

$$\Delta T = -q / k \quad (9.26)$$

где k - коэффициент теплопроводности, а плотность источника тепла q в цилиндрических координатах (ρ, z) имеет вид

$$q = \begin{cases} q_0, & \frac{\rho^2}{b^2} + \frac{z^2}{a^2} < 1 \\ 0, & \frac{\rho^2}{b^2} + \frac{z^2}{a^2} > 1 \end{cases} \quad (9.27)$$

Отсутствие теплового потока через поверхность и затухание температурного поля вдали от теплового источника приводят к граничным условиям

$$\left. \frac{\partial T}{\partial z} \right|_{z=0} = 0, \quad T|_{z \rightarrow \infty} \rightarrow 0, \quad T|_{\rho \rightarrow \infty} \rightarrow 0 \quad (9.28)$$

Аксиальная симметрия задачи позволяет использовать вырожденную эллипсоидальную систему координат (α, β) [215], при переходе к которой решение задачи может быть получено в аналитическом виде. Связь между цилиндрическими и эллипсоидальными координатами для случая вытянутого эллипсоида вращения ($a \geq b$) имеет вид:

$$\rho = c \cdot sh \alpha \cdot \sin \beta, \quad z = c \cdot ch \alpha \cdot \cos \beta \quad (9.29)$$

Для сплюснутого эллипсоида вращения ($a < b$) эти формулы заменяются на

$$\rho = c \cdot ch \alpha \cdot \sin \beta, \quad z = c \cdot sh \alpha \cdot \cos \beta, \quad (9.30)$$

где c - масштабный множитель. В первом случае одним из семейств координатных поверхностей является семейство вытянутых эллипсоидов вращения $\alpha = const$ с фокусами в точках $(0, 0, \pm c)$. Выбирая масштабный множитель c и координату $\alpha = \alpha_0$ таким образом, чтобы

$$c^2 sh^2 \alpha_0 = b^2, \quad c^2 ch^2 \alpha_0 = a^2, \quad (9.31)$$

найдем, что эллипсоид, внутри которого происходит генерация тепла, ограничен координатной поверхностью $\alpha = \alpha_0$. Семейства координатных линий для введенной вырожденной эллипсоидальной системы координат приведены на рисунке 9.5.

Оператор Лапласа в координатах (α, β) приобретает вид

$$\Delta T = \frac{1}{c^2 (sh^2 \alpha + \sin^2 \beta)} \left[\frac{1}{sh \alpha} \cdot \frac{\partial}{\partial \alpha} sh \alpha \frac{\partial T}{\partial \alpha} + \frac{1}{\sin \beta} \cdot \frac{\partial}{\partial \beta} \sin \beta \frac{\partial T}{\partial \beta} \right]. \quad (9.32)$$

Решение задачи методом разделения переменных приводит к следующим формулам

$$T_{\text{int}}(\alpha, \beta) = -\frac{q_0}{k} \cdot c^2 \left\{ \frac{1}{4} sh^2 \alpha \cdot \sin^2 \beta - \frac{1}{6} sh^2 \alpha_0 \cdot [1 + 2ch \alpha_0 \cdot \ln cth(\alpha_0 / 2) + \right. \\ \left. + 2(1 - ch \alpha_0 \cdot \ln cth(\alpha_0 / 2)) \cdot \frac{3ch^2 \alpha - 1}{2} \cdot \frac{3 \cos^2 \beta - 1}{2} \right\} \quad (9.33)$$

$$T_{\text{ext}}(\alpha, \beta) = \frac{q_0}{4k} \cdot a \cdot b \cdot sh(\alpha_0) \left\{ (3 \cos^2 \beta - 1) ch \alpha + [2(\sin^2 \beta - sh^2 \alpha) + \right. \\ \left. + 3sh^2 \alpha \cdot \sin^2 \beta] \ln cth(\alpha / 2) \right\} \quad (9.34)$$

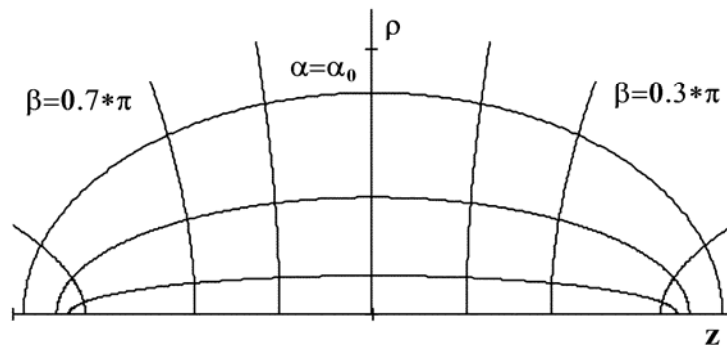


Рисунок 9.5 Семейства координатных линии $\alpha=const$, $\beta=const$ для вырожденной эллипсоидальной системы координат в случае вытянутого ($a > b$) эллипсоида вращения. Рисунок приведен для случая $a=10$, $b=5$. Величины масштабного множителя c и координаты α_0 равны 8.66 и 0.55, соответственно. Кривые приведены для значений $\alpha = 0.1, 0.3, \alpha_0$, $\beta = 0.1\pi, 0.3\pi, 0.4\pi, 0.6\pi, 0.7\pi, 0.9\pi$.

Здесь T_{int} , T_{ext} - распределение температуры внутри и вне эллипсоида, соответственно. В предельном случае, когда $b \rightarrow a$, эти формулы переходят в решение для источника равномерно распределенного в полусфере радиуса a

$$T_{\text{int}}(\rho, z) = \frac{q_0}{6k} \cdot (3a^2 - \rho^2 - z^2) \quad (9.35)$$

$$T_{\text{ext}}(\rho, z) = \frac{q_0}{3k} \cdot \frac{a^3}{\sqrt{\rho^2 + z^2}}. \quad (9.36)$$

Полагая в формулах (9.33), (9.35) $\rho = z = 0$, получим максимальные температуры перегрева для полуэллипсоида

$$T_{\text{max}}^{\text{el}} = \frac{q_0}{4k} \cdot \frac{a \cdot b^2}{\sqrt{a^2 - b^2}} \cdot \ln \frac{a + \sqrt{a^2 - b^2}}{a - \sqrt{a^2 - b^2}} \quad (9.37)$$

и полусферы

$$T_{\text{max}}^{\text{sp}} = \frac{q_0}{2k} \cdot a^2. \quad (9.38)$$

Для сплюснутого эллипсоида вращения ($a < b$) выбираем масштабный множитель c и координату $\alpha = \alpha_0$ так, чтобы

$$c^2 ch^2 \alpha_0 = b^2, \quad c^2 sh^2 \alpha_0 = a^2. \quad (9.39)$$

Решение задачи в этом случае можно записать в следующей форме

$$T_{\text{int}}(\alpha, \beta) = -\frac{q_0}{k} \cdot c^2 \left\{ \frac{1}{4} ch^2 \alpha \cdot \sin^2 \beta - \frac{1}{6} ch^2 \alpha_0 \cdot [1 + 2sh \alpha_0 \cdot \text{arcctg}(sh \alpha_0) - \right. \\ \left. - 2(1 - sh \alpha_0 \cdot \text{arcctg}(sh \alpha_0)) \cdot \frac{3sh^2 \alpha + 1}{2} \cdot \frac{3 \cos^2 \beta - 1}{2} \right\} \quad (9.40)$$

$$T_{\text{ext}}(\alpha, \beta) = \frac{q_0}{4k} \cdot \frac{b^2 \cdot a}{\sqrt{b^2 - a^2}} \left\{ -(3 \cos^2 \beta - 1)sh \alpha + [2(\sin^2 \beta + ch^2 \alpha) - \right. \\ \left. - 3ch^2 \alpha \cdot \sin^2 \beta] \cdot \text{arcctg}(sh \alpha) \right\} \quad (9.41)$$

откуда для максимальной температуры перегрева следует

$$T_{\text{max}}^{\text{el}} = \frac{q_0}{4k} \cdot \frac{a \cdot b^2}{\sqrt{b^2 - a^2}} \cdot \text{arcctg} \frac{a}{\sqrt{b^2 - a^2}} \quad (9.42)$$

На рисунке 9.6 приведена зависимость отношения $\tau = T_{\text{max}}^{\text{el}} / T_{\text{max}}^{\text{sp}}$ максимальных температур перегрева от отношения полуосей эллипсоида η при одинаковом объеме областей генерации. Видно, что значительные изменения T_{max} можно ожидать при $\eta < 0.15$ и $\eta > 5$.

Отметим, что изложенный подход, в отличие от работы [209], не приводит к сложным выражениям для максимальной температуры перегрева и позволяет рассчитывать температурное поле для источников тепла с различными характерными размерами в продольном и поперечном направлениях с использованием лишь элементарных функций.

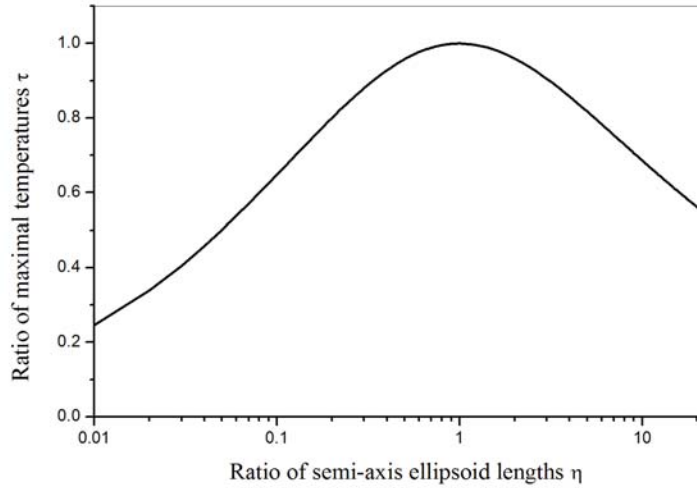


Рисунок 9.6 Зависимость отношения максимальных температур перегрева $\tau = T_{\max}^{el} / T_{\max}^{sp}$ для источников полуэллиптической и полусферической форм одинакового объема и мощности от величины отношения полуосей эллипсоида.

Оценим влияние формы области генерации тепла на $T_{\max}$ для случая сфокусированного пучка. Аппроксимируя распределение тепловых источников $q_f(\rho, z)$ гауссовым распределением $A \cdot \exp(-z^2 / \sigma_z^2 - \rho^2 / \sigma_\rho^2)$, можно определить полуширины σ_z , σ_ρ . Заметим, что изолинии гауссового распределения будут представлять собой эллипсы с отношением полуосей $\eta = \sigma_z / \sigma_\rho$. Оценка отношения полуосей для $E_0 = 5, 10, 15$ кэВ позволяет заключить, что величины η находятся в пределах $0.2 < \eta < 0.24$. Как видно из рисунка 9.6, величина τ при этом меняется в интервале $0.8 < \tau < 0.85$, и, следовательно, отличие формы области генерации тепла от полусферы приводит к ошибкам в определении $T_{\max}$, не превосходящим 20%.

Влияние формы теплового источника на температурное поле иллюстрируется на рисунке 9.7. На этом рисунке приведены изотермы для источников сферической и эллиптической форм. Размеры полуосей a , b эллипсоида при этом выбирались равными удвоенным полуширинам σ_z , σ_ρ гауссовского распределения, аппроксимирующего $q_f(\rho, z)$ при $E_0 = 5 \text{ keV}$, а радиус r_s сферы вычислялся из условия совпадения объемов областей генерации. Это дает:

$$a = 2\sigma_z = 0.072 \text{ мкм}, b = 2\sigma_\rho = 0.018 \text{ мкм}, r_s = a \cdot \eta^{2/3} = 0.026 \text{ мкм}.$$

Температурное поле было рассчитано для тока зонда $I = 100 \text{ нА}$, что соответствует полному тепловыделению в образце $P = I \cdot E_0 = 0.5 \text{ мВт}$.

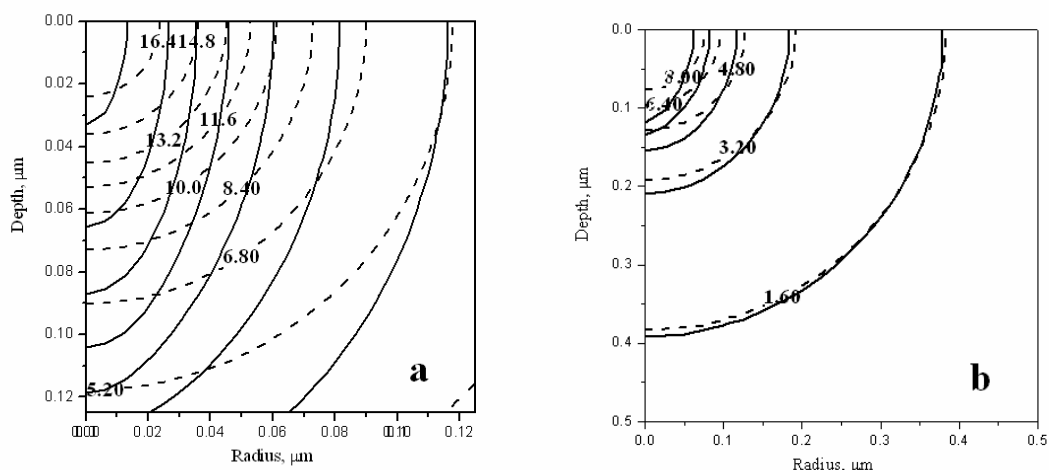


Рисунок 9.7 Сравнение изотерм температурного поля для источников полусферической (пунктирная линия) и полуэллиптической (сплошная линия) форм. Величины температур перегрева указаны на изотермах для полусферы и соответствуют величинам на изотермах для полуэллипсоида. На рисунке (а) представлена структура поля температуры в области источника, а на рисунке (b) – вдали от него. На рисунке (b) ясно прослеживается выход распределения температурного поля для полуэллиптического источника на значения для полусферического источника.

Из рисунка 9.7 видно, что разница в распределении температуры заметна лишь на расстояниях порядка a , а для расстояний, больших $3a$, она практически отсутствует.

Таким образом, отличие формы области тепловыделения от полусферической приводит к сравнительно небольшим изменениям максимальной температуры перегрева и температурного поля.

Для оценки точности аналитического решения, получаемого при аппроксимации источника тепла равномерной по объему полусферы генерацией, было проведено численное решение задачи. При этом использовалось распределение источников тепла для сфокусированного пучка, полученное на первом этапе.

Тепловая задача решалась методом конечных элементов. Значения максимальной температуры перегрева, $T_{\max}^{cal}$, полученные численным методом, приведены в таблице 9.7.

Обычно для оценки $T_{\max}$ в случае сфокусированного пучка используется формула (9.38) для полусферического источника с радиусом a , равным полному пробегу электронов R_0 . Плотность генерации тепла, q_0 , при этом вычисляется как отношение полной мощности P , выделенной в образце, к объему полусферы. Это приводит к

$$T_{\max}^1 = \frac{a^2 q_0}{2k} = \frac{3}{2\pi} \cdot \frac{P}{2ak}, \quad a = R_0 \quad (9.43)$$

Согласно работе [216], длина полного пробега R_0 электрона с энергией E_0 в веществе с плотностью $\tilde{\rho}$ имеет вид

$$R_0 = 0.0276 A E_0^{1.67} / Z^{0.889} \tilde{\rho} \quad (9.44)$$

Здесь E_0 измеряется в кэВ, A - в г/моль, $\tilde{\rho}$ - в г/см³, R_0 - в мкм, а Z - атомный номер мишени. Определенные таким образом длины пробега, как отмечено в [217], хорошо согласуются с данными, полученными из экспериментов по определению зависимости коэффициента прохождения от толщины пленки.

Для расчета пробега в GaN величина $\tilde{\rho}$ принималась равной 6.0 г/см³, а A и Z - 41.864 и 27. соответственно. Используя формулу (9.44), найдем, что величина a составляет 0.15 мкм, 0.48 мкм, 0.95 мкм для $E_0 = 5$ кэВ, $E_0 = 10$ кэВ, $E_0 = 15$ кэВ, соответственно.

Результаты оценки температуры $T_{\max}^1$ для этих энергий приведены в таблице 9.7. Из

	$E_0 = 5keV$	$E_0 = 10keV$	$E_0 = 15keV$
$T_{\max}^{cal}$	10.95	6.52	5.09
$T_{\max}^1$	6.08	3.82	2.90
$T_{\max}^2$	10.67	6.68	5.07

Таблица 9.7 Значения максимальной температуры перегрева в GaN, полученные при численном решении задачи ($T_{\max}^{cal}$) и рассчитанные по формулам (9.43), (9.44) ($T_{\max}^1$), (9.43), (9.45) ($T_{\max}^2$).

сравнения $T_{\max}^1$, $T_{\max}^{cal}$ видно, что такой способ оценки занижает значение максимальной температуры перегрева приблизительно вдвое. Это расхождение связано с пикообразной формой распределения тепловых источников, в силу чего полный пробег электронов не может быть выбран в качестве характерного размера области генерации тепла. Считая, что основное тепловыделение происходит в полусфере меньшего размера, найдем ее радиус из условия совпадения оценки (9.43) с $T_{\max}^{cal}$. Вследствие того, что отношение $T_{\max}^{cal} / T_{\max}^1$ слабо зависит от энергии, радиус полусферы можно выбрать в виде

$$a = 0.571 \cdot R_0 \quad (9.45)$$

Значения $T_{\max}^1$, рассчитанные с учетом (9.45), обозначены как $T_{\max}^2$ и также приведены в таблице. Видно, что такой выбор размера области генерации позволяет оценить максимальную температуру перегрева с ошибкой порядка 3%.

Интересно сравнить рассчитанное температурное поле с распределением (9.35), (9.36) для полусферического источника. Изотермы для этого случая приведены на рисунке 9.8а. Сравнение температурных полей для $E_0 = 5$ кэВ показывает, что максимальные отклонения распределения (9.35), (9.36) от рассчитанных значений не превосходят 60%. Значение

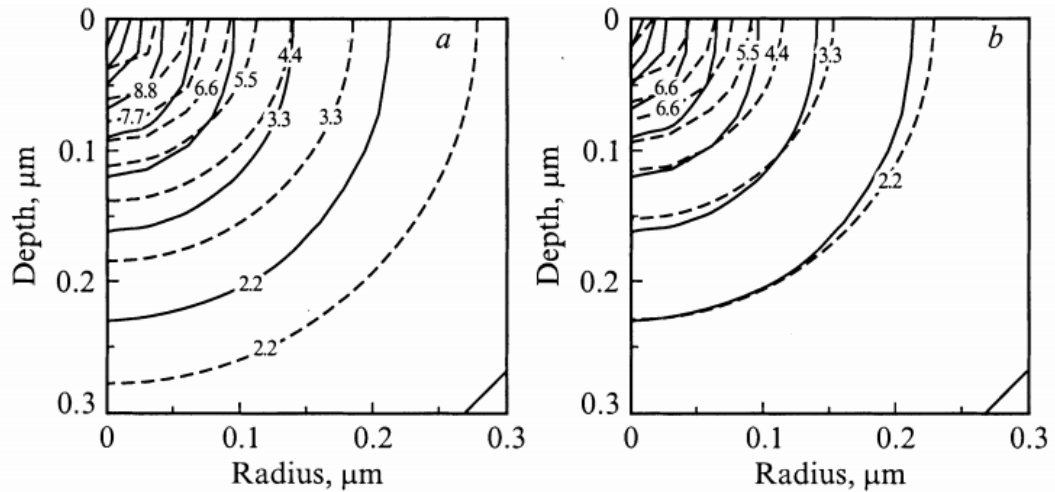


Рисунок 9.8 Сравнение изотерм численно найденного температурного поля с температурным полем полусферического источника для $E_0 = 5$ keV. Рисунок (а) соответствует мощности полусферического источника $P = I \cdot E_0 = 0.5$ мВт и не учитывает потери мощности из за обратного рассеяния электронов. На рисунке (b) мощность полусферического источника положена равной мощности тепловыделения, найденной интегрированием рассчитанного распределения плотности потерянной энергии.

температуры на больших расстояниях от начала координат для распределения (9.36) превышает рассчитанные значения приблизительно на 15%. Этот факт связан с тем, что полная мощность, выделенная в образце, принималась равной $P = I \cdot E_0 = 0.5$ мВт, и уменьшение этого значения за счет обратного рассеяния электронов не учитывалось. На рисунке 9.8b мощность полусферического источника положена равной мощности тепловыделения, найденной интегрированием рассчитанного распределения плотности потерянной энергии. Видно, что в этом случае температурные поля вдали от источника совпадают. Из рисунка 9.8 следует, что отличие распределения плотности генерации тепла от однородного распределения в полусфере сказывается лишь на расстояниях порядка

размера теплового источника, позволяя в то же время достаточно точно оценить максимальную температуру и размер области перегрева.

Результаты, полученные для сфокусированного пучка, представляют не только самостоятельный интерес, но могут быть использованы для оценки распределения температуры в случае пучка с конечным диаметром. Действительно, в силу линейности задачи температура в этом случае будет определяться формулой, аналогичной (9.25)

$$T(x, y, z) = \iint T_f(x - x_0, y - y_0, z) I_d(x_0, y_0) dx_0 dy_0, \quad (9.46)$$

где T_f - распределение температуры, возникающее в образце под действием сфокусированного пучка. Отметим также, что максимальное значение T_f дает оценку сверху для температуры перегрева в случае облучения образца пучком конечного диаметра.

Для пучков конечного диаметра область тепловыделения можно приблизить полуэллипсоидом, характерный размер $2b_d$ которого в поперечном сечении будет

$$2b_d = \sqrt{d^2 + (2b)^2} \quad (9.47)$$

где $2b$ - характерный поперечный размер источника тепла, генерированного сфокусированным пучком. Отношение полуосей эллипсоида η_d в этом случае определится выражением

$$\eta_d = \sqrt{(d/2a)^2 + \eta^2} \quad (9.48)$$

Для оценки максимальной температуры перегрева можно воспользоваться формулой (9.38) для полусферического источника с радиусом $R = R_d = a\eta_d^{2/3}$ и зависимостью $\tau(\eta_d) = T_{\max}^{el} / T_{\max}^{sp}$, приведенной на рисунке 9.6. При диаметрах пучка, существенно превышающих размеры области генерации, можно считать, что $b \approx a \approx R$ и $\eta_d = \sqrt{(d/2R)^2 + 1}$, $R_d = R^{1/3}(d/2)^{2/3}$. Это, в свою очередь, приводит к следующей формуле для максимальной температуры перегрева

$$T_{\max} = \tau(\eta_d) \cdot \frac{3P}{4\pi R^{1/3} (d/2)^{2/3} k} \quad (9.49)$$

Основные результаты проведенного исследования могут быть сформулированы следующим образом:

Форма области тепловыделения, возникающей в образцах GaN под действием сфокусированного пучка, отличается от полусферы, но этот факт не оказывает значительного влияния на максимальные температуры перегрева и температурное поле. Это влияние может оказаться существенным лишь при значительном различии характерных размеров источника

тепла в поперечном и продольном направлениях, что, например, может реализоваться при облучении образца широким пучком электронов небольшой энергии;

Оценка пространственного распределения стационарного температурного поля, возникающего в образце GaN под действием сфокусированного пучка, и максимальной температуры перегрева может быть получена при использовании аппроксимации плотности тепловых источников однородным распределением в полусфере. Выбор полного пробега электронов в качестве характерного размера области генерации приводит к значительной недооценке максимальной температуры перегрева. Уменьшение характерного размера области генерации в соответствии с соотношением (9.45) обеспечивает 3% точность определения максимальной температуры перегрева в широком диапазоне энергий электронного пучка. Максимальные отклонения распределения температурного поля для полусферического источника от рассчитанных значений не превосходят 60% для $E_0 = 5$ кэВ. Значение температуры на больших расстояниях от начала координат для полусферического источника превышает рассчитанные значения приблизительно на 15% вследствие пренебрежения обратным рассеянием электронов. Учет реальной мощности источника уменьшает это расхождение до 3%.

9.3 Ограничения на пространственное разрешение в комбинированной технике рентгено-электронного изображения

В этом параграфе изложены результаты проведенной нами в [218] оценки пространственного разрешения в методах изображения, базирующихся на рентгеновской фотоэмиссии. С момента первых опытов Рентгена и до сегодняшних дней одним из самых главных приложений рентгеновских лучей является получение рентгеновских изображений. Фундаментальная проблема рентгеновских изображений – гораздо худшее пространственное разрешение по сравнению с тем, которое обеспечивает электронная микроскопия. Это объясняется тем фактом, что рентгеновские лучи взаимодействуют с веществом значительно слабее, чем электроны, и, следовательно, объем их взаимодействия с веществом значительно больше. Пространственное разрешение приборов для регистрации рентгеновского изображения составляет десятки микрон. Наилучшей регистрирующей средой до сих пор остается высокоразрешающая рентгеновская пленка, которая обеспечивает пространственное разрешение порядка $0.4 \mu\text{m}$. Новые возможности появились в связи с развитием различных методов фокусировки рентгеновских лучей до субмикронного пятна. Наилучший результат – около 25-30 nm [219], и очень редко 15 nm [220]. Пространственное разрешение рентгеновских микроскопов ухудшается с ростом

энергии рентгеновских лучей и определяется в основном разрешением регистрирующей среды.

В этой ситуации может оказаться полезным конвертировать рентгеновские лучи в электроны, которые затем анализируются электронной оптикой, обеспечивающей пространственное разрешение порядка nm. Однако, как будет показано ниже, распространение электронов, генерированных рентгеном, является неизбежным фактором, который влияет на пространственное разрешение подобных методов. Основной вопрос, который рассматривается в настоящем параграфе, заключается в том, до какой степени изменяется пространственное разрешение, когда рентгеновские лучи конвертируются в электроны. Рентгеновские лучи поглощаются вблизи поверхности образца, генерируя различные группы электронов. Энергия рентгеновских лучей фиксируется на крае поглощения исследуемого материала, что обеспечивает появление низкоэнергетичных электронов. Эти электроны выходят из образца после прохождения очень тонкого приповерхностного слоя. Используя подходящие электронные линзы и фильтрующие системы фиксируют распределение интенсивности электронов, эмитированных с поверхности. Пространственное разрешение такой техники составляет около 30 nm (см., например, [221]).

Для оценки реального разрешения необходим глубокий анализ всего процесса фотоэмиссии, включающий получение ответов на два главных вопроса: каков электронный выход и каков размер пятна эмиссии электронов. Вообще говоря, мы ожидаем расплывания начального рентгеновского пятна засветки благодаря процессам диффузии фотоэлектронов, Оже-электронов и вторичных электронов до их выхода из образца.

В этом параграфе проводится детальное моделирование процесса электронной эмиссии в двух «модельных» материалах - Si и Au. Мы рассматриваем электронную эмиссию вблизи К-края Si ($E = 1.828 \text{ keV}$) и L_3 -края Au ($E = 11.923 \text{ keV}$), принимая во внимание все электроны. Такой выбор материалов позволяет нам проанализировать возможности техники изображения, базирующейся на преобразовании жестких рентгеновских лучей в низкоэнергетичные электроны, при различной энергии рентгена. Оказалось, что для корректной оценки интегральных характеристик фотоэмиссии необходимо учитывать не только фото- и генерированные ими вторичные электроны, но и Оже- электроны, появляющиеся в результате релаксации фотоионизованного атома.

Процедура моделирования

Как уже отмечалось в параграфе 9.1, процесс электронной эмиссии, индуцированный рентгеном, может быть разбит на три стадии: (1) – поглощение рентгеновского фотона

атомом и генерация первичных электронов, т.е. фотоэлектронов и других электронов, испущенных в ходе релаксации атома; (2) распространение первичных электронов в образце, сопровождаемое генерацией каскада вторичных электронов; (3) эмиссия части электронов с поверхности образца. Первая стадия полностью определяется сечениями взаимодействия рентгена с атомными оболочками и вероятностями флюоресцентных и Оже-переходов, в то время как для описания второй стадии необходимо использовать кинетическое уравнение. Это уравнение решалось численно с помощью разработанного нами пакета.

Моделирование индуцированной рентгеном электронной эмиссии начинается с симуляции процесса фотоионизации. Фотоионизация атомных оболочек вычисляется с использованием частичных сечений рентгеновского поглощения, приведенных в [222, 223]. Угловое распределение фотоэлектронов считается изотропным. Для описания процесса релаксации фотоионизованного атома использовались известные вероятности флюоресцентных [

224] и Оже-переходов [225, 226].

Транспорт электронов рассчитывался в рамках модели однократного рассеяния. В качестве дифференциального сечения упругого рассеяния было использовано сечение Мотта. Дифференциальные сечения неупругого рассеяния (точнее – дифференциальные средние длины свободного пробега по неупругим столкновениям – DIMFP) были взяты из разработанной нами базы данных <http://www.ioffe.rssi.ru/ES>. В расчете учитывались вторичные электроны, генерированные первичными в процессе неупругого взаимодействия со средой.

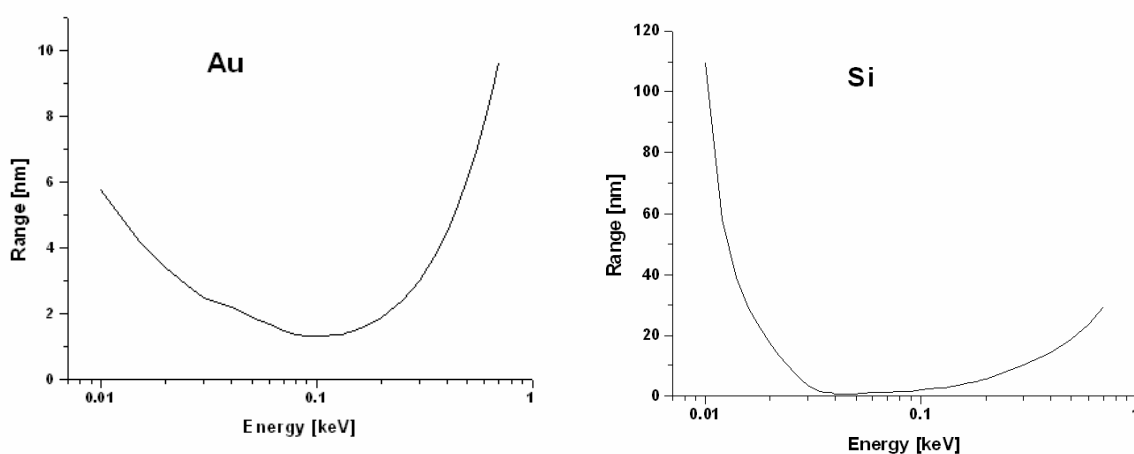


Рисунок 9.9 Зависимость полного пробега электронов от энергии для Au и Si.

Отметим, что похожая модель использовалась недавно для расчета энергетического распределения обратнорассеянных электронов в области энергий от упругого пика до пика вторичных электронов [227], причем было достигнуто впечатляющее согласие между рассчитанными и измеренными спектрами.

По рассчитанным в работе [165] значениям DIMFP нами были вычислены зависимости $s(E)$ для различных материалов. Длина полного пробега как функция энергии для Au и Si приведена на рисунке 9.9.

Моделирование с учетом фотоэлектронов и генерированных ими вторичных электронов

Для оценки размеров пятна эмиссии в качестве первого приближения мы учли только фотоэлектроны, имеющие начальную энергию ΔE , равную разности между энергией фотона и энергией края поглощения. Предполагалось, что каждый акт поглощения создает один электрон с энергией ΔE , который генерирует каскад вторичных электронов в процессе распространения в веществе. Вторичные электроны, в свою очередь, мигрируют в веществе, теряя энергию в неупругих столкновениях и рождая «третичные» электроны. В расчетах траектории электронов прослеживались до тех пор, пока их энергия не становилась ниже некоторой энергии обрезки E_c . На этом этапе не учитывались Оже-электроны, появляющиеся при релаксации ионизованного атома, и электроны, которые могут генерироваться при ионизации других оболочек.

Расчеты по определению радиуса пятна эмиссии и выхода эмиссии были выполнены для Si и Au. Энергия рентгеновских фотонов выбиралась на 100-500 eV выше K-края поглощения Si или L₃-края поглощения Au, соответственно. Выбор области значений ΔE , также как и области значений энергии обрезки $10 < E_c < 70$ eV, диктовался формой зависимости $s(E)$. В соответствии с нашими расчетами, полный пробег электрона, а, значит, и радиус пятна эмиссии, имеет минимальное значение при некоторой энергии $E_{\min}$, где $E_{\min} \approx 50$ eV для Si и $E_{\min} \approx 100$ eV для Au (см. рисунок 9.9). Поэтому для минимизации размеров эмиссионного пятна энергия электронов не должна сильно отличаться от $E_{\min}$.

В процессе моделирования мы прежде всего вычислили радиальное распределение эмитировавших электронов как функцию расстояния от точки падения рентгеновского пучка до точки выхода электрона. Более точно, была рассчитана величина $\rho(r) = dN / (2\pi r dr)$, представляющая собой отношение числа электронов dN , выходящих с поверхности образца в кольце радиуса r и ширины dr , к площади этого кольца. Были рассчитаны два ряда зависимостей $\rho(r)$:

а) при постоянной энергии обрезки $E_c = 10$ eV и различных начальных энергиях фотоэлектронов $\Delta E = 100, 150, 200, 250$ и 500 eV (см. рисунки 9.10 а,б);

б) при постоянной начальной энергии фотоэлектронов $\Delta E = 100$ eV и различных энергиях обрезки $E_c = 10, 30, 50$ и 70 eV (см. рисунки 9.11 а,б).

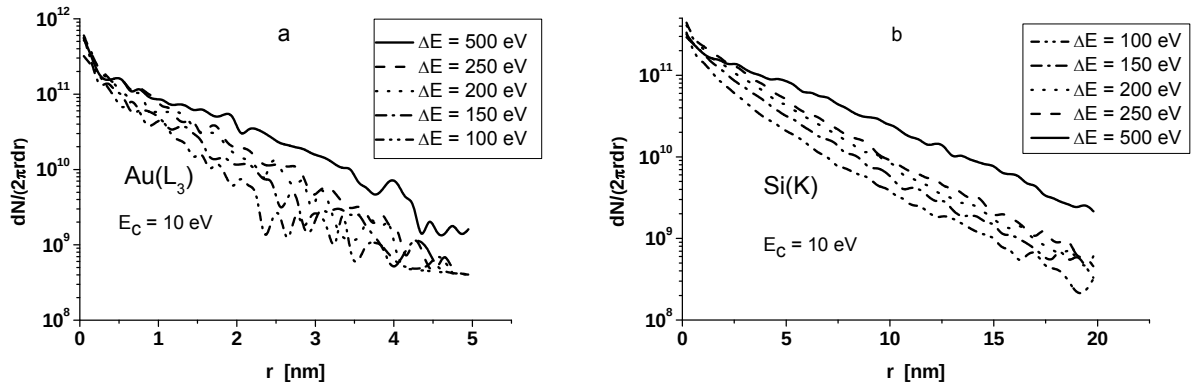


Рисунок 9.10 Радиальное распределение эмитировавших электронов при постоянной энергии обрезки $E_c = 10$ eV и пяти различных начальных энергиях фотоэлектронов $\Delta E = 100, 150, 200, 250$ и 500 eV: (а) для Au и (б) для Si.

Функции $\rho(r)$ демонстрируют быстрое убывание количества испускаемых электронов с ростом r , что ясно видно в логарифмическом масштабе. Как и ожидалось, радиальное распределение много шире в Si, чем в Au, вследствие того, что электрон быстрее теряет энергию в материалах с более высоким атомным номером.

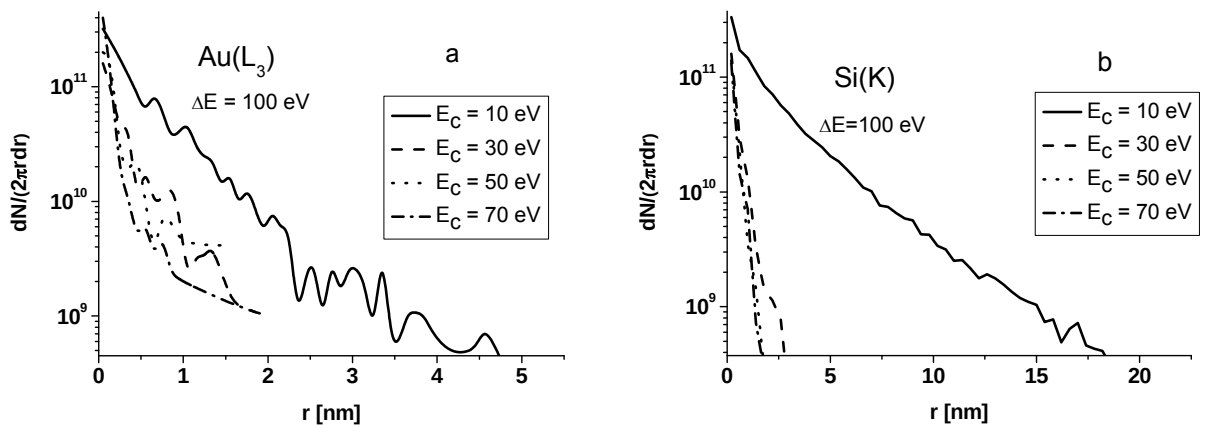


Рисунок 9.11 Радиальное распределение эмитировавших электронов при постоянной начальной энергии фотоэлектронов $\Delta E = 100$ eV и различных энергиях обрезки $E_c = 10, 30, 50$ и 70 eV (а) для Au и (б) для Si.

На основе полученного радиального распределения был определен радиус пятна эмиссии, r_e , как радиус круга, вклад от которого составляет половину полного количества эмитировавших электронов. Эта величина как функция начальной энергии фотоэлектрона, ΔE , представлена на рисунке 9.12 а,b. И в том и в другом материале значение r_e возрастает с ростом ΔE , поскольку более энергетичные электроны имеют больший пробег и проходят больший путь в материале мишени. Значение r_e растет от 1.0 до 1.7 nm в Au и приблизительно в той же пропорции - от 4.0 до 6.7 nm - в Si при росте начальной энергии фотоэлектрона от 100 до 500 eV. Зависимость r_e от энергии обрезки E_c дана на рисунке 9.13 а,b.

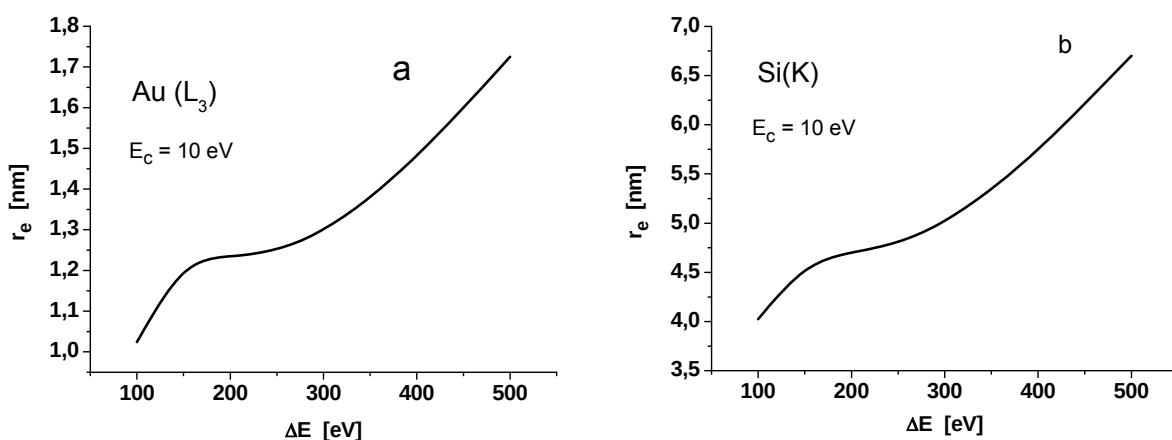


Рисунок 9.12 Зависимость радиуса пятна эмиссии, r_e , от начальной энергии фотоэлектронов ΔE (a) для Au и (b) для Si при энергии обрезки $E_c = 10$ eV.

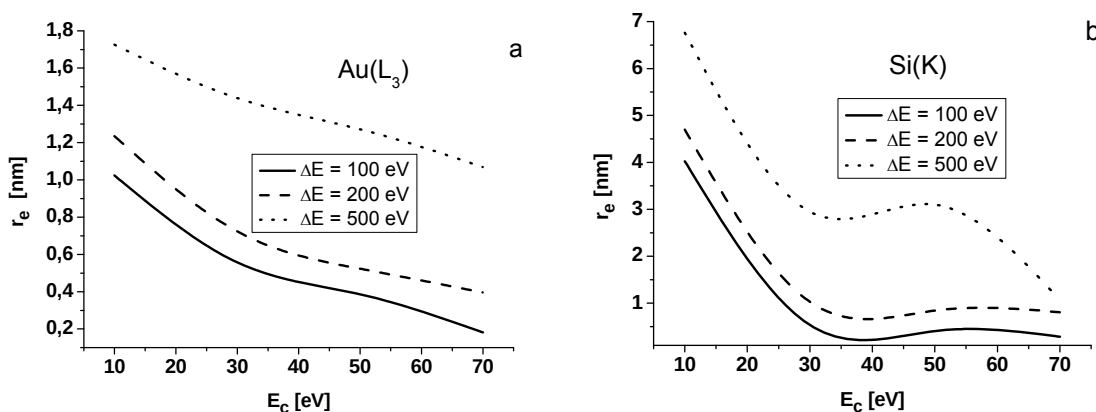


Рисунок 9.13 Зависимость радиуса пятна эмиссии, r_e , от энергии обрезки E_c при трех значениях начальной энергии фотоэлектронов ΔE (a) для Au и (b) для Si.

Заметим, что средняя энергия электронов, покидающих образец на расстоянии r от точки падения рентгеновского пучка, убывает с ростом r . По этой причине размер области эмиссии убывает с увеличением E_c , что и отмечено на рисунке 9.13.

Другим важным параметром является выход электронной эмиссии Y , который позволяет сделать заключение об осуществимости обсуждаемой техники рентгеновского изображения. Для расчета этого параметра мы проинтегрировали радиальную функцию

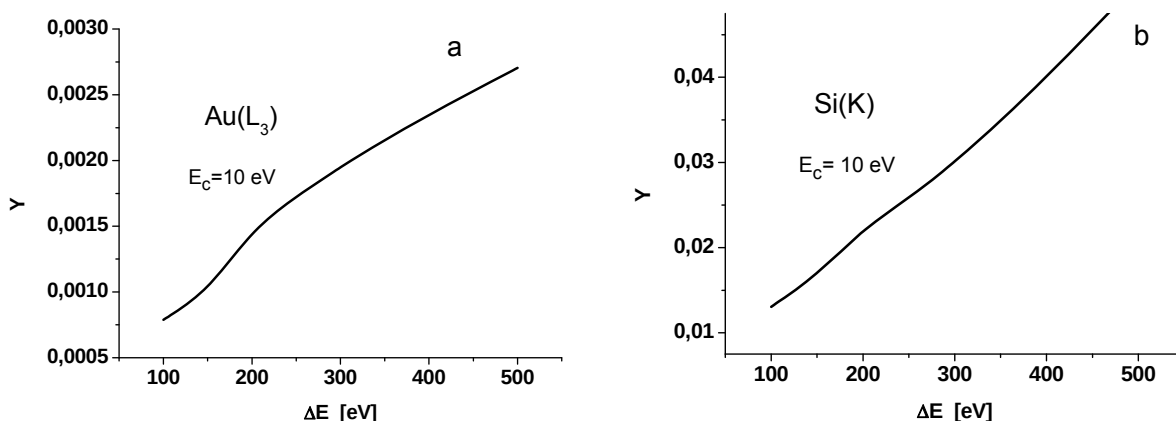


Рисунок 9.14 Зависимость выхода Y от начальной энергии фотоэлектронов ΔE при энергии обрезки $E_c = 10$ eV (a) для Au и (b) для Si.

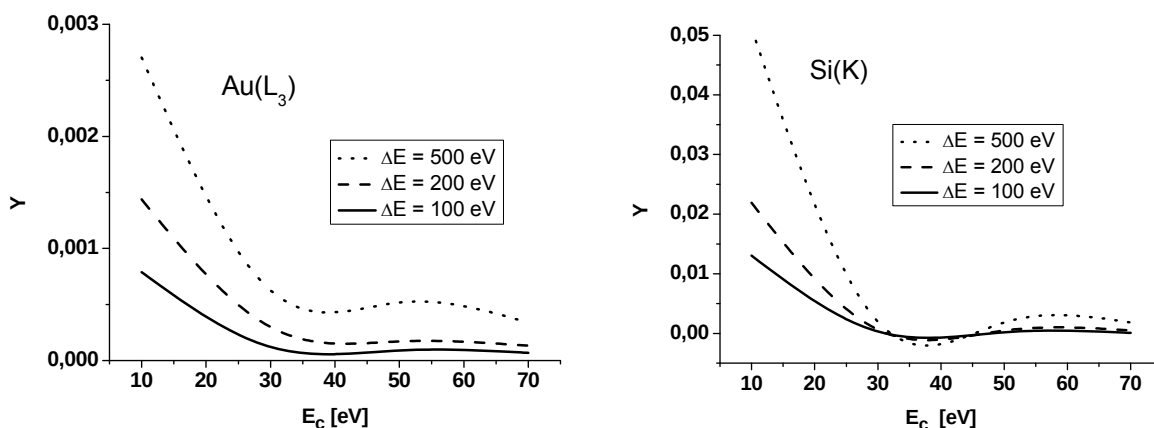


Рисунок 9.15 Зависимость выхода Y от энергии обрезки при трех значениях начальной энергии фотоэлектронов ΔE (a) для Au и (b) для Si.

распределения $\rho(r)$ по всей области эмиссии. Выход электронной эмиссии как функция начальной энергии фотоэлектрона ΔE при энергии обрезки $E_c = 10$ eV представлен на рисунке 9.14 a,b. Выход Y растет с ростом ΔE как для одного, так и для другого

материала, что отражает увеличение количества вторичных электронов, генерированных начальным фотоэлектроном. Грубо говоря, выход из Si примерно на порядок больше, чем из Au вследствие меньших энергетических потерь в легких элементах. Влияние энергии обрезки на выход электронов при нескольких значениях энергии фотоэлектронов показано на рисунке 9.15 a,b. Уменьшение Y с ростом E_c обусловлено отбрасыванием все большей части электронов, достигающих поверхности образца

Моделирование с учетом атомных релаксационных процессов

Для получения более реалистичных данных об электронной эмиссии необходимо учесть процессы фотоионизации других электронных оболочек и релаксацию атома, происходящую после акта фотоэмиссии. Эти процессы включают генерацию Оже-электронов, что, как будет показано ниже, значительно изменяет значения радиуса пятна эмиссии и выхода эмиссии. В этом разделе мы сравним эмиссионные характеристики, вычисленные для Si и Au с учетом только одной группы фотоэлектронов и с учетом всего каскада. В обоих случаях расчеты были выполнены для двух значений энергии рентгена, превышающих края поглощения на $\Delta E = 100$ и 500 eV, и двух значений энергии обрезки $E_c = 10$ и 70 eV. Были рассмотрены три модели процесса эмиссии электронов:

Модель 1. Преобразование рентгеновских лучей в одну группу фотоэлектронов (без учета атомной релаксации), имеющих энергию ΔE и генерирующих вторичные электроны. Регистрация выходящих электронов с энергиями в интервале между E_c и ΔE (как в предыдущем разделе).

Модель 2. Преобразование рентгеновских лучей в группу фотоэлектронов с последующим образованием электронов, обусловленным процессами релаксации ионизованного атома. Учет появления «флюоресцентных» электронов (т.е. электронов, испущенных в результате перепоглощения флюоресцентных фотонов) и вторичных электронов. Регистрация выходящих электронов с энергиями в интервале между E_c и ΔE .

Модель 3. Генерация электронов учитывается так же, как в Модели 2, однако регистрируются все выходящие электроны с энергиями выше E_c .

Параметры модели и результаты для Si

Для учета процессов фотоионизации и атомной релаксации необходимо прежде всего оценить вероятности генерации первичных электронов и их энергии. При моделировании эмиссии для Si были использованы пять электронных оболочек, а именно, 1s, 2s, 2p, 3s, и

Зр. Детали расчета коэффициентов фотопоглощения для индивидуальных оболочек могут быть найдены в [218].

Как показывает анализ, К-оболочка ионизуется с очень высокой вероятностью. Это означает, что главный вклад в электронную эмиссию дается К-фотоэлектронами и, как мы увидим ниже, Оже-электронами, появляющимися при релаксации дырки на К-оболочке. Энергии Оже-электронов, образующихся при релаксации дырки на более высокой оболочке, 2s, не превышают 140 eV, т.е. относительно малы. Их вклад в эмиссию является величиной того же порядка, что и вклад 1s-фотоэлектронов, который уже учитывается. Влияние этих электронов на радиус эмиссионного пятна незначительно, а количество их существенно меньше количества 1s-фотоэлектронов, в связи с чем эти Оже-электроны не учитываются в дальнейших вычислениях.

Вообще говоря, необходимо оценить вклад флюоресцентных рентгеновских фотонов в электронную эмиссию, т.к. эти фотоны могут иметь энергии, сравнимые с энергиями

	Модель 1	Модель 2	Модель 3
Энергетический интервал	(10 – 100) eV	(10 – 100) eV	> 10 eV
Радиус, r_e , nm	4.0	17.1	16.8
Выход, Y	0.013	0.105	0.115
Энергетический интервал	(70 – 100) eV	(70 – 100) eV	> 70 eV
Радиус, r_e , nm	0.3	1.5	14.1
Выход, Y	$1.44 \cdot 10^{-4}$	$2.46 \cdot 10^{-4}$	$9.6 \cdot 10^{-3}$
Энергетический интервал	(10 – 500) eV	(10 – 500) eV	> 10 eV
Радиус, r_e , nm	6.7	13.0	13.2
Выход, Y	$5.12 \cdot 10^{-2}$	$9.14 \cdot 10^{-2}$	$9.67 \cdot 10^{-2}$
Энергетический интервал	(70 – 500) eV	(70 – 500) eV	> 70 eV
Радиус, r_e , nm	2.8	5.5	11.6
Выход, Y	$1.86 \cdot 10^{-3}$	$2.05 \cdot 10^{-3}$	$7.45 \cdot 10^{-3}$

Таблица 9.8 Результаты моделирования радиуса пятна эмиссии, r_e , и электронного выхода, Y , при различных экспериментальных условиях в Si.

некоторых Оже-электронов. В соответствии с нашими расчетами вероятность испускания флюоресцентных рентгеновских фотонов много выше для 2p-1s перехода чем для 3p-1s перехода. Фотоны, возникающие в результате 2p-1s перехода, приводят к появлению новых фотоэлектронов с энергиями порядка 1.5 keV. Однако количество флюоресцентных фотонов на порядок меньше, чем количество 1p2p2р Оже-электронов. Кроме того, коэффициент поглощения для флюоресцентных фотонов приблизительно в восемь раз меньше коэффициента поглощения первичных фотонов. Все это позволяет заключить, что влияние флюоресцентных фотонов на полную электронную эмиссию незначительно и может не учитываться в дальнейших вычислениях. В соответствии с проведенными оценками при моделировании атомной релаксации достаточно учитывать только Оже-электроны, образованные в процессе аннигиляции дырки на К-оболочке.

Окончательные результаты моделирования радиуса эмиссионного пятна и электронного выхода для Si приведены в таблице 9.8. Первая колонка содержит данные, полученные для одной группы фотоэлектронов с энергией ΔE без учета атомной релаксации после фотоионизации (Модель 1). Вторая и третья колонки содержат данные, полученные при учете нескольких групп фотоэлектронов и, что важнее, электронов, генерированных в ходе атомной релаксации (Модель 2 и Модель 3, соответственно).

Наиболее важный вывод, который может быть сделан на основе анализа данных таблицы 9.8, заключается в том, что расчеты, основанные на учете только фотоэлектронов, дают ошибочно заниженное значение радиуса пятна эмиссии. Величина радиуса в этом случае оказывается в два раза меньшей для $\Delta E = 500$ eV и в 4-5 раз меньшей для $\Delta E = 100$ eV. Это означает, что радиус пятна эмиссии главным образом определяется Оже-электронами. Видно также, что уменьшение энергетического интервала ведет к уменьшению области эмиссии. Однако мы должны выбирать между уменьшением пятна эмиссии и приемлемым значением выхода. Для максимального значения выхода $Y \approx 0.1$, которое достигается при использовании Si как конвертора для преобразования рентгена в электроны, радиус эмиссионного пятна, а, следовательно, и пространственное разрешение рентгеновского изображения составляет приблизительно 17 nm.

Параметры модели и результаты для Au

Расчеты для Au были выполнены так же, как и для Si. Был проведен анализ вероятностей фотопоглощения для индивидуальных оболочек, вероятностей Оже- и радиационных переходов. При этом выяснилось, что L_3 -состояние ионизуется с достаточно высокой вероятностью 0.612. Поэтому главный вклад в электронную эмиссию дают L_3 – фотоэлектроны и Оже-электроны с энергиями между 6.2 и 7.5 keV, которые возникают при

релаксации L_3 -дырки. Энергия Оже-электронов, испущенных на более высоких уровнях, значительно меньше, и, следовательно, эти электроны не могут вызвать увеличения эмиссионного пятна.

Флюоресцентные фотоны, возникающие при радиационных переходах M_1 - L_3 , имеют энергии между 8.5 и 11.9 keV, и их количество сравнимо с количеством Оже-электронов. Коэффициент поглощения таких флюоресцентных фотонов лишь в два раза меньше, чем коэффициент поглощения начальных рентгеновских фотонов, поэтому их необходимо включить в процедуру моделирования фотоэмиссии.

С учетом основных электронных и радиационных переходов были рассчитаны радиус пятна эмиссии и электронный выход при тех же условиях (ΔE и энергии обрезки E_c), что и в случае Si. Результаты моделирования представлены в таблице 9.9. Основной вывод,

	Модель 1	Модель 2	Модель 3
Энергетический интервал	(10 – 100) eV	(10 – 100) eV	> 10 eV
Радиус, r_e , nm	1.02	33.2	34.7
Выход	$9.45 \cdot 10^{-4}$	$1.31 \cdot 10^{-2}$	$2.45 \cdot 10^{-2}$
Энергетический интервал	(70 – 100) eV	(70 – 100) eV	> 70 eV
Радиус, r_e , nm	0.23	25.5	31.4
Выход	$0.7 \cdot 10^{-4}$	$2.43 \cdot 10^{-4}$	$1.17 \cdot 10^{-2}$
Энергетический интервал	(10 – 500) eV	(10 – 500) eV	> 10 eV
Радиус, r_e , nm	1.69	27.8	33.6
Выход	$3.8 \cdot 10^{-3}$	$1.43 \cdot 10^{-2}$	$2.47 \cdot 10^{-2}$
Энергетический интервал	(70 – 500) eV	(70 – 500) eV	> 70 eV
Радиус, r_e , nm	0.97	22.6	34.9
Выход	$4.1 \cdot 10^{-4}$	$8.86 \cdot 10^{-4}$	$1.13 \cdot 10^{-2}$

Таблица 9.9. Результаты моделирования радиуса пятна эмиссии, r_e , и электронного выхода, Y , при различных экспериментальных условиях в Si.

который можно сделать из анализа данных таблицы 9.9, заключается в том, что использование только одной группы фотоэлектронов (Модель 1) занижает значение радиуса пятна эмиссии приблизительно в 20-100 раз. Поэтому для корректной оценки размера пятна эмиссии в случае Au совершенно необходимо моделирование с тщательным учетом Оже-электронов. При условии максимального выхода, который составляет $2.5 \cdot 10^{-2}$, пятно эмиссии имеет радиус около 30 nm. Это значение может служить оценкой разрешения рентгеновского изображения в том случае, когда для преобразования рентгена в электроны используется Au.

Из таблицы 9.9 видно, что сужение энергетического интервала, в котором регистрируются электроны, уменьшает размер области эмиссии. В то же время сама энергия обрезки не сильно влияет на радиус эмиссии. Это означает, что электроны различных энергий распределены приблизительно одинаково внутри пятна эмиссии. Это очевидно связано с тем фактом, что значительная часть выходящих медленных электронов генерируется первичными быстрыми электронами, которые уходят достаточно далеко от точки своего рождения. Из данных таблицы 9.9 также следует, что учет всех существенных групп электронов приводит к значительному увеличению полного электронного выхода.

Необходимо отметить, что толщина мишени, используемой для преобразования рентгеновских лучей в электроны, может влиять на пятно эмиссии и выход электронов. Мы рассмотрели этот эффект для Au и Si мишеней с толщинами 100, 50 и 20 nm. Результаты расчетов представлены в таблице 9.10. Как и ожидалось, уменьшение толщины приводит к уменьшению пятна эмиссии и выхода. Так, пятно эмиссии и выход для Au мишени с

	L=100nm	L=50nm	L=20nm
Si			
Радиус, r_e , nm	16.8	16.4	12.6
Выход	$1.04 \cdot 10^{-1}$	$9.9 \cdot 10^{-2}$	$6.4 \cdot 10^{-2}$
Au			
Радиус, r_e , nm	32.4	23.8	11.1
Выход	$2.42 \cdot 10^{-2}$	$1.81 \cdot 10^{-2}$	$8.6 \cdot 10^{-3}$

Таблица 9.10 Результаты расчета радиуса эмиссионного пятна, r_e , и выхода электронов, Y , для Au и Si мишеней с различной толщиной L (Модель 3). Начальная энергия фотоэлектронов $\Delta E = 100$, учитываются все электроны с энергией $E > 10 \text{ eV}$.

толщиной 20 nm составляют примерно одну треть их значений для полубесконечной мишени. Для Si тот же эффект оказывается не столь значительным.

Выводы

В этом параграфе рассмотрены ограничения на новую технику изображения, которая комбинирует облучение объекта квазипараллельным рентгеновским пучком с последующим преобразованием прошедших рентгеновских лучей в низкоэнергетичные электроны. С помощью детального моделирования процесса фотоэмиссии методом Монте-Карло мы прослеживали судьбу фотоэлектронов, генерированных после поглощения рентгеновского фотона с энергией, близкой к краю поглощения используемого для конверсии материала. Пространственное разрешение метода определяется размером области эмиссии электронов. Было обнаружено, что для надежной оценки необходимо учесть весь каскад электронов, связанный с процессом фотопоглощения. Главный вклад в увеличение области эмиссии дают Оже-электроны. Основываясь на этом факте мы вычислили радиус пятна эмиссии в двух различных случаях: облучение поверхности Si рентгеном с энергией вблизи К-края поглощения ($E = 1.828 \text{ keV}$) и облучение поверхности Au рентгеном с энергией вблизи L_{3--} -края поглощения ($E = 11.923 \text{ keV}$). При максимальном выходе электронов радиус эмиссионного пятна оказался равен 17 nm для Si и 35 nm для Au. Последнее значение близко к наилучшему разрешению, достигнутому в РЕЕМ на ELETTRA [228]. Повидимому во всех способах изображения, которые используют конверсию рентгена в электроны, пространственное разрешение будет ограничено 20-30 nm в результате распространения генерированных рентгеном электронов.

9.4 Метод Монте-Карло в задачах рентгеноспектрального микроанализа

Информация о распределении электронов зонда в мишени традиционно используется в рентгеноспектральном микроанализе для расчета распределения генерации рентгеновского излучения. Методики рентгеноспектрального микроанализа (РСМА) к настоящему времени хорошо отработаны и дают надежные результаты для однородных образцов и образцов типа «слой на подложке» в случае толстых слоев. Толщина слоя, анализируемого РСМА, зависит от энергии электронного зонда и может варьироваться от 50 nm до нескольких микрон. С ростом энергии электронов увеличивается глубина их проникновения, что позволяет анализировать все более глубокие слои. В настоящем параграфе рассматривается развитие методик РСМА для определения профиля концентрации исследуемого элемента в приповерхностном слое и отыскания концентрации элемента в тонких (нанометровых) слоях в составе многослойных структур на основе метода вариации энергии электронного зонда.

Послойный рентгеноспектральный микроанализ полупроводниковых структур методом вариации энергии электронного зонда

При разработке различных технологических процессов создания полупроводниковых структур, таких как имплантация, диффузия, эпитаксия, возникает необходимость определения профиля концентрации компонентов, т.е. послойного анализа, в приповерхностном слое глубиной 0,1-1,0 мкм. Одним из наиболее перспективных неразрушающих методов анализа для решения этой задачи является рентгеноспектральный микроанализ (РСМА). Нами была предложена методика послойного анализа, основанная на вариации энергии электронного зонда с последующей математической обработкой полученных результатов [229]. В качестве модельных распределений рассматривалось распределение Гаусса и ступенчатое распределение (постоянная концентрация внутри слоя с резкими границами).

При математической обработке экспериментальных данных использовались результаты численного моделирования плотности генерации характеристического рентгеновского излучения $\varphi(z, E_0)$ по методу Монте-Карло. При этом предполагалось, что концентрация исследуемого элемента достаточно мала и не оказывает влияния на транспорт электронов в образце. Величина $\varphi(z, E_0)$ описывает число фотонов, испускаемых в единицу времени на глубине z , при облучении образца электронами с энергией E_0 и определяется следующим образом:

$$\varphi(z, E_0) = N \int_{E_k}^{E_0} \psi(E, z) \sigma_k(E) W_{kl} dE, \quad \psi(E, z) = \int \Psi(E, \vec{r}, \vec{\Omega}) dx dy d\vec{\Omega}. \quad (9.50)$$

Здесь $\sigma_k(E)$ – сечение ионизации атомной оболочки электроном, E_k – энергия связи атомной оболочки, $\Psi(E, \vec{r}, \vec{\Omega})$ – дифференциальная плотность потока электронов с энергией E в точке $\vec{r}$ в направлении $\vec{\Omega}$, N – концентрация атомов исследуемого элемента, W_{kl} – вероятность заполнения ионизованной внутренней оболочки с излучением характеристического фотона. Обычно рассматривается $\varphi(z, E_0)$, нормированная на излучение, генерируемое в тонком изолированном слое. При генерации в тонком изолированном слое энергия электронов равна E_0 , электроны считаются нерассеянными, плотность потока электронов есть $\psi(E, z) = \delta(E - E_0)$ и

$$\varphi_0(z, E_0) = N_0 \int_{E_k}^{E_0} \psi(E, z) \sigma_k(E) W_{kl} dE = N_0 \sigma_k(E_0) W_{kl}. \quad (9.51)$$

Если считать, что концентрация атомов в образце N постоянна и равна концентрации N_0 в тонком изолированном слое, то нормированная плотность генерации принимает вид:

$$\varphi_{\text{hom}}(z, E_0) = \frac{1}{\sigma_k(E_0)} \int_{E_k}^{E_0} \psi(E, z) \sigma_k(E) dE . \quad (9.52)$$

Если концентрация атомов зависит от z , $N = N(z)$, то

$$\begin{aligned} \varphi(z, E_0) &= N(z) \int_{E_k}^{E_0} \psi(E, z) \sigma_k(E) W_{kl} dE = \sigma_k(E_0) W_{kl} N(z) \frac{1}{\sigma_k(E_0)} \int_{E_k}^{E_0} \psi(E, z) \sigma_k(E) dE = \\ &= N(z) \sigma_k(E_0) W_{kl} \varphi_{\text{hom}}(z, E_0) . \end{aligned} \quad (9.53)$$

Вклад в измеренную интенсивность рентгеновского излучения от элементарного слоя dz единичной площади, расположенного на глубине z , с учетом поглощения рентгеновского излучения в образце определяется соотношением

$$dI(z) = N(z) \sigma_k(E_0) W_{kl} \varphi_{\text{hom}}(z, E_0) \exp\left(-\int_0^z \mu(\tau) d\tau / \cos \gamma\right) dz . \quad (9.54)$$

Здесь $\mu(z)$ - линейный коэффициент поглощения измеряемой характеристической линии, γ - угол между нормалью к поверхности и направлением на детектор. Полная интенсивность рентгеновского излучения может быть получена интегрированием по глубине. При энергии зонда E отношение интенсивности спектральной линии исследуемого элемента к интенсивности излучения от эталона описывается уравнением:

$$K(E) = \frac{\int_0^\infty N(z) \cdot \varphi_{\text{hom}}(z, E) \exp\left(-\int_0^z \mu(\tau) d\tau / \cos \gamma\right) dz}{N_{st} \int_0^\infty \varphi_{\text{hom}}^{st}(z, E) \exp(-\mu_{st} z / \cos \gamma) dz} \quad (9.55)$$

Здесь N_{st} - концентрация атомов исследуемого элемента в эталоне, $\varphi_{\text{hom}}^{st}(z, E)$ - распределение плотности генерации рентгена по глубине в эталоне, μ_{st} - линейный коэффициент поглощения измеряемой линии в эталоне. Соотношение (9.55) представляет собой интегральное уравнение Фредгольма первого рода относительно $N(z)$, и, следовательно, восстановление концентрации из него является некорректной задачей. Однако эта задача может быть регуляризована, если имеется априорная информация относительно функции $N(z)$, в частности, если делается предположение о форме зависимости $N(z)$. Такого рода предположения обычно можно сделать, имея информацию о технологии изготовления образца или данные других исследований. Если форма зависимости концентрации от глубины выбрана, и она зависит от некоторого количества параметров, то эти параметры могут быть найдены, например, минимизацией суммы

квадратов отклонений значений $K(E)$, рассчитанных по (9.55), от экспериментально найденных значений.

Описанный алгоритм был применен для исследования образцов SiC после имплантации в них Al с последующим отжигом и без него. Измерения проводились на микроанализаторе “Camebax” французской фирмы “Cameca”. Энергия электронного зонда изменялась от 2 до 15 кэВ. Измерялась относительная интенсивность характеристической K_{α} линии алюминия. При измерениях эталоном служил достаточно толстый однородный эпитаксиальный слой AlGaAs известного состава, и затем относительная интенсивность пересчитывалась на чистый эталон. Применение металлического алюминия в качестве эталона в данном случае невозможно, т.к. образующаяся на нем окисная пленка вносит существенную погрешность в измерения, особенно при энергиях меньших 5 кэВ. При энергиях больших 5 кэВ использовались стандартные режимы измерений: ток зонда 10-20 нА, время счета импульсов 20-50 сек. При уменьшении энергии зонда интенсивность излучения уменьшается, при этом резко ухудшается статистическая точность измерения, контрастность и чувствительность анализа. Улучшение этих параметров достигалось за счет увеличения тока до 50 нА, и времени счета в каждой анализируемой точке до 100 сек. Фон измерялся на образцах SiC, не содержащих анализируемого элемента Al. Полученные в результате измерений данные представлены в таблице 9.11.

Энергия зонда (keV)	Образец без отжига				Образец после отжига			
	Относительная интенсивность			Экспер. погрешность	Относительная интенсивность			Экспер. погрешность
	Эксперимент	Расчет, мод. (9.56)	Расчет, мод. (9.57)		Эксперимент	Расчет, мод. (9.56)	Расчет, мод. (9.57)	
2	.0035	.0004	.0031	.001	.0064	.0054	.0063	.001
2.5	.0061	.0054	.0061	.0006	.0079	.0092	.0081	.001
3	.01	.012	.0103	.001	.01	.0106	.0098	.001
4	.022	.0231	.0222	.002	.013	.0119	.0131	.002
5	.03	.0282	.0294	.002	.0141	.0123	.0142	.002
6	.03	.0283	.0295	.002	.0133	.0118	.0131	.002
7	.025	.0253	.0259	.002	.011	.0106	.0111	.002
8	.022	.0212	.0212	.002	.0091	.0090	.009	.001
9	.018	.0174	.0172	.002	.0071	.0074	.0073	.001
10	.0134	.0142	.014	.002	.006	.0061	.0059	.001
11	.011	.0112	.0114	.001	.005	.0051	.0049	.001
12	.0097	.0098	.0095	.001	.0045	.0043	.0041	.001

Таблица 9.11 Относительная интенсивность излучения K_{α} линии Al из образцов SiC после имплантации в них Al с последующим отжигом и без него.

Распределение плотности генерации рентгена по глубине $\varphi_{\text{hom}}(z, E)$ рассчитывалось методом Монте-Карло в модели однократного рассеяния. В качестве дифференциального сечения упругого рассеяния использовалось рассчитанное нами сечение Мотта из базы данных <http://www.ioffe.rssi.ru/ES>. Неупругое взаимодействие электрона с веществом описывалось дифференциальным сечением неупругого рассеяния, найденным из оптических данных с помощью диэлектрического подхода (база данных <http://www.ioffe.rssi.ru/ES>), или, в случае отсутствия оптических данных, с помощью аналитической аппроксимации (8.15) (см. главу 8). На рисунке 9.16 представлены распределения $\varphi_{\text{hom}}(z, E) \exp(-\mu z) / \cos \gamma$, описывающие эмиссию рентгеновского излучения с глубины z с учетом поглощения в образце. Приведенные на рисунке зависимости рассчитаны для K_α линии алюминия в SiC и в чистом Al, $\gamma = 50^\circ$. Сопоставляя их с экспериментальными данными, приведенными в таблице 9.11, можно заключить, что в образцах SiC алюминий распределен в слое приблизительно между 0.02 и 0.2 μm и что после отжига распределение концентрации приближается к однородному. Эти предварительные выводы ниже будут уточнены с помощью численного решения уравнения (9.55).

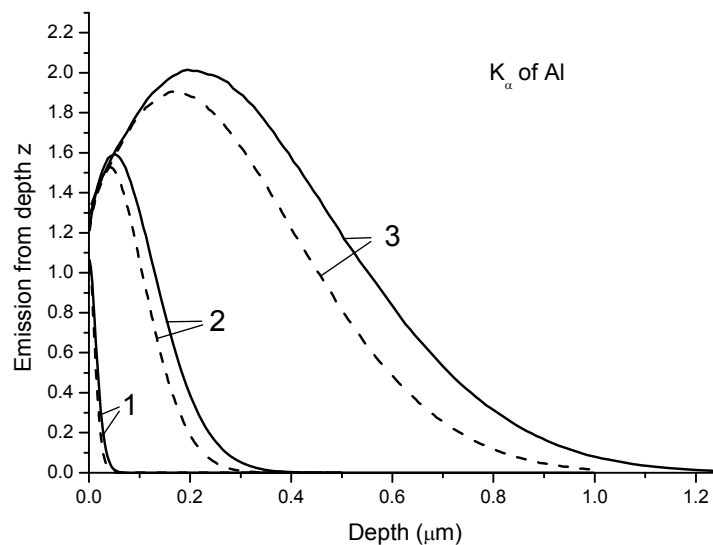


Рисунок 9.16 Распределение эмиссии K_α -линии алюминия по глубине с учетом поглощения в образцах SiC (пунктирная линия) и Al (сплошная линия). Энергия электронного зонда $E_0 = 2$ (1), 5 (2) и 10 (3) keV.

Технология изготовления исследуемого образца дает возможность сделать предположение о форме зависимости $N(z)$. Так, известно, что в процессе имплантации

образуется распределение концентрации имплантированного элемента по глубине, близкое к распределению Гаусса. После отжига распределение концентрации по глубине выравнивается в результате диффузии, и в пределах некоторого слоя концентрацию можно считать постоянной. Исходя из этого, для образцов SiC с имплантированным в них Al в качестве модельных распределений концентрации $N(z)$ были выбраны однородное распределение внутри слоя и распределение Гаусса. Концентрация Al в обоих случаях описывается тремя параметрами. В случае однородного распределения внутри слоя

$$N(z) = N_{AB} \theta(z - z_A) \cdot \theta(z_B - z), \quad (9.56)$$

где $\theta(z)$ – ступенчатая единичная функция, параметрами являются z_A , z_B – положение левой и правой границы слоя и N_{AB} – концентрация Al в слое. Во втором случае предполагалось, что концентрация Al имеет вид

$$N(z) = N_m \exp\left(-(z - z_m)^2 / 2\sigma^2\right). \quad (9.57)$$

Параметрами здесь являются положение максимума z_m , концентрация в максимуме N_m и дисперсия σ^2 .

Распределения (9.56), (9.57) подставлялись в уравнение (9.55) и параметры z_A , z_B , N_{AB} или z_m , N_m , σ определялись численно минимизацией целевой функции

$$\chi^2 = \frac{1}{(N - p)} \sum_{k=1}^N \left(\tilde{K}(E_k) - K(E_k; \vec{P}) \right)^2 / \tilde{\sigma}_k^2. \quad (9.58)$$

Здесь E_k – значения энергии электронного зонда в эксперименте, $\tilde{K}(E_k)$ – относительные интенсивности рентгеновского излучения, измеренные в эксперименте, $K(E; \vec{P})$ – те же интенсивности, рассчитанные для модельных распределений, $\vec{P}$ – массив значений параметров распределения, $\tilde{\sigma}_k^2$ – дисперсии экспериментальных данных, N – число экспериментальных точек по энергии, p – число параметров ($p = 3$). В случае распределения (9.56) $P = (N_{AB}, z_B, z_A)$, а в случае распределения (9.57) $P = (z_m, N_m, \sigma)$.

Распределение экспериментальных ошибок считалось нормальным, приведенные в таблице 9.11 значения погрешностей считались равными $\pm 1.66\tilde{\sigma}_k$.

Минимизация осуществлялась методом деформируемого многогранника (метод Нелдера-Мида) [230]. Начальные значения параметров при минимизации задавались с учетом предварительного анализа кривых, приведенных на рисунке 9.16. Однако чтобы убедиться, что найденный минимум является глобальным, в каждом случае проводилась минимизация с различными начальными значениями параметров для проверки сходимости к

одним и тем же значениям. Оптимальные значения параметров и соответствующие им значения целевой функции χ^2 приведены в таблице 9.12.

	Параметр распределения	Образец без отжига		Образец после отжига	
		Значение параметра	Погрешность	Значение параметра	Погрешность
«Ступенька»	$N_{AB}, \text{см}^{-3}$	2.91E+21	1.5E+20	9.91E+20	8.4E+19
	$z_A, \mu\text{м}$	0.037	0.002	0.011	0.003
	$z_B, \mu\text{м}$	0.22	0.015	0.247	0.036
	Значение χ^2	5.613		1.455	
Гауссиан	$N_m, \text{см}^{-3}$	4.78E+21	2.6E+20	1.59E+21	1.4E+20
	$z_m, \mu\text{м}$	0.12	0.004	0.105	0.007
	$\sigma, \mu\text{м}$	0.044	0.001	0.060	0.004
	Значение χ^2	0.353		0.118	

Таблица 9.12 Параметры распределений (9.56), (9.57) для Al, имплантированного в SiC, с последующим отжигом и без него.

Погрешности определения параметров оценивались с помощью вторых производных целевой функции в точке минимума.

Распределения концентрации (9.56), (9.57) с параметрами, определенными минимизацией целевой функции (9.58), представлены на рисунке 9.17. На том же рисунке приведено распределение по глубине концентрации Al в исследуемых образцах, полученное с помощью ВИМС (вторично-ионной масс-спектрометрии). Значение максимальной концентрации в образце, не подвергавшемся отжигу, практически совпадает с оптимальным значением N_m в распределении (9.57). Положение максимума близко к максимуму истинного распределения, расстояние между ними составляет $\sim 0.01 \mu\text{м}$, то есть менее 10% от значения координаты максимума. Правый склон распределения (9.57) для первого образца сдвинут вправо на 10÷15% по сравнению с данными ВИМС. Для образца после отжига значение параметра N_{AB} в распределении (9.56) отличается от концентрации на плоском участке распределения по данным ВИМС приблизительно на 10%. Левая граница распределения (9.56) почти совпадает с левой границей истинного распределения. Правый склон распределения (9.57) сдвинут относительно истинного распределения, в среднем, примерно на 10%. Сравнение с данными ВИМС позволяет предположить, что наиболее адекватным способом описания профиля концентрации в образцах, подвергнутых отжигу, было бы сочетание распределений (9.56) и (9.57).

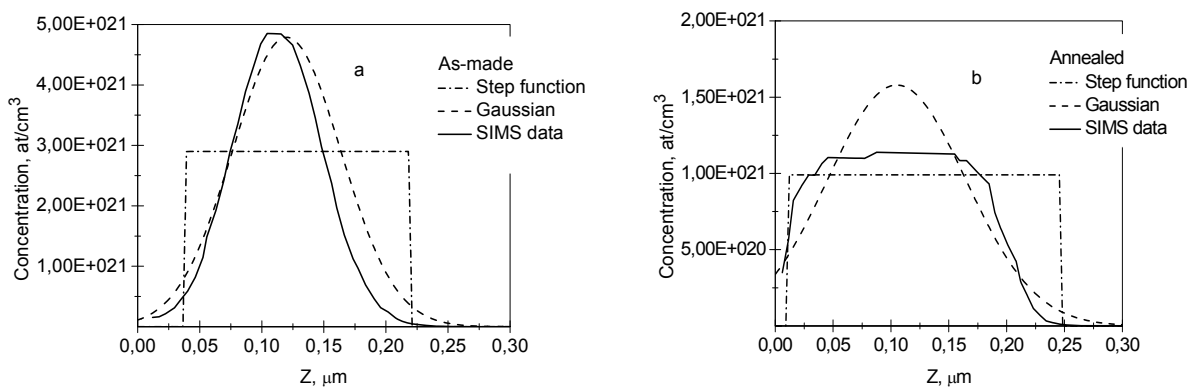


Рисунок 9.17 Распределение концентрации Al по глубине в образцах SiC после имплантации (a) и последующего отжига (b). Пунктирная кривая – расчет для модельного распределения (9.56), штрих-пунктирная кривая – расчет для модельного распределения (9.57), сплошная кривая – данные ВИМС.

Проанализируем значения χ^2 , приведенные в Таблице 9.12. В образце, не прошедшем отжиг, значение χ^2 для однородного распределения в слое существенно больше, чем для распределения Гаусса. Это отражает тот факт, что распределение концентрации в этом случае по форме ближе к распределению Гаусса. Для образца, прошедшего отжиг, значение χ^2 для однородного распределения в слое значительно уменьшается, что коррелирует с данными ВИМС, согласно которым распределение концентрации выравнивается внутри некоторой области.

Таким образом, предложенная методика послойного микроанализа структур, основанная на вариации энергии электронного зонда, позволяет оценивать параметры распределения элементов по глубине исследуемого образца. Полученные результаты хорошо согласуются с данными других методов анализа (ВИМС, растровая и просвечивающая электронная микроскопия). Возможность быстрого определения распределения концентрации исследуемого элемента без разрушения образцов дает возможность контролировать технологические процессы получения сложных полупроводниковых структур.

Рентгеноспектральный микроанализ гетероструктур с наноразмерными слоями

Создание новых материалов с наноразмерными слоями приводит к необходимости определения состава этих слоев и их расположения в структуре. Так, например, свойства лазерных и светодиодных гетероструктур с наноразмерными слоями на основе твердых растворов III-V и II-VI в значительной степени определяются составом слоев, но

определение концентрации компонентов в таких структурах представляет значительную сложность. Отсутствие однозначной зависимости ширины запрещенной зоны и параметра решетки от состава слоя не позволяет использовать для измерения состава методы, основанные на определении этих величин [231]. Особенности использования рентгеноспектрального микроанализа для диагностики наноразмерных слоев по сравнению со случаем однородных образцов и толстых слоев связаны с тем, что в этом случае толщины анализируемых структур значительно меньше области возбуждения аналитического рентгеновского излучения. В настоящее время разработаны методики микроанализа состава тонких металлических пленок на подложке с использованием моделирования по методу Монте-Карло [232–236]. Однако исследования тонких слоев в полупроводниках до настоящего времени не проводились.

Нами предложена методика микроанализа тонких нанометровых слоев в составе многослойных гетероструктур, основанная на учете распределения рентгеновского излучения по глубине многослойного образца и его зависимости от энергии электронного зонда [237]. Расчет распределений для анализируемых материалов, включая многослойные гетероструктуры, проводится методом Монте-Карло с помощью разработанных нами программных пакетов. Искомая концентрация определяется из измеренных значений относительной интенсивности аналитического рентгеновского излучения с использованием данных о толщине анализируемого слоя и глубине его залегания. Обязательным для анализа таких структур является отсутствие анализируемых элементов, определяющих состав слоев, в окружающих областях. Исследуемые слои имеют толщину 2-50 нм, что значительно меньше размеров области торможения электронов и генерации рентгеновского излучения, поэтому при микроанализе мы можем определить лишь суммарное количество определяемых атомов - произведение искомой концентрации на толщину слоя. Таким образом, для расчета концентрации необходимо задать толщину слоя. Наиболее точным методом оценки толщины для рассматриваемых структур является просвечивающая электронная микроскопия (ПЭМ). Если проводить измерения при нескольких значениях энергии электронов, то возможно одновременное определение состава и глубины залегания слоя в составе гетероструктуры.

Разработанная нами методика микроанализа наноразмерных слоев в многослойных гетероструктурах заключается в следующем. Методом Монте-Карло проводится расчет распределения анализируемого рентгеновского излучения по глубине для различных гетероструктур, разных аналитических линий и энергий электронов. Как уже отмечалось выше, распределение характеристического излучения по глубине описывается функцией $\varphi(z, E)$, которая равна числу фотонов, испускаемых в единицу времени атомом на глубине z ,

при облучении образца электронами с энергией E . Область генерации рентгеновского излучения и зависимость $\varphi(z, E)$ от глубины при различных энергиях электронного пучка приведены на рисунке 9.18.

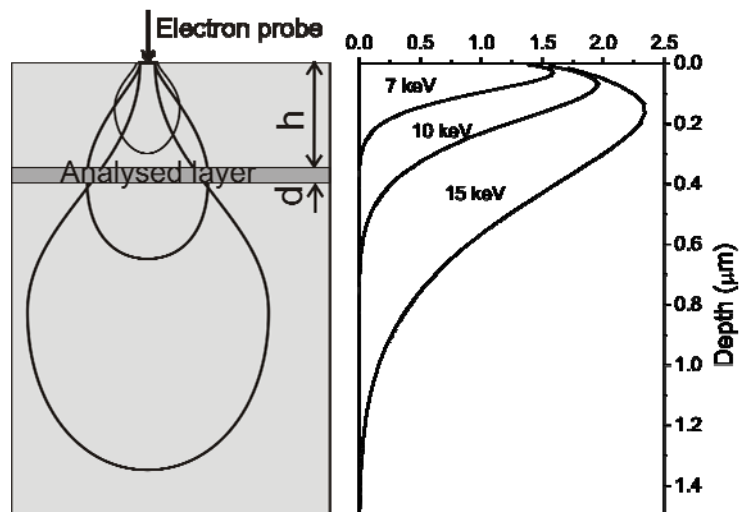


Рисунок 9.18 Область генерации рентгеновского излучения и зависимость $\varphi(z, E)$ от глубины при различных энергиях электронного пучка

Функция $\varphi(z, E)$ связана с экспериментально измеряемым К-отношением (отношением интенсивности сигнала от исследуемого образца к интенсивности сигнала от эталона) выражением (9.55). Для рассматриваемых нами слоистых структур все характеристики постоянны внутри каждого слоя. Учитывая, что анализируются тонкие слои, с толщиной много меньшей характерной глубины области генерации, можно заменить (9.55) более простым выражением

$$K(E) = \frac{Nd_0\varphi_{\text{hom}}(z_0, E)\exp\left(-\sum_{i=1}^{n_l}\mu_i d_i/\cos\gamma\right)}{N_{st}\int_0^{\infty}\varphi_{\text{hom}}^{st}(z, E)\exp(-\mu_{st}z/\cos\gamma)dz}. \quad (9.59)$$

Здесь z_0 - глубина залегания анализируемого слоя, d_0 - его толщина, n_l - число слоев, лежащих ближе к поверхности, чем анализируемый слой, μ_i и d_i - линейные коэффициенты поглощения и толщины этих слоев. При известных K , d_i и μ_i из (9.59) легко определить $\chi = N/N_{st}$ - отношение концентраций атомов анализируемого элемента в исследуемом образце и в эталоне

$$\chi = \frac{1}{d_0} g(z_0, E), \quad g(z_0, E) = \frac{K(E) \int_0^{\infty} \varphi_{\text{hom}}^{st}(z, E) \exp(-\mu_s z / \cos \gamma) dz}{\varphi_{\text{hom}}(z_0, E) \exp\left(-\sum_{i=1}^{n_i} \mu_i d_i / \cos \gamma\right)} \quad (9.60)$$

Концентрация атомов N , измеряемая в см^{-3} , связана с молярной концентрацией анализируемого элемента x в соединении $A_x B_{1-x} C$ соотношением

$$x = \frac{N}{N_C} = \frac{\chi N_{st}}{N_C} = \frac{(xW_A + (1-x)W_B + W_C)}{\rho} \chi \frac{x_{st} \rho_{st}}{M_{st}}. \quad (9.61)$$

Здесь N_C - концентрация элемента C в слое, ρ и ρ_{st} - плотности слоя и эталона, $W_{A,B,C}$ - атомные веса элементов A , B и C , M_{st} - молекулярный вес эталона, x_{st} - молярная концентрация анализируемого элемента в эталоне. Считая, что плотность твердых растворов меняется в зависимости от состава по линейному закону $\rho = x\rho_{AC} + (1-x)\rho_{BC}$, где ρ_{AC} и ρ_{BC} - плотности соединений AC и BC , образующих твердый раствор, получаем квадратное уравнение для определения x :

$$x(x\rho_{AC} + (1-x)\rho_{BC}) - (xW_A + (1-x)W_B + W_C) \chi \frac{x_{st} \rho_{st}}{M_{st}} = 0. \quad (9.62)$$

При этом величина x , так же, как и χ , будет зависеть от z_0 и E . Очевидно, что под C в формулах (9.61), (9.62) может пониматься и комплекс элементов – по смыслу это все элементы анализируемого слоя кроме B .

Если глубина залегания анализируемого слоя известна, для определения состава достаточно измерений при одном, оптимальном, значении энергии электронов. Оптимальной для определения концентрации является энергия электронов, при которой максимум распределения излучения совпадает с глубиной залегания слоя. При таких энергиях минимально влияние неточностей формы распределения характеристического излучения по глубине на результат. Кроме того, при этой энергии расчетная концентрация слабо зависит от используемой при ее определении глубины (в некотором диапазоне), поэтому минимизируются ошибки, связанные с погрешностью определения глубины слоя.

Отметим, что при математической обработке экспериментальных данных определяется величина произведения концентрации элемента в слое на толщину слоя. Концентрация элемента может быть рассчитана только, если известна толщина, причем относительная ошибка расчета концентрации равна относительной ошибке определения толщины слоя.

Для одновременного определения состава и глубины залегания слоя используется метод вариации энергии электронов. Фиксируя энергию электронов, мы получаем

зависимость $x = x(z_0; E)$, определяемую уравнением (9.62). Семейство таких зависимостей, соответствующее различным энергиям, имеет общую точку, определяемую истинными значениями x и z_0 . Эта ситуация иллюстрируется на рисунке 9.19. Отметим, что для минимизации погрешности определения z_0 необходимо проводить измерения при энергиях, которым соответствует большой градиент плотности генерации на глубине расположения слоя.

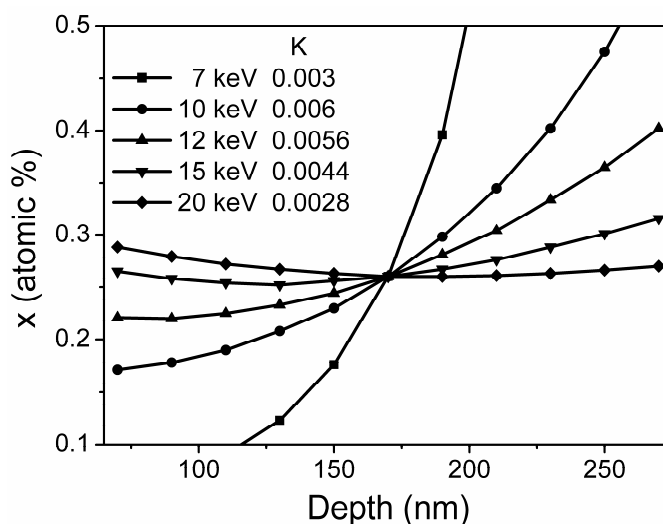


Рисунок 9.19 Зависимости состава тонкого слоя от глубины его залегания при различных энергиях электронного пучка. Общая точка соответствует истинным значениям глубины и состава слоя.

С помощью изложенной методики нами было проведено определение состава нанослоев $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ и $\text{Cd}_x\text{Zn}_{1-x}\text{Se}$ в составе гетероструктур на основе GaAs и ZnSe соответственно. Схемы исследованных структур представлены на рисунке 9.20. Первая серия образцов - это тонкие слои $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$, толщиной 2.7 – 9 нм, находящиеся на глубине 10 нм в матрице GaAs. Было показано, что для структур с такими толщинами для достижения приемлемой точности анализа энергия электронного зонда должна варьироваться в диапазоне 5-10 кэВ. При меньших энергиях контрастность линии In L α становится слишком маленькой для количественного определения индия в тонких слоях, а при больших энергиях максимум распределения рентгеновского излучения смещается в более глубокие слои и интенсивность излучения из слоя резко уменьшается. Вторая серия образцов – глубокие квантовые ямы $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ с толщиной 2.7 – 9 нм, глубина залегания слоев 800 нм.

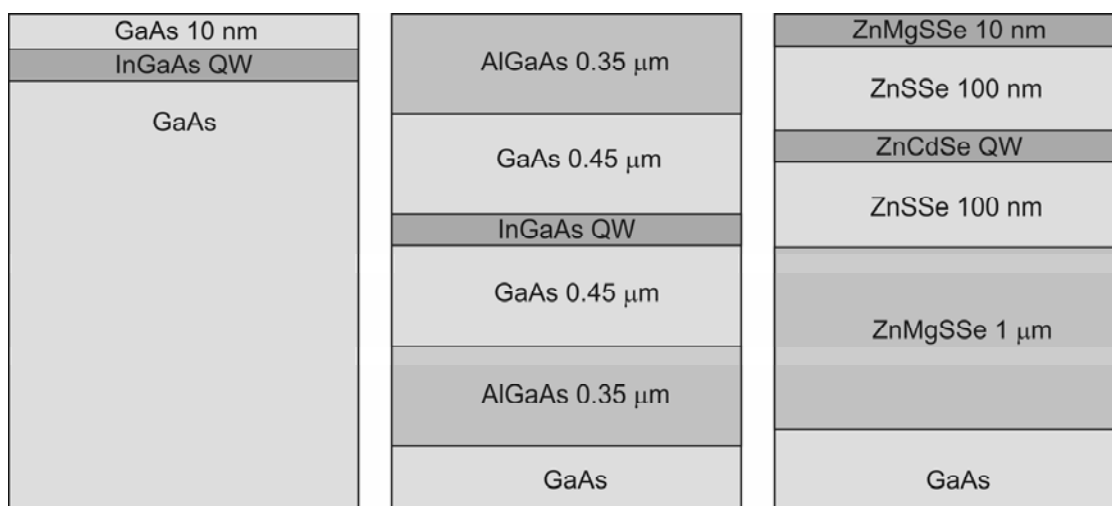


Рисунок 9.20 Схемы исследованных структур

Оптимальная энергия электронного пучка для анализа состава слоя в этих структурах 20-30 кэВ.

Рентгеноспектральный микроанализ проводился на установке CAMEBAX («Самеса», Франция). Измерения относительной интенсивности рентгеновского излучения для аналитических линий In L α и Cd L α проводились при энергиях электронного зонда в диапазоне от 5 до 25 кэВ в зависимости от глубины залегания анализируемого слоя. Эталоном служили полированные монокристаллические пластины InAs и CdSe. Для достижения необходимой чувствительности и точности микроанализа при измерении интенсивности рентгеновского излучения ток зонда был увеличен по сравнению со стандартными условиями микроанализа (анализ массивных материалов) до 30-100 нА, а время счета импульсов до 100 сек.

При расчете распределений $\phi_{\text{hom}}(z, E)$, $\phi_{\text{hom}}^{\text{st}}(z, E)$ методом Монте-Карло использовалась модель однократного рассеяния, в которой результаты каждого акта взаимодействия электрона с веществом разыгрываются с помощью дифференциальных сечений упругого и неупругого рассеяния. В качестве дифференциального сечения упругого рассеяния нами использовалось сечение Мотта из базы данных <http://www.ioffe.rssi.ru/ES> (см. главу 8). Дифференциальное сечение неупругого рассеяния определялись с помощью аналитической аппроксимации (8.15). Более подробное описание модели расчета можно найти в работе [238].

На точность определения состава слоев и глубины их залегания влияет большое число факторов, прежде всего это точность проведения измерений, точность расчета распределения рентгеновского излучения, точность и достоверность предварительных данных об

анализируемой структуре, которые принимаются во внимание при проведении расчетов по рассматриваемой методике.

Снижение измеряемой интенсивности рентгеновского излучения и соответственно точности ее измерения по сравнению со стандартным микроанализом при анализе наноразмерных слоев связано, прежде всего, с тем, что излучение в этом случае генерируется в очень малом объеме, составляющим лишь небольшую часть возбуждаемой области. Интенсивность излучения от слоя становится близкой по величине к фону, что еще больше ухудшает точность, а также чувствительность. Увеличение глубины залегания слоя также ведет к снижению измеряемой интенсивности. Компенсировать уменьшение интенсивности можно, увеличивая ток электронного зонда и время счета рентгеновских квантов. В качестве эталонов использовались бинарные соединения III-V и II-VI, являющиеся компонентами анализируемых систем, что сводит к минимуму ошибку количественного микроанализа. Фон, также вносящий существенную погрешность при анализе тонких слоев, измерялся с возможно большей точностью. В целом условия выбирались так, чтобы ошибка измерения в большинстве случаев не превышала 5%, а в худшем случае 10% относительных.

Обработка данных при анализе тонких слоев также имеет ряд особенностей. Расчетные распределения рентгеновского излучения несут в себе погрешность, связанную с моделями, принятыми для описания процессов прохождения электронов через вещество в методе Монте-Карло. Дополнительную ошибку вносят различия между модельными гетероструктурами, для которых проводятся расчеты, и реальными анализируемыми структурами. При анализе однородных образцов или слоев, сравнимых по толщине с глубиной области генерации, рассматривается интегральная интенсивность (см. (9.55)), и отличия формы распределения от истинной слабо влияют на результат, тем более, что рассматривается отношение интенсивности сигнала к интенсивности излучения из эталона, которая рассчитывается с использованием тех же моделей. При анализе тонких слоев используется значение распределения в одной точке – на глубине залегания слоя (см. (9.59)), поэтому необходимо детальное знание формы распределения. Если анализируемый слой находится на спадающем участке распределения, то даже при небольшой абсолютной ошибке в значении плотности генерации, мало влияющей на результат при анализе однородных образцов и толстых слоев, относительная ошибка расчета концентрации может быть значительной. Для ее уменьшения, как было сказано выше, состав слоя определялся при энергиях электронов, соответствующих максимуму распределения в области залегания слоя.

Для оценки точности метода нами проводились расчеты распределений с использованием разных приближений, для разных гетероструктур, а также для массивных

образцов с близкими параметрами. Различия в распределениях оказались порядка 10%. Использование различных моделей позволило оценить влияние формы распределения на результат.

Расчет состава по рассматриваемой методике возможен только, если известна толщина слоя и другие геометрические параметры гетероструктуры, причем, как уже было сказано выше, ошибка измерения толщины равна ошибке расчета концентрации. Только в случае определения толщины с помощью просвечивающей электронной микроскопии, обеспечивающей точность порядка 5%, возможна оценка состава с близкой точностью. По нашим оценкам, суммарная точность определения состава и глубины залегания тонкого слоя с использованием рассматриваемой методики составляет приблизительно 10 %.

С учетом доли излучения, генерируемой в тонком слое на определенной глубине, минимальная концентрация для анализа составляет 3 атомных % In или Cd при толщине слоя 5 нм и глубине залегания меньше 100 нм. Для более глубоких слоев и меньших толщин предел обнаружения больше.

Образец	Заданные параметры			РД		ПЭМ		Микроанализ		
	h, нм	d, нм	x	h, нм	d, нм	h, нм	d, нм	h, нм	d, нм	x
1896 #1	10	5	0.39	9	5	7	(3.2)	10 ± 1	5	0.38 ± 0.02
1897 #2	10	2.7	0.39	9	2.5	8	2.6	8 ± 1	2.6	0.37 ± 0.02
1899 #3	10	9	0.39	10	8.9	16	8	14 ± 2	8.5	0.38 ± 0.02
1871 #4	1000	9	0.39	-	-	820	8	800 ± 50	9	0.40 ± 0.04
1872 #5	1000	5	0.39	-	-	820	4	800 ± 50	5	0.40 ± 0.04

Таблица 9.13 Результаты микроанализа $In_xGa_{1-x}As$ наноразмерного слоя. Глубина залегания слоя h (нм) и толщина слоя d (нм), состав x .

Образец	Заданные параметры			ПЭМ		Микроанализ		
	h, нм	d, нм	x	h, нм	d, нм	h, нм	d, нм	x
644 (#6)	125	7	0.26	160		162 ± 10	7	0.26 ± 0.01
714 (#7)	160	7	0.26	152	6.6	167 ± 10	6.6	0.27 ± 0.01
658 (#8)	175	1		225	1.5-2	220 ± 10	1.6	0.63 ± 0.03
676 (#9)	125	1		95	1	106 ± 10	1	0.62 ± 0.03

Таблица 9.14 Результаты микроанализа $Cd_xZn_{1-x}Se$ наноразмерного слоя. Глубина залегания слоя h (нм) и толщина слоя d (нм), состав x .

Результаты определения состава и глубины залегания слоев для образцов первой серии в сравнении с результатами просвечивающей электронной микроскопии (ПЭМ) представлены в таблице 9.13, а для образцов второй серии – в таблице 9.14. Сравнение с ПЭМ показывает хорошее согласование результатов в пределах погрешностей методов.

Таким образом, применение предложенной методики позволило определить состав и глубину залегания наноразмерных эпитаксиальных слоев в гетероструктурах с точностью не хуже 10 %. Полученные результаты микроанализа гетероструктур были использованы для контроля технологии их создания.

Заключение

Перечислим итоги исследований, проведенных в диссертации. Диссертация посвящена исследованию и разработке методов решения уравнения Больцмана применительно к изучению процесса взаимодействия электронных пучков с веществом. Проведенный в параграфе 1.1 анализ дифференциальных сечений упругого и неупругого рассеяния позволил определить малые параметры в задаче переноса электронов средних энергий в веществе и выявить ее многомасштабность. Длинами, характеризующими процесс релаксации в целом, являются транспортный свободный пробег по импульсу (длина изотропизации) $\lambda(E)$ и полный пробег $s(E)$, зависящие от энергии электрона E . Эти величины существенно превосходят длины свободного пробега по упругим $l_{in}(E)$ и неупругим $l_{el}(E)$ столкновениям. Дифференциальные сечения рассеяния имеют пикообразный характер и при увеличении аргументов (угла или потерянной энергии) убывают степенным образом. Ширина пика в упругом и в неупругом случае характеризуется малыми параметрами β и ε , соответственно. В параграфе 1.2 проведено корректное разложение упругой части интеграла столкновений. При этом показано, что помимо традиционного дифференциального оператора необходимо учитывать оператор рассеяния на большие углы.

Для корректного асимптотического разложения неупругой части интеграла столкновений проведено обобщение способа асимптотического разложения интегралов с δ -образным ядром, убывающим степенным образом, на случай зависимости ядра от медленной переменной. В первом приближении выражение для интеграла столкновений совпадает с обычно используемым приближением непрерывных потерь. Однако степенное убывание ядра при удалении от пика приводит к тому, что следующий член асимптотического разложения интеграла столкновений имеет порядок $1/\ln \varepsilon$ и содержит интегральный оператор, который можно интерпретировать как оператор рассеяния с большой потерей энергии.

Выявленная многомасштабность кинетического уравнения позволила применить к его исследованию метод асимптотического расщепления. Для тяжелых мишеней задача разделяется на основную область (область диффузии), в которой функция распределения оказывается почти изотропной, и пограничный слой эффективной изотропизации, в котором энергию можно считать постоянной. Таким образом, процессы угловой и энергетической релаксации могут быть разделены. Проанализированы особенности применения общей схемы асимптотического расщепления к линейному кинетическому уравнению.

Во второй главе исследована координатная асимптотика пограничного слоя эффективной изотропизации и на основе процедуры сращивания асимптотических разложений в пограничном слое и в области диффузии получен алгоритм отыскания граничных условий, который замыкает общий процесс построения последовательных приближений равномерного асимптотического разложения.

В параграфе 2.3 получена структура пограничных слоев, возникающих в задаче о взаимодействии моноэнергетического мононаправленного пучка электронов средних энергий с полубесконечной тяжелой мишенью. Применимость различных приближений, используемых в кинетике электронов средних энергий, связана с малостью безразмерных параметров задачи. Проведено объединение приближенных моделей в единую схему, описывающую процесс релаксации электронов в различных масштабах длин, углов и энергий. Взаимодействие пограничных слоев между собой и с областью диффузии определяется передаваемыми из одной области в другую граничными условиями.

В третьей главе получено аналитическое решение кинетического уравнения в области диффузии в задаче о взаимодействии пучка с мишенью. В диффузионном приближении решены также задачи о расчете функции выхода электронов из однородного образца и образца типа «слой на подложке».

Использование асимптотических методов позволяет провести полный качественный анализ решения, однако значения малых параметров не настолько малы, чтобы найти распределение электронов с точностью, достаточной для решения обратных задач. В связи с этим были развиты другие подходы к решению кинетического уравнения при сильных отклонениях ФР от равновесия. При этом была рассмотрена более общая задача решения нелинейного уравнения Больцмана. Необходимость в решении нелинейного кинетического уравнения возникает, например, при расчете физико-химических процессов в газе и плазме, где требуется информация о ФР в области больших скоростей, при исследовании кинетических режимов в пристеночных областях, где ФР оказывается сильно неравновесной.

Развитие метода разложения по сферическим гармоникам применительно к нелинейному уравнению Больцмана позволило изучить структуру и свойства нелинейного интеграла столкновений. Разложение по сферическим гармоникам приводит к замене шестикратного интеграла столкновений набором интегральных операторов, ядра которых зависят только от модулей скорости. Эти ядра связаны с матричными элементами интеграла столкновений, возникающими при использовании полиномиального разложения по сферическим полиномам Эрмита. В пятой главе получена асимптотика матричных элементов при больших индексах и разработаны процедуры построения линейных ядер интеграла столкновений для псевдомаксвелловских молекул и твердых шаров. Эти процедуры

базируются на отыскании асимптотики остатка ряда, используемого для построения линейных ядер.

В шестой главе исследованы общие свойства ядер интегралов прямых и обратных столкновений. Показано, что для степенных потенциалов ядра обладают свойством подобия, т.е. являются однородной функцией своих аргументов. Степень однородности при этом определяется показателем степени в зависимости потенциала взаимодействия от расстояния между частицами. Это свойство позволяет представить ядра в виде произведения функции, зависящей от двух переменных на степень от суммы квадратов аргументов. Такое представление дает возможность свести задачу построения ядра во всей области к расчету ядра лишь на поверхности сферы в пространстве скоростей, где аргументы ограничены. Ядро для любых, сколь угодно больших значений скоростей, можно найти, используя свойство подобия. Линейное ядро определяется интегрированием нелинейного ядра с максвеллианом, что позволяет легко решить проблему построения линейного ядра в области больших скоростей.

В шестой главе показано также, что ядра интеграла прямых столкновений выражаются через ядра $L_G^l(c, c_2)$ некоторых линейных интегральных операторов, которые в случае степенных потенциалов также обладают свойством подобия. Найдено выражение для этих ядер через матричные элементы. Установлено, что ядра $L_G^l(c, c_2)$ выражаются через полное сечение с помощью одной квадратуры.

Очень важный результат получен в параграфе 6.3. Здесь на основе инвариантности интеграла столкновений относительно выбора скорости системы отсчета получены связи между ядрами интеграла столкновений. В отличие от алгебраических связей между матричными элементами, эти связи носят дифференциальный характер. Они могут служить основой для построения рекуррентной процедуры последовательного определения ядер. Такая процедура разработана в параграфе 6.4. Стартовыми для рекуррентной процедуры являются ядра $G_{00}^0(c, c_1, c_2)$.

В седьмой главе показано, что связь между ядрами нелинейного интеграла столкновений $G_{l,0}^{+l}(v, v_1, v_2)$ и ядрами линейного интеграла столкновений $L_l^+(v, v_1; T)$ можно рассматривать как преобразование Лапласа, и, следовательно, ядро $G_{00}^{+0}(c, c_1, c_2)$ может быть найдено обратным преобразованием Лапласа. Переменная, по которой выполняется обратное преобразование Лапласа, обратно пропорциональна корню из температуры фона в линейной задаче. С помощью такой связи получены аналитические выражения для $G_{00}^{+0}(c, c_1, c_2)$ в случае твердых шаров и псевдомаксвелловских молекул. При этом оказалось,

что $G_{00}^{+0}(c, c_1, c_2)$ имеет одинаковую структуру независимо от потенциала взаимодействия. При фиксированном значении c вся область изменения c_1 и c_2 , ($c_1 > 0$, $c_2 > 0$) разбивается на 5 подобластей с границами $c_1 = c$, $c_2 = c$ и $c_1^2 + c_2^2 = c^2$. В этих областях, а также при переходе из области в область, ядра непрерывны. На границах областей частные производные имеют разрыв. В области $c_1^2 + c_2^2 < c^2$ ядра равны нулю, что отражает закон сохранения энергии. Найденные выражения для ядер $G_{00}^{+0}(c, c_1, c_2)$ дают возможность выполнить первые шаги рекуррентной процедуры и построить ядра $\bar{G}_{1,0}^{+1}$, $\bar{G}_{0,1}^{+1}$, $\bar{G}_{1,1}^{+0}$, $\bar{G}_{2,0}^{+2}$, $\bar{G}_{2,1}^{+1}$, $\bar{G}_{1,1}^{+2}$ и $\bar{G}_{2,2}^{+0}$ для моделей псевдомаксвелловских молекул и твердых шаров.

На основе полученных ядер прямых и обратных нелинейных интегралов столкновений была рассмотрена одна из фундаментальных задач кинетической теории газов - задача нелинейной релаксации сильно неравновесной по скоростям ФР к равновесному распределению. Отметим, что ранее подход, использующий ядра интеграла столкновений применялся рядом исследователей для решения лишь линейных задач. Показано, что метод, основанный на использовании ядер нелинейного интеграла столкновений, позволяет строить ФР с очень высокой точностью до скоростей порядка $10 v_T$ (v_T - тепловая скорость). Использование ядер нелинейного интеграла столкновений успешно описывает процесс релаксации на основе решения нелинейного уравнения Больцмана даже в случае нарушения условия сходимости разложения ФР в стандартном моментном методе.

В параграфе 7.5 рассмотрен метод разложения по сферическим гармоникам применительно к линейному уравнению Больцмана, описывающему перенос электронов средних энергий в веществе. Получено выражение для ядер интеграла столкновений в этом случае. Показано, что в случае односкоростной задачи расчет ядер сводится к вычислению коэффициентов разложения дифференциального сечения упругого рассеяния по полиномам Лежандра. В общем случае, в силу малости отношения l_{el}/l_{in} , ядра интеграла столкновений мало отличаются от ядер односкоростной задачи.

В этом же параграфе разработан алгоритм численного решения задачи об угловой релаксации электронов в пограничном слое эффективной изотропизации. При этом используется метод дискретных ординат и представление интеграла столкновений через ядра. Особенностью решаемой задачи является сильная пикообразность дифференциального сечения рассеяния, что приводит к необходимости учета большого количества коэффициентов разложения по полиномам Лежандра и большого числа узлов в формуле Гаусса для интегрирования по углам при расчете интеграла столкновений. В связи с этим была проведена модификация стандартного S_N метода.

Рассмотренный в главах 1 - 3 асимптотический подход к решению кинетического уравнения для электронов и аналитические решения, полученные на его основе, позволяют выявить характер зависимости распределения электронов от основных параметров задачи. Разработанный численный метод решения дает возможность принять во внимание особенности взаимодействия электронов с веществом и получить детальную информацию о распределении электронов. Тем не менее, в ряде случаев для учета сложной геометрии мишени и различных способов регистрации сигнала оказывается удобным использовать метод прямого моделирования транспорта электронов – метод Монте-Карло. В рамках этого метода удастся особенно просто учитывать неоднородность мишени, наличие включений, тонкую структуру дифференциальных сечений рассеяния электронов и т.д.

В восьмой главе описаны особенности расчета дифференциальных сечений упругого и неупругого рассеяния электронов, представленных в созданной нами базе данных. В ходе исследований были разработаны три программных пакета для моделирования транспорта электронов по методу Монте-Карло. Все пакеты сконструированы по модульному принципу, что позволяет легко модифицировать программу и проводить расчеты по различным моделям, использовать различные способы описания дифференциальных сечений, средней потерянной энергии, учитывать различные процессы в процессе переноса электронов. Сравнение полученных при моделировании результатов с экспериментальными данными позволяет заключить, что реализованный подход к моделированию транспорта электронов по методу Монте-Карло адекватно описывает существенные характеристики этого процесса и может быть использован для исследования электронного распределения в твердотельных мишенях.

В последней главе приведены примеры использования разработанных методов расчета транспорта электронов для решения задач диагностики материалов, основанных на явлении электронной эмиссии и рентгеноспектрального микроанализа. Проведен также анализ теплового воздействия электронного зонда на образец.

Полученные в диссертации результаты открывают новые возможности для решения задач, связанных с транспортом электронов средних энергий, а также задач кинетической теории газов и плазмы, расчета физико-химических процессов. Использование ядер нелинейного интеграла столкновений позволяет строить функцию распределения вплоть до десяти тепловых скоростей, что оказывается весьма существенным для исследования химических реакций, процессов возбуждения, ионизации и других неупругих процессов. Расчет интеграла столкновений с помощью ядер может оказаться полезным при изучении кинетических режимов в пристеночных областях, где функция распределения оказывается

сильно неравновесной. Ядра могут быть использованы и при построении функции распределения в нестационарных задачах при наличии внешних полей.

Разработанные аналитические и численные методы расчета кинетики электронов средних энергий и созданная база данных могут использоваться и уже сейчас применяются для интерпретации данных и разработке методов при диагностике материалов с помощью электронного зондирования, рентгеноспектрального микроанализа, стимулированной рентгеновским излучением электронной эмиссии.

Приложения

В приложениях рассмотрены некоторые важные результаты, доказательство которых требует достаточно громоздких выкладок и затрудняет изложение основного текста.

А. Асимптотическая оценка производной от функции $U_r(x) = \exp(-x/2) \frac{S_{1/2}^r(x)\Gamma(r+1)}{\Gamma(r+3/2)}$

Для оценки $\frac{\partial U_r(x)}{\partial r}$ заметим, что $U_r(x)$ удовлетворяет интегральному уравнению

$$\begin{aligned} U_r(x) &= U_r^1(x) + \frac{\pi}{4R} \int_0^x (Ry)^{3/2} U_r(y) \cdot [U_r^1(y)U_r^2(x) - U_r^1(x)U_r^2(y)] dy = \\ &= U_r^1(x) + \int_0^x P_r(x, y) U_r(y) dy \end{aligned} \quad (\text{A.1})$$

Продифференцировав его по параметру r , найдем, что производная $\frac{\partial U_r(x)}{\partial r}$ удовлетворяет уравнению Вольтерра

$$\frac{\partial U_r(x)}{\partial r} = \frac{\partial U_r^1(x)}{\partial r} + \int_0^x \frac{\partial P_r(x, y)}{\partial r} U_r(y) dy + \int_0^x P_r(x, y) \frac{\partial U_r(y)}{\partial r} dy, \quad (\text{A.2})$$

решение которого представляется рядом

$$\begin{aligned} \frac{\partial U_r(x)}{\partial r} &= \sum_{n=0}^{\infty} \varphi_n(x; r), \\ \varphi_0(x; r) &= \frac{\partial U_r^1(x)}{\partial r} + \int_0^x \frac{\partial P_r(x, y)}{\partial r} U_r(y) dy, \\ \varphi_n(x; r) &= \int_0^x P_r(x, y) \varphi_{n-1}(y; r) dy. \end{aligned} \quad (\text{A.3})$$

Этот ряд является асимптотическим по r . Чтобы показать это, рассмотрим прежде всего действие интегрального оператора на функцию $(Rx)^\alpha$. Несложные выкладки с учетом асимптотики функций $U_r^1(x)$, $U_r^2(x)$ дают

$$\begin{aligned} \int_0^x P_r(x, y) (Ry)^\alpha dy &= O(R^{-2}), \quad x \in [0, R^{-1}] \\ \int_0^x P_r(x, y) (Ry)^\alpha dy &= O(R^{-2} (Rx)^{\alpha+3/2}) + O(R^{-2}), \quad x > R^{-1} \end{aligned} \quad (\text{A.4})$$

Принимая во внимание, что $U_r(x) = U_r^1(x) + o(U_r^1(x))$ и используя асимптотики функций $U_r^1(x)$, $U_r^2(x)$ и их производных, можно показать, что

$$\begin{aligned}\varphi_0(x; r) &= O(R^{-1}) + O(R^{-3}), & x \in [0, R^{-1}] \\ \varphi_0(x; r) &= O(R^{-1}) + O(R^{-1}(Rx)^{-1/2}) + \\ &+ R^{-3} \left(O((Rx)^{3/2}) + O((Rx)^1) + O(1) + O((Rx)^{-1/2}) \right), & x > R^{-1}\end{aligned}\quad (\text{A.5})$$

Тогда

$$\begin{aligned}\int_0^x P_r(x, y) \varphi_0(y; r) dy &= O(R^{-3}) + O(R^{-5}), & x \in [0, R^{-1}] \\ \int_0^x P_r(x, y) \varphi_0(y; r) dy &= R^{-3} \left(O((Rx)^{3/2}) + O((Rx)^1) + O(1) \right) + \\ &+ R^{-5} \left(O((Rx)^3) + O((Rx)^{5/2}) + O((Rx)^{3/2}) + O((Rx)^1) + O(1) \right), & x > R^{-1}\end{aligned}\quad (\text{A.6})$$

т.е. при фиксированном x и $r \rightarrow \infty$ член $\int_0^x P_r(x, y) \varphi_0(y; r) dy$ имеет более высокий порядок малости, чем $\varphi_0(x; r)$. Последовательно применяя соотношения (A.4), легко заключить, что каждый следующий член ряда (A.3) имеет более высокий порядок малости, чем предыдущий. Таким образом, порядок производной $\frac{\partial U_r(c^2)}{\partial r}$ определяется первым членом $\varphi_0(x; r)$ и равен $O(R^{-1})$.

В. Асимптотическая оценка суммы $\frac{\sigma_r}{S_{1/2}^r(x)} \sum_{\Delta=M}^{\infty} \frac{S_{1/2}^{r+\Delta}(x) \bar{\Lambda}_{r, r+\Delta}}{\sigma_{r+\Delta}}$

Обратимся к асимптотической оценке суммы

$$\frac{\sigma_r}{S_{1/2}^r(x)} \sum_{\Delta=M}^{\infty} \frac{S_{1/2}^{r+\Delta}(x) \bar{\Lambda}_{r, r+\Delta}}{\sigma_{r+\Delta}},$$

где $M = M_2 + 1 = O(r^{1/2+\varepsilon})$, и покажем, что она экспоненциально убывает с ростом r . Используя асимптотику полиномов Сонина (5.138) и учитывая, что МЭ являются положительными при $\Delta \neq 0$, можно получить

$$\frac{\sigma_r}{S_{1/2}^r(x)} \sum_{\Delta=M}^{\infty} \left| \frac{S_{1/2}^{r+\Delta}(x) \bar{\Lambda}_{r, r+\Delta}}{\sigma_{r+\Delta}} \right| \leq \text{const} \sum_{\Delta=M}^{\infty} \bar{\Lambda}_{r, r+\Delta}.$$

Оценим сумму $\sum_{\Delta=M}^{\infty} \bar{\Lambda}_{r,r+\Delta}$. Покажем, что этот ряд сходится и что его мажорантой является геометрическая прогрессия. Для этого рассмотрим отношение $\bar{\Lambda}_{r,r+\Delta+1} / \bar{\Lambda}_{r,r+\Delta}$. Используя (5.130), найдем

$$R(r, \Delta) = \frac{\bar{\Lambda}_{r,r+\Delta+1}}{\bar{\Lambda}_{r,r+\Delta}} = \frac{\Delta^2 - 1/4}{(\Delta+1)^2 - 1/4} \frac{(r+3/4 + \Delta/2)}{(r+\Delta+1)}.$$

Это отношение всегда меньше единицы и убывает с ростом Δ , поэтому $R(r, \Delta) < R(r, M) = q$.

Тогда для $\bar{\Lambda}_{r,r+\Delta}$ имеет место оценка $\bar{\Lambda}_{r,r+\Delta} < q^{\Delta-M} \bar{\Lambda}_{r,r+M}$ и ряд $\sum_{\Delta=M}^{\infty} \bar{\Lambda}_{r,r+\Delta}$ сходится.

Просуммировав геометрическую прогрессию со знаменателем q , получим

$$\sum_{\Delta=M}^{\infty} \bar{\Lambda}_{r,r+\Delta} < \frac{\bar{\Lambda}_{r,r+M}}{1-q} = \frac{2r}{M} \bar{\Lambda}_{r,r+M} (1+o(1)).$$

Подставив сюда асимптотическое выражение (5.135) для матричного элемента $\bar{\Lambda}_{r,r+M}$, легко получить

$$\frac{2r}{M} \bar{\Lambda}_{r,r+M} = -\frac{1}{\pi} \frac{2r^{1/2}}{M^3} \exp\left(-\frac{M^2}{4r}\right) (1+o(1)),$$

что и завершает доказательство экспоненциальной оценки суммы. Аналогичная оценка

может быть получена и для $\frac{\sigma_r}{S_{1/2}^r(x)} \sum_{\Delta=-r}^{-M_2-1} \frac{S_{1/2}^{r+\Delta}(x) \bar{\Lambda}_{r,r+\Delta}}{\sigma_{r+\Delta}}$.

С. Вычисление вклада суммы $\sum_{\Delta=-M_2}^{M_2} s_{r,\Delta}(x)$ в ОМЭ

Рассмотрим более подробно получение выражения (5.147) для ОМЭ. Асимптотическое представление $s_{r,\Delta}(x)$ в области $[-M_1, M_1]$, где $M_1 = r^{1/2-\varepsilon}$, может быть получено разложением в ряд выражения (5.141) по степеням малого параметра $\Delta/\sqrt{N}$:

$$s_{r,\Delta}(x) = -\frac{1}{\pi} \left\{ \frac{1}{\sqrt{N}(\Delta^2 - 1/4)} + \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-1)^{k+1} C_k(x) \Delta^{2k}}{N^{k+3/2}} + A(\sqrt{x}, N) \left(\sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-1)^{k+1} U_k(x) \Delta^{2k}}{2N^{k+2}} - \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-1)^{k+1} V_k(x) \Delta^{2k+2}}{2N^{k+3}} \right) + o(r^{-2}) \right\}$$

где

$$C_k(x) = \sum_{m=0}^{k+1} \frac{x^m}{4^{k-m+1} (k-m+1)! (2m)!}, \quad U_k(x) = \sum_{m=0}^k \frac{x^{m+1/2} 2(2m+3)}{4^{k-m+1} (k-m)! (2m+1)!},$$

$$V_k(x) = \sum_{m=0}^k \frac{x^{m+1/2}}{4^{k-m+1}(k-m)!(2m+1)!}$$

Выполним суммирование $s_{r,\Delta}(x)$ в области $[-M_1, M_1]$. Сумма по Δ от первого члена легко вычисляется:

$$\sum_{\Delta=-M_1}^{M_1} \frac{1}{\Delta^2 - 1/4} = \sum_{\Delta=-M_1}^{M_1} 2 \left(\frac{1}{2\Delta - 1} - \frac{1}{2\Delta + 1} \right) = \sum_{\Delta=-M_1-1}^{M_1-1} \frac{2}{2\Delta + 1} - \sum_{\Delta=-M_1}^{M_1} \frac{2}{2\Delta + 1} = -\frac{4}{2M_1 + 1}$$

При суммировании остальных членов вследствие конечности пределов суммирования по Δ порядок суммирования по Δ и по k в сумме $\sum_{\Delta=-M_1}^{M_1} s_{r,\Delta}(x)$ может быть изменен и использован известный (см., например [73]) результат для конечной суммы степеней натуральных чисел

$$\sum_{\Delta=1}^{M_1} \Delta^q = \frac{M_1^{q+1}}{q+1} + \frac{M_1^q}{2} + O(M_1^{q-1}).$$

Таким образом, вклад в ОМЭ области $[-M_1, M_1]$ дается выражением

$$\begin{aligned} \sum_{\Delta=-M_1}^{M_1} s_{r,\Delta}(x) = & -\frac{1}{\pi} \left\{ -\frac{4}{\sqrt{N}(2M_1+1)} + \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-1)^{k+1} C_k(x) M_1^{2k}}{N^{k+3/2}} \left(\frac{2M_1}{2k+1} + 1 \right) + \right. \\ & \left. + A(\sqrt{x}, N) \left(\sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-1)^{k+1} U_k(x) M_1^{2k+1}}{N^{k+2}(2k+1)} - \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-1)^{k+1} V_k(x) M_1^{2k+3}}{N^{k+3}(2k+3)} \right) + o(r^{-2}) \right\} \end{aligned}$$

Перейдем к оценке вклада в ОМЭ областей $[-M_2, -M_1-1]$, $[M_2, M_1+1]$. Для этого рассмотрим более подробно интеграл (5.145). Подынтегральная функция имеет особенность в нуле, поэтому для вычисления интеграла J_1 удобно представить его в виде

$$\begin{aligned} J_1 = & \int_{u_1}^{u_2} \frac{1}{u^2} \exp(-u^2/4) \cos(u\sqrt{x}) du = \int_0^{\infty} \frac{1}{u^2} \exp(-u^2/4) (\cos(u\sqrt{x}) - 1) du - \\ & - \int_0^{u_1} \frac{1}{u^2} \exp(-u^2/4) (\cos(u\sqrt{x}) - 1) du - \int_{u_2}^{\infty} \frac{1}{u^2} \exp(-u^2/4) (\cos(u\sqrt{x}) - 1) du + \int_{u_1}^{u_2} \frac{1}{u^2} \exp(-u^2/4) du. \end{aligned}$$

Для вычисления первого интеграла заметим, что его вторая производная по параметру $c = \sqrt{x}$ имеет вид

$$-\int_0^{\infty} \exp(-u^2/4) \cos(uc) du,$$

и, следовательно, есть $-\sqrt{\pi} e^{-c^2}$. Проинтегрировав это выражение дважды, найдем

$$\int_0^{\infty} \frac{1}{u^2} \exp(-u^2/4) (\cos(u\sqrt{x}) - 1) du = -\frac{\pi}{2} \left(\sqrt{x} \Phi(\sqrt{x}) + \frac{1}{\sqrt{\pi}} e^{-x} - \frac{1}{\sqrt{\pi}} \right).$$

Верхний предел во втором интеграле есть $O(r^{-\varepsilon})$, поэтому можно почленно проинтегрировать разложение подынтегральной функции в ряд в окрестности нуля. Третий интеграл можно оценить с помощью неравенства

$$\left| \int_{u_2}^{\infty} \frac{1}{u^2} \exp(-u^2/4) (\cos(u\sqrt{x}) - 1) du \right| \leq 2 \int_{M_2/\sqrt{N}}^{\infty} \exp(-u^2/4) du = O(r^{-\varepsilon} \exp(-r^{2\varepsilon})).$$

Последний интеграл может быть легко вычислен

$$\begin{aligned} \int_{u_1}^{u_2} \frac{1}{u^2} \exp(-u^2/4) du &= \frac{\sqrt{N}}{M_1+1} \exp(-(M_1+1)^2/4N) - \frac{\sqrt{N}}{M_2} \exp(-M_2^2/4N) + \frac{\sqrt{\pi}}{2} \Phi\left(\frac{M_1+1}{2\sqrt{N}}\right) \\ &\quad - \frac{\sqrt{\pi}}{2} + \frac{\sqrt{\pi}}{2} \left(1 - \Phi\left(\frac{M_2}{2\sqrt{N}}\right)\right). \end{aligned}$$

Здесь второе и последнее слагаемые имеют порядок $O(\exp(-M_2^2/4N)/(M_2/\sqrt{N}))$, т.е. экспоненциально убывают с ростом r . Оставшиеся слагаемые могут быть разложены в ряд по степеням $M_1/\sqrt{N}$. В результате для интеграла (5.145) получаем

$$I_1 = \frac{1}{2N} \left[\sqrt{x} \Phi(\sqrt{x}) + \frac{1}{\sqrt{\pi}} e^{-x} \right] + \left(-\frac{1}{\pi} \right) \left\{ \frac{1}{N^{1/2}(M_1+1)} - \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-1)^{k+1} C_k(x) (M_1+1)^{2k+1}}{(2k+1)N^{k+3/2}} + o(r^{-3/2}) \right\}.$$

Аналогичные выкладки для интеграла (5.146) дают

$$I_2 = \frac{A(\sqrt{x}, N)}{4N^{3/2}} \Phi(\sqrt{x}) - \left(-\frac{1}{\pi} \right) A(\sqrt{x}, N) \left\{ \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-1)^{k+1} U_k(x) M_1^{2k+1}}{2N^{k+2}(2k+1)} - \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-1)^{k+1} V_k(x) M_1^{2k+3}}{2N^{k+3}(2k+3)} + o(r^{-3/2}) \right\}.$$

Учитывая, что внеинтегральный член в (5.144) имеет вид

$$\frac{1}{2} (h(M_1+1) - h(M_2)) = -\frac{1}{\pi} \left\{ \frac{1}{2N^{1/2}M_1^2} + \frac{1}{2} \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-1)^{k+1} C_k(x) M_1^{2k}}{N^{k+3/2}} + o(r^{-3/2}) \right\},$$

найдем вклад суммы $\sum_{\Delta=-M_2}^{M_2} s_{r,\Delta}(x)$ в ОМЭ:

$$\begin{aligned} \sum_{\Delta=-M_2}^{M_2} s_{r,\Delta}(x) + \frac{1}{2} (h(M_1+1) - h(M_2)) + 2I_1 + 2I_2 &= \frac{1}{N} \left(\sqrt{x} \Phi(\sqrt{x}) + \frac{\exp(-x)}{\sqrt{\pi}} \right) \\ &\quad + A(\sqrt{x}, N) \frac{1}{2N^{3/2}} \Phi(\sqrt{x}) + o(r^{-3/2}). \end{aligned}$$

D Доказательство обращения в ноль функции $B_0^{(3)}(c_2)...B_{i-2}^{(3)}(c_2)B_{i-1}^{(3)}(c_2)M_\lambda(0,i)$ для $i=1,...,\lambda-1$ при $c=0$.

Выразим функции $M_\lambda(0,\nu)$ через ядра вида $G_{\lambda,0}^\lambda$. Для этого воспользуемся рекуррентными соотношениями между ядрами (6.134) при $\tau=0$. Действуя на рекуррентное соотношение оператором $(-B_{\nu-1}^{(3)}(c_2))^{-1}$, найдем

$$G_{\lambda,\nu}^{\lambda-\nu} = (-B_{\nu-1}^{(3)}(c_2))^{-1} B_{\lambda-\nu}^{(2)}(c) G_{\lambda,\nu-1}^{\lambda-\nu+1} + (-B_{\nu-1}^{(3)}(c_2))^{-1} B_\lambda^{(4)}(c_1) G_{\lambda-1,\nu-1}^{\lambda-\nu}. \quad (D.1)$$

Параметр τ для ядер в правой части также равен нулю, поэтому для них можно воспользоваться такой же формулой. Подставляя выражение для ядра $G_{\lambda,\nu-1}^{\lambda-\nu+1}$ через $G_{\lambda,\nu-2}^{\lambda-\nu+2}$, $G_{\lambda-1,\nu-2}^{\lambda-\nu+1}$, а для ядра $G_{\lambda-1,\nu-1}^{\lambda-1-(\nu-1)}$ - через $G_{\lambda-1,\nu-2}^{\lambda-\nu+1}$, $G_{\lambda-2,\nu-2}^{\lambda-\nu}$, найдем

$$\begin{aligned} B_{\nu-2}^{(3)}(c_2)B_{\nu-1}^{(3)}(c_2)G_{\lambda,\nu}^{\lambda-\nu} &= B_{\lambda-\nu}^{(2)}(c)B_{\lambda-\nu+1}^{(2)}(c)G_{\lambda,\nu-2}^{\lambda-\nu+2} + 2B_{\lambda-\nu}^{(2)}(c)B_{\lambda-1}^{(4)}(c_1)G_{\lambda-1,\nu-2}^{\lambda-1-(\nu-2)} + \\ &+ B_\lambda^{(4)}(c_1)B_{\lambda-1}^{(4)}(c_1)G_{\lambda-2,\nu-2}^{\lambda-2-(\nu-2)}. \end{aligned} \quad (D.2)$$

Здесь учтено, что операторы, действующие на разные переменные, коммутируют. Продолжая этот процесс, получим

$$\begin{aligned} B_{\nu-i}^{(3)}(c_2)...B_{\nu-2}^{(3)}(c_2)B_{\nu-1}^{(3)}(c_2)G_{\lambda,\nu}^{\lambda-\nu} &= (-1)^i B_{\lambda-i}^{(2)}(c)B_{\lambda-i+1}^{(2)}(c)...B_{\lambda-1}^{(2)}(c)G_{\lambda,\nu-i}^\lambda + \\ &+ (-1)^i \sum_{k=1}^{i-1} C_i^k B_\lambda^{(4)}(c_1)B_{\lambda-1}^{(4)}(c_1)...B_{\lambda-k+1}^{(4)}(c_1)B_{\lambda-\nu}^{(2)}(c)B_{\lambda-\nu+1}^{(2)}(c)...B_{\lambda-\nu+i-k-1}^{(2)}(c)G_{\lambda-k,\nu-i}^{\lambda-k} + \\ &+ (-1)^i B_\lambda^{(4)}(c_1)B_{\lambda-1}^{(4)}(c_1)...B_{\lambda-i+1}^{(4)}(c_1)G_{\lambda-i,\nu-i}^{\lambda-i}. \end{aligned} \quad (D.3)$$

Здесь C_i^k - биномиальные коэффициенты. При $i=\nu$ соотношение (D.3) переходит в

$$\begin{aligned} B_0^{(3)}(c_2)...B_{i-2}^{(3)}(c_2)B_{i-1}^{(3)}(c_2)G_{\lambda,i}^{\lambda-i} &= (-1)^i B_{\lambda-i}^{(2)}(c)B_{\lambda-i+1}^{(2)}(c)...B_{\lambda-1}^{(2)}(c)G_{\lambda,0}^\lambda + \\ &+ (-1)^i \sum_{k=1}^{i-1} C_i^k B_\lambda^{(4)}(c_1)B_{\lambda-1}^{(4)}(c_1)...B_{\lambda-k+1}^{(4)}(c_1)B_{\lambda-i}^{(2)}(c)B_{\lambda-i+1}^{(2)}(c)...B_{\lambda-k-1}^{(2)}(c)G_{\lambda-k,0}^{\lambda-k} + \\ &+ (-1)^i B_\lambda^{(4)}(c_1)B_{\lambda-1}^{(4)}(c_1)...B_{\lambda-i+1}^{(4)}(c_1)G_{\lambda-i,0}^{\lambda-i}, \quad i=1,...,\lambda-1. \end{aligned} \quad (D.4)$$

Согласно (6.158) имеем

$$\begin{aligned} B_0^{(3)}(c_2)...B_{i-2}^{(3)}(c_2)B_{i-1}^{(3)}(c_2)G_{\lambda,i}^{\lambda-i} &= (-1)^i B_{\lambda-i}^{(2)}(c)B_{\lambda-i+1}^{(2)}(c)...B_{\lambda-1}^{(2)}(c)G_{\lambda,0}^\lambda + \\ &+ B_0^{(3)}(c_2)...B_{i-2}^{(3)}(c_2)B_{i-1}^{(3)}(c_2)M_\lambda(0,i), \quad i=1,...,\lambda-1, \end{aligned} \quad (D.5)$$

что дает

$$\begin{aligned} B_0^{(3)}(c_2)...B_{i-2}^{(3)}(c_2)B_{i-1}^{(3)}(c_2)M_\lambda(0,i) &= \\ &= (-1)^i \sum_{k=1}^{i-1} C_i^k B_\lambda^{(4)}(c_1)B_{\lambda-1}^{(4)}(c_1)...B_{\lambda-k+1}^{(4)}(c_1)B_{\lambda-i}^{(2)}(c)B_{\lambda-i+1}^{(2)}(c)...B_{\lambda-k-1}^{(2)}(c)G_{\lambda-k,0}^{\lambda-k} + \\ &+ (-1)^i B_\lambda^{(4)}(c_1)B_{\lambda-1}^{(4)}(c_1)...B_{\lambda-i+1}^{(4)}(c_1)G_{\lambda-i,0}^{\lambda-i}, \quad i=1,...,\lambda-1. \end{aligned} \quad (D.6)$$

Докажем теперь, что функции $B_0^{(3)}(c_2)...B_{i-2}^{(3)}(c_2)B_{i-1}^{(3)}(c_2)M_\lambda(0,i)$, $i=1,...,\lambda-1$ обращаются в ноль при $c=0$. Согласно (6.137) для $M_\lambda(0,1)$ имеем

$$B_0^{(3)}(c_2)M_\lambda(0,1) = -B_\lambda^{(4)}(c_1)G_{\lambda-1,0}^{\lambda-1}, \quad \lambda \geq 1. \quad (D.7)$$

Если $\lambda \geq 2$, то ядро $G_{\lambda-1,0}^{\lambda-1}$ при $c=0$ обращается в ноль. Поскольку оператор $B_\lambda^{(4)}(c_1)$ действует только на переменную c_1 , то $B_\lambda^{(4)}(c_1)G_{\lambda-1,0}^{\lambda-1}\Big|_{c=0} = 0$, и, следовательно,

$$B_0^{(3)}(c_2)M_\lambda(0,1)\Big|_{c=0} = 0, \quad \lambda \geq 2. \quad (D.8)$$

Отметим, что из (6.158) следует, что при $i=1$ выполняется и (6.159).

Докажем теперь требуемое утверждение по индукции. Пусть

$$B_0^{(3)}(c_2)...B_{i-2}^{(3)}(c_2)B_{i-1}^{(3)}(c_2)M_\lambda(0,i)\Big|_{c=0} = 0 \quad (D.9)$$

для всех $\lambda \leq \lambda_0 - 1$, $i=1,...,\lambda-1$. Покажем, что (D.9) верно и для $\lambda = \lambda_0$, $i=1,...,\lambda_0-1$.

Вследствие (D.9) справедливо условие (6.159), т.е.

$$B_{\lambda_0-k-j}^{(2)}(c)B_{\lambda_0-k-j+1}^{(2)}(c)...B_{\lambda_0-k-1}^{(2)}(c)G_{\lambda_0-k,0}^{\lambda_0-k}\Big|_{c=0} = 0, \\ k=1,...,\lambda_0-1, \quad j=1,...,\lambda_0-k-1 \quad (D.10)$$

Но тогда в правой части соотношения (D.6), записанного для $\lambda = \lambda_0$ при $c=0$ первый член (сумма по k) обращается в ноль при $2 \leq i \leq \lambda_0 - 1$ (при $i=1$ сумма просто не содержит членов). Второй член при $c=0$ обращается в ноль по свойству ядра $G_{\lambda_0-i,0}^{\lambda_0-i}$ для всех $i=1,...,\lambda_0-1$. Таким образом, соотношение (D.9) справедливо и для $\lambda = \lambda_0$, $i=1,...,\lambda_0-1$, что и доказывает требуемое утверждение.

Е. Асимптотическая оценка интеграла $\int_0^1 \frac{\sin(2c_1\sqrt{N}\sqrt{1-t})\sin(2c_2\sqrt{N}\sqrt{t})}{c_1c_2\sqrt{1-t}\sqrt{t}} dt$.

Для получения асимптотической оценки первого интеграла в (7.84), т.е. интеграла

$$Int_0 = \int_0^1 \frac{\sin(2c_1\sqrt{N}\sqrt{1-t})\sin(2c_2\sqrt{N}\sqrt{t})}{c_1c_2\sqrt{1-t}\sqrt{t}} dt \quad (E.1)$$

выразим произведение синусов через сумму косинусов, перейдем к комплексной переменной и введем обозначение $x = 2\sqrt{N}$. Тогда Int_0 представится в виде

$$Int_0 = \frac{1}{2c_1c_2}(I_1 - I_2), \quad (E.2)$$

где

$$I_1 = \int_0^1 \frac{\cos(2\sqrt{N}(c_1\sqrt{1-t} - c_2\sqrt{t}))}{\sqrt{1-t}\sqrt{t}} dt = \operatorname{Re} \int_0^1 \frac{\exp(ix(c_1\sqrt{1-t} - c_2\sqrt{t}))}{\sqrt{1-t}\sqrt{t}} dt, \quad (\text{E.3})$$

$$I_2 = \int_0^1 \frac{\cos(2\sqrt{N}(c_1\sqrt{1-t} + c_2\sqrt{t}))}{\sqrt{1-t}\sqrt{t}} dt = \operatorname{Re} \int_0^1 \frac{\exp(ix(c_1\sqrt{1-t} + c_2\sqrt{t}))}{\sqrt{1-t}\sqrt{t}} dt. \quad (\text{E.4})$$

Приведем интегралы (E.3), (E.4) к стандартному виду (7.89). Для этого разобьем промежуток интегрирования на интервалы $[0, t_0]$ и $[t_0, 1]$, где фазы (показатели экспонент, взятые по модулю) монотонны. Для интеграла (E.3) $t_0 = 1/2$, в для (E.4) - $t_0 = c_2^2/(c_2^2 + c_1^2)$. На интервале $[0, t_0]$ избавимся от особенностей в подинтегральных функциях заменой $\tau = \sqrt{t}$. Интеграл (E.3) заменим на сопряженный, чтобы фаза была возрастающей. После этого вклад в $\bar{I}_1$ при интегрировании по промежутку $[0, 1/2]$ приобретает вид

$$\bar{I}_{11} = 2 \int_0^{1/\sqrt{2}} \frac{\exp(ix(-c_1\sqrt{1-\tau^2} + c_2\tau))}{\sqrt{1-\tau^2}} d\tau. \quad (\text{E.5})$$

Это соответствует формуле (7.89) с параметрами $\alpha = 0$, $\beta = 1/\sqrt{2}$, $\rho = 1$, $\sigma = 1$, $\lambda = 1$, $\mu = 1$. Воспользуемся (7.90)–(7.92) и учтем, что интеграл I_{12} по промежутку $[1/2, 1]$ легко найти, делая замену переменной $w = 1 - t$:

$$I_{12}(c_1, c_2) = \bar{I}_{11}(c_2, c_1). \quad (\text{E.6})$$

В результате получим интеграл (E.3) суммированием (E.5), (E.6):

$$I_1 = 2 \left[\left(\frac{\cos(xc_2 - \pi/2)}{c_1} + \frac{\cos(xc_1 - \pi/2)}{c_2} \right) \frac{1}{x} - \left(\frac{c_1 \cos(xc_1 - \pi)}{c_2^3} + \frac{c_2 \cos(xc_2 - \pi)}{c_1^3} \right) \frac{1}{x^2} \right]. \quad (\text{E.7})$$

Перейдем к интегралу I_2 , который после разбиения промежутка интегрирования и замены переменной также принимает вид (7.89):

$$I_{21} = 2 \operatorname{Re} \int_0^{t_0} \frac{\exp(ix(c_1\sqrt{1-\tau^2} + c_2\tau))}{\sqrt{1-\tau^2}} d\tau. \quad (\text{E.8})$$

Выясним значения параметров ρ , σ , λ , μ для этого случая. Функция $g(t) = 1/\sqrt{1-t^2}$ аналитична на интервале $[0; t_0]$, поэтому $\lambda = \mu = 1$. В точке $\tau = \beta$ функция $h'(\tau)$ обращается в ноль линейно, и, следовательно, $\sigma = 2$. Поскольку $h'(\tau)$ не обращается в ноль в $\tau = \alpha$, то $\rho = 1$. Таким образом,

$$I_{21} = 2 \operatorname{Re}(B_3(x) - A_2(x)), \quad (\text{E.9})$$

где $A_2(x)$, $B_3(x)$ даются формулами (7.91), (7.92). Сделав замену переменной $w = 1 - t$ на интервале $[t_0, 1]$, легко увидеть, что интеграл по этому промежутку совпадает с $I_{21}(c_1, c_2)$. После вычисления $A_2(x)$, $B_3(x)$ получим

$$\begin{aligned}
I_2 = & \frac{2\sqrt{2}\sqrt{\pi}}{(c_1^2 + c_2^2)^{1/4}} \cos\left(x\sqrt{c_1^2 + c_2^2} - \frac{\pi}{4}\right) \frac{1}{x^{1/2}} - \frac{\sqrt{2}}{(c_1^2 + c_2^2)^{3/4}} \frac{\sqrt{\pi}}{4} \cos\left(x\sqrt{c_1^2 + c_2^2} - \frac{3\pi}{4}\right) \frac{1}{x^{3/2}} + \\
& + \frac{2\cos\left(xc_1 + \frac{\pi}{2}\right)}{c_2} \frac{1}{x} + \frac{2c_1 \cos(xc_1 + \pi)}{c_2^3} \frac{1}{x^2} + \frac{2\cos\left(xc_2 + \frac{\pi}{2}\right)}{c_1} \frac{1}{x} + \frac{2c_2 \cos(xc_2 + \pi)}{c_1^3} \frac{1}{x^2}. \quad (E.10)
\end{aligned}$$

Упрощая аргументы тригонометрических функций, подставляя в (E.7), (E.10) $x = 2\sqrt{N}$, возвращаясь к выражению (E.2) и вычитая интегралы на концах интервала $Int_1(c_1, c_2)$, $Int_2(c_1, c_2)$ (см. формулы (7.84)–(7.86)), получим искомое аналитическое приближение для интеграла (7.83)

$$\begin{aligned}
\tilde{I}(N, M, c_1, c_2) = & \frac{1}{c_1 c_2} \left\{ -\frac{\sqrt{\pi} \cos\left(2\sqrt{N}\sqrt{c_1^2 + c_2^2} - \pi/4\right)}{(c_1^2 + c_2^2)^{1/4} N^{1/4}} - \frac{\sqrt{\pi} \cos\left(2\sqrt{N}\sqrt{c_1^2 + c_2^2} - 3\pi/4\right)}{16(c_1^2 + c_2^2)^{3/4} N^{3/4}} + \right. \\
& + \frac{\sin(2c_1\sqrt{N})}{c_2\sqrt{N}} \cos(2c_2\sqrt{M+3/4}) + \frac{c_1 \cos(2c_1\sqrt{N})}{2c_2^3 N} \left(1 + \frac{U(c_2, M)}{2}\right) + \\
& \left. + \frac{\sin(2c_2\sqrt{N})}{c_1\sqrt{N}} \cos(2c_1\sqrt{M+3/4}) + \frac{c_2 \cos(2c_2\sqrt{N})}{2c_1^3 N} \left(1 + \frac{U(c_1, M)}{2}\right) \right\}, \quad (E.11)
\end{aligned}$$

где $U(c, M)$ определяется выражением (7.90).

Список литературы

1. В.С.Владимиров. Математические задачи односкоростной теории переноса частиц. Тр. матем. ин-та АН СССР, 1961, т.61, 157 с.
2. В.С.Владимиров. О некоторых вариационных методах приближенного решения уравнения переноса // Выч. мат., **7**, 93-101 (1961)
3. Т.А.Гермогенова. Локальные свойства решения уравнения переноса. – М., 1968, 27 с. (Препринт / Ин-т прикл. мат. им. М.В.Келдыша №127)
4. Т.А.Гермогенова. Обобщенные решения краевых задач для уравнения переноса // ЖВМ и МФ, **9**(3), 605-616 (1969)
5. J.A.Davis. Transport error bounds via P_n -approximations // Nucl. Sci. and Eng., **31**(1), 127-146 (1968)
6. S.Kaplan, J.Davis. Canonical and involutory transformers of the variational problems of transport theory // Nucl. Sci. and Eng., **38**(2), 166-179 (1967)
7. A.L.Buslik Extremum variational principles for the monoenergetic neutron transport equation with arbitrary adjoint source // Nucl. Sci. and Eng., **35**(3), 303-307 (1969)
8. С.Б.Шихов. Вопросы математической теории реакторов. М.,: Атомиздат, 1973, 375 с.
9. С.Б.Шихов. Некоторые вопросы математической теории критического состояния реактора // ЖВМ и МФ, **7**(1), 113-118 (1967)
10. K.M.Case. Elementary solutions of the transport equations and their applications // Ann.Phys., **9**(1), 1-23 (1960)
11. J.R.Mika. Neutron transport with anisotropic scattering // Nucl. Sci. and Eng., **11**(4), 415-427 (1961)
12. Г.И.Марчук. Вычислительные методы в теории переноса. М., Атомиздат, 1969, 247 с.
13. Н.И.Лалетин. Элементарные решения односкоростного уравнения переноса нейтронов в решетках реактора. В кн.: Методы расчета полей тепловых нейтронов в решетках реактора. Под ред. Шевелева Я.В. М.: Атомиздат, 1974, с.155-186.
14. N.J.Mc Cormick, I.Kuscer. Bi-ortogonality relations for solving half-space transport problems // J.Math.Phys., **7**(11), 2036-2045 (1966)
15. В.М.Лебедев. Элементарные решения многомерных задач переноса. В кн.: Вычислительные методы в теории переноса. М.: Атомиздат, 1969, с.71-87.
16. В.М.Лебедев. О нахождении решений кинетических задач // ЖВМ и МФ, **6**(5), 895-899 (1966)

17. E.Bereiss. Decomposition of the stationary isotropic transport in three independent space variables // Тез. кратких научн. сообщ. Международный конгресс математиков (Москва, 1966): т.12, М., 1966, с.3.
18. А.М.Кольчужкин, В.В.Учайкин. Введение в теорию прохождения частиц через вещество. М.: Атомиздат, 1978, 255 с.
19. А.С.Компанеец. Многократное рассеяние быстрых электронов и α - частиц в тяжелых элементах // ЖЭТФ, **15**(6), 235-243 (1945)
20. А.С.Компанеец. Многократное рассеяние тонких пучков быстрых электронов // ЖЭТФ, **17**(12), 1059-1062 (1947)
21. С.Moliere. Theorie der streuung schneller geladener teilchen 2. Mehrfach-und vielfachntrenung // Zeit. für Natturforsch., **3A**(1) 78-97 (1948)
22. Н.П.Калашников, В.С.Ремизович, М.И.Рязанов. Столкновения быстрых заряженных частиц в твердых телах. М.: Атомиздат, 1980, 272 с.
23. Б.Росси. Частицы больших энергий. М.: ГИТТЛ, 1953, 636с.
24. Д.Маннинг. Кинетика диффузии атомов в кристаллах. М.: Мир, 1971, 277с.
25. Л.Д.Ландау. О потерях энергии быстрыми частицами на ионизацию. Собр. трудов в 2-х т., М.: Наука, 1969, т.1, с.482-494.
26. П.В.Вавилов. Ионизационные потери тяжелых частиц больших энергий // ЖЭТФ, **32**(4) 920-923 (1957)
27. Н.Bichel. Ionization of protons near the end of their range // Phys.Rev., **120**(3), 1012-1014 (1960)
28. Д.А.Шулая. Линейное уравнение многоскоростной теории переноса // ЖВМ и МФ, **23**(5), 1124-1140 (1983)
29. И.Я.Померанчук. О флуктуациях ионизационных пробегов. Собр. научн. трудов в 3-х т., М.:Наука. 1972, т.2, 104-113.
30. В.С.Ремизович. Угловое и энергетическое распределение тяжелых нерелятивистских частиц в плоском поглотителе на больших глубинах // Атомная энергия, **36**(5), 394-395 (1974)
31. Н.А.Гунько, Э.А.Тропп. Асимптотическое преобразование упругого столкновительного члена в кинетическом уравнении для быстрых электронов // Письма в ЖТФ, **6**, 372-375 (1980)
32. В.А.Кузюк, А.Х.Рахматуллина. Некоторые асимптотические задачи теории переноса электронов // ЖВМ и МФ, **15**(5), 1248-1261 (1975)
33. D.Hilbert. Grundzüge einer allgemeinen theorie der linearen integralgleichungen. New York, Chelsea, 1953, 282s.

34. D.Hilbert. Begründung der kinetischen Gastheorie // Math. Ann., **72**(1), 562-577 (1912)
35. H.Grad. Asymptotic theory of the Boltzmann equation // Phys.Fluids, **6**(1), 147-181 (1963)
36. H.Grad. Singular and nonuniform limits of solutions of the Boltzmann equation. In book: Transprt theory (SIAM-AMS proceedings), **1**, 269-308 (1969)
37. К.Черчиньяни. Теория и приложения уравнения Больцмана. М.: Мир, 1978, 495 с.
38. Y.Sone. Asymptotic theory of flow of rarefied gas over a smooth boundary 1. In book: Rarefied gas dynamics (Proc. of the 6 Intern. Symposium on rarefied gas dynamics, Massachusetts, July, 1968), 1969, v.1, 243-254.
39. D.Hilbert. Grundzuge einer allgemeinen Theorie der linearen Integralgleichung. Leipzig und Berlin, 1912, 282 p.
40. E.Hecke. Uber orthogonalinvariante Integralgleichungen // Math. Ann., **78**, 398-404 (1917)
41. E.Hecke. Uber die Integralgleichung der kinetischen Gastheorie // Math. Zs., **12**, 274-286, (1922)
42. D.Burnett. The distribution of molecular velocities and the mean motion in a non-uniform gas // Proc. London Math. Soc. **40**, 382-435 (1935)
43. C.A.Word, D.Mintzer. Truncation procedure for the spatially homogeneous Boltzmann equation. // Phys. Fluids, **14**(3), 499-509 (1971)
44. H.Grad. On the kinetic theory of rarefied gases // Comm. Pure Appl. Math., **2**, 311 (1949)
45. H.Grad. Principles of the kinetic theory of gases // In «Hundbuch der Physik», 1958, Vol. 12.
46. K.Kumar. Polinomial Expansion in Kinetic Theory of Gases // Ann. Phys., **37**, 113-141 (1966)
47. G.Turchetti, M.Paolilli. The relaxation to equilibrium from a Boltzmann equation with isotropic cross section // Phys. Lett., **90A**(3), 123-126 (1982)
48. А.Я.Эндер, И.А.Эндер. Моментный метод для изотропного уравнения Больцмана // ЖТФ, **64**, вып.10, 38-53 (1994)
49. А.Я.Эндер, И.А.Эндер. Интеграл столкновений уравнения Больцмана и моментный метод. Санкт-Петербург, 2003, 224с.
50. А.Я.Эндер, И.А.Эндер. Аналитическое представление линейных ядер интеграла столкновений уравнения Больцмана для максвелловских молекул // Письма в ЖТФ, **37**(5), 9-14 (2011)
51. A.Ya.Ender, I.A.Ender, L.A.Bakaleinikov, E.Yu.Flegontova. Reccurence relations between kernels of the nonlinear Boltzmann collision integral // European Journal of Mechanics B /Fluids **36**, 17-24 (2012)
52. S.K.Loyalka. Temperature jump and thermal creep slip: Rigid sphere gas // Phys. Fluids A **1** (2), 403-408 (1989)

53. А.Н.Тихонов, А.А.Самарский, А.А.Арсеньев. Об одном методе асимптотических оценок интегралов // ЖВММФ, **12**(4), 1005-1012 (1972)
54. Э.А.Тропп. Асимптотическое расщепление многомасштабных статических и квазистационарных задач термомеханики и электродинамики сплошной среды. Автореф. Дисс... доктора физ.-мат. Наук. – Ленинград, 1984.
55. Н.Н.Лебедев. Специальные функции и их приложения. Ленинград., Гос. Изд. физ.-мат. лит., 1963, 358 с.
56. R.D.M.Garcia, C.E.Siewert. The viscous-slip, diffusion-slip and thermal-creep problems for a binary mixture of rigid spheres described by the linearized Boltzmann equation // Europ. J. Mech. B / Fluids **26**, 749 (2007)
57. G.Wick. Uber ebene diffusionprobleme // Zeit.Phys., **121**, 702-718 (1943)
58. С.Чандрасекар. Перенос лучистой энергии. М.:Изд.иностр.лит., 1953, 432с.
59. N.F.Mott. On the interpretation of the Relativity Wave Equation for Two Electrons // Proc. Roc. Soc. A, **124**(794), 422-425 (1929).
60. Р.К.Петеркоп. Теория ионизации атомов электронным ударом. Рига: Зинатне, 1975, 190 с.
61. Л.Д.Ландау, Е.М.Лифшиц. Квантовая механика. Нерелятивистская теория. М., Наука, 1974, 766 с.
62. F.Bloch. Bremsvermogen von atomen mit mehreren elektronen // Zeit. Fur Physik, **81**(6), 363-376 (1933)
63. R.R.Wilson. Range and ionization measurements on high speed protons // Phys. Rev., **60**(11), 749-753 (1941)
64. M.Berger. Electron multiple scattering in extended media // Rad. Research, **12**(4), 422-423 (1960)
65. P.Duncumb, C. Da Casa. Atomic number and absorption corrections: accuracy obtained in practice // Second National Conference on electron microprobe analysis (14 June, 1967, Boston), p.9.
66. M.Gryzinski. Two-particle collisions. 2. Coulomb collisions in laboratory system of coordinates // Phys. Rev., **138**(2A), 322-335 (1965)
67. Л.А.Бакалейников, Э.А.Тропп. Приближенные формы уравнения переноса для электронов средних энергий в твердом теле. Ленинград, 1982, 31 с. (Препринт / Физ.-техн. Ин-т им. А.Ф.Иоффе: № 784)
68. J.W.Motz, H.Olsen, H.W.Koch. Electron scattering without atomic or nuclear excitation // Rev. Mod. Phys., **36**(4), 881-928 (1964)
69. В.С.Вавилов. Действие излучения на полупроводники. М., Физматгиз, 1963, 264 с.

70. Ф.Платцман, П.Вольф. Волны и взаимодействия в плазме твердого тела. М., Мир, 1975, 436 с.
71. R.E.De Wames, W.F.Hall. Crystal binding effect on the multiple scattering of high-energy charged particles // Phys. Rev. Let., **17**(3), 122-125 (1966)
72. Л.А.Бакалейников. Исследование собственных чисел интеграла столкновений при упругом рассеянии быстрых электронов на экранированном кулоновском потенциале // ЖТФ, **52**(1), 147-149 (1982)
73. И.С.Градштейн, И.М.Рыжик. Таблицы интегралов, сумм, рядов и произведений. М.: ФМ, 1962, 1097с.
74. Л.А.Бакалейников. Асимптотическое преобразование неупругой части интеграла столкновений для быстрых электронов // ЖТФ, **54**(7), 1241-1245 (1984)
75. Д.А.Варшалович, А.Н.Москалев, В.К.Херсонский. Квантовая теория углового момента. Ленинград, Наука, 1975, 441 с.
76. Т.Като. Теория возмущения линейных операторов. М., Мир, 1972, 740 с.
77. И.М.Гельфанд, Г.Е.Шилов. Обобщенные функции и действия над ними. 2-е изд. М., Физматгиз, 1959, 430 с.
78. К.Кейз, П.Цвайфель. Линейная теория переноса. М., Мир, 1972, 384 с.
79. S.Chapman. On the law of distribution of molecular velocities, and on the theory of viscosity and thermal conduction, in a non-uniform simple monoatomic gas // Phil. Trans.Roy.Soc., Ser. A, **216**(543), 276-348 (1916)
80. S.Chapman. On the kinetic theory of the gas. Part 2. – Acomposite monoatomic gas: diffusion, viscosity and thermal conduction // Phil. Trans.Roy.Soc., Ser. A, **217**(553), 115-197 (1918)
81. В.Н.Латышев, В.А.Тупчиев. Асимптотическое разложение решения уравнения переноса нейтронов в случае малой средней длины свободного пробега // Дифф.ур., **19**(11), 1922-1927 (1983)
82. Л.А.Бакалейников, Э.А.Тропп. Пограничные слои в задаче релаксации пучка электронов средних энергий в полубесконечных тяжелых мишенях // ЖТФ, **56**(1) 16-26 (1986)
83. B.Nigam. Calculation of the scattering constant from theory of multiple scattering // Phys. Rev., **131**(1), 238-244 (1963)
84. W.Scott, H.Snyder. On scattering induced curvature for fast charged particles. – Phys.Rev., **78**(3), 223-229 (1950)
85. М.Ван-Дайк. Методы возмущений в механике жидкости. М., Мир, 1967, 310 с.
86. Дж.Коул. Методы возмущений в прикладной математике. М., Мир, 1972, 273 с.
87. Л.Д.Ландау. О потерях энергии быстрыми частицами на ионизацию. Собр. Трудов в 2-х т., М., Наука, 1969, т.1, с. 482-494.

88. H.E.Bishop. Some electron backscattering measurements for solid targets. In book: *Optique des rayone X et microanalyse*. Paris, Hermann, 1966, p.153-158.
89. D.B.Brown, R.E.Ogilvie. An electron transport model for the prediction of X-ray production and electron backscattering in electron microanalysis // *J.Appl.Phys.*, **37**(12), 4429-4433 (1966)
90. D.C.Joy, S.Luo. An empirical stopping power relationship for low-energy electrons // *Scanning* **11**, 176-180 (1989)
91. В.А.Смоляр. Диффузионная теория обратного рассеяния и проникновения электронов в полубесконечную мишень, не содержащая подгоночных параметров // *Радиотехника и электроника*, **24**(9), 1812-1819 (1979)
92. В.А.Смоляр, А.В.Еремин, В.В.Еремин. Распределение выделенной энергии и инжектированного заряда при нормальном падении на мишень пучка быстрых электронов // *ЖТФ*, **72**(4), 46-52 (2002)
93. M.V.Kruglov, I.K.Solomin, A.V.Lunev. Determination of the photoemission generation depth with use of experiments on the dynamic scattering of X-Rays // *Phys.Stat.Sol. (b)*, **133**(1), 47-55 (1986)
94. Boon K. Teo. *EXAFS: Basic Principals and Data Analysis S.-V.* Berlin, 1986, 295p.
95. *X-Ray Absorption. Principles, Applications, Techniques of EXAFS, SEXAFS and XANES /Ed. By D.C.Koningsberger & R.Prins.* New York; John Willey & Sons; Chichester, Prispene; Toronto; Singapore, 1991. Vol. 92. 673 p.
96. *Spectroscopy for Surface Science / Ed. R.G.H. Clark, R.E.Hester. / Advances in Spectroscopy.* Chichester (England), 1998. Vol. 26.
97. L. A. Bakaleinikov, S. G. Konnikov, K. Ju. Pogrebitsky, Yu. N. Yur'ev, A. A. Vereninov, R. Svagera, R. Kaitna, G. Barnegg-Golwig. A New Nondestructive Quantitative Composition Deph Profiling Technique Based on X-ray Exited Electron Emission // *Advances in X-Ray Analysis*, **35**, 1243-1246 (1992)
98. В.Н.Щемелев, И.Р.Тагиров, А.Буабеллу, Е.А.Созонтов. Контроль состава в приповерхностной области полупроводниковых кристаллов методом скачков рентгеновского фотоэффекта // *Поверхность*, № 11, 56-61 (1983)
99. В.Н.Щемелев. // *Вопросы электроники твердого тела*, № 8, 180-194 (1982)
100. D.Liljequist. *Electron Penetration in Solids and its Application to Mossbauer Spectroscopy.* USIP Report. Stockholm, 1979. 34 p.
101. D.Liljequist, T.Ekdal, U.Baverstam. Analysis of the electron transport in conversion electron Mossbauer spectroscopy (CEMS) // *Nuclear Instr. and Methods*, **155**(3), 529-538 (1978)

102. Л.А.Бакалейников, С.Г.Конников, К.Ю.Погребницкий, Д.Ж.Сайфидинов, Э.А.Тропп, Ю.Н.Юрьев. Определение функции выхода для электронов средних энергий на основе использования кинетического уравнения // ЖТФ, **64**(4), 9-16, (1994)
103. Л.А.Бакалейников, К.Ю.Погребницкий, Е.Ю.Флегонтова, Yang-Koo Cho, Hyun-Min Park. Расчет функции выхода и фотоэмиссии электронов средних энергий из образцов типа «слой на подложке» // ЖТФ, **72**(9), 119-129 (2002)
104. С.Чепмен, Т.Каулинг. Математическая теория неоднородных газов. ИЛ., 1960. 510 с.
105. D.Burnett. The distribution of velocities in slightly non-uniform gas // Proc.London Math. Soc., **39**, 385-430 (1935)
106. L.Sirovich. Dispersion relations in rarefied gas dynamics // Phys. Fluids, **6**(1), 10-20 (1963)
107. А.Я.Эндер, И.А.Эндер. // Аэродинамика / Под ред. Р.Н. Мирошина / СПб.:НИИХ.СПбгу, 2003. с. 179-203.
108. А.Я.Эндер, И.А.Эндер. Обобщение теоремы Хеке для нелинейного Больцмановского интеграла столкновений в осесимметричном случае // ЖТФ, **73**(2), 6-12 (2003)
109. А.Я.Эндер, И.А.Эндер. Связи между матричными элементами нелинейного Больцмановского интеграла столкновений в осесимметричном случае // ЖТФ, **72**(5), 1-9 (2002)
110. А.Я.Эндер, И.А.Эндер // Сиб. Журн. Инд. Мат., **6**(2), 156-164 (2003)
111. A.Ya.Ender, I.A.Ender. Polynomial expansions for the isotropic Boltzmann equation and invariance of the collision integral with respect to the choice of the basis functions // Phys. Fluids, **11**, 2720-2730 (1999)
112. Г.Бейтман, А.Эрдейи. Высшие трансцендентные функции. М., “Наука”, 1965, 294 с.
113. Дж.Уленбек, Дж.Форд. Лекции по статистической механике. М., “Мир”, 1965, 307 с.
114. М.А.Лаврентьев, Б.В.Шабат. Методы теории функций комплексного переменного. М., “Наука”, 1973, 736 с.
115. Л.А.Бакалейников, А.Я.Эндер, И.А.Эндер. Расчет линейного ядра интеграла столкновений в случае псевдомаксвелловских молекул // ЖТФ, **76**(9), 6-15 (2006).
116. Ф.Олвер. Асимптотика и специальные функции. М., “Наука”, Гл. ред. физ.-мат. лит. 1990, 528 с.
117. Л.А.Бакалейников, Е.Ю.Флегонтова, А.Я.Эндер, И.А.Эндер. Расчет линейного ядра интеграла столкновений для потенциала твердых шаров // ЖТФ, **79**(2), 22-35 (2009)
118. M.M.R.Williams. The Boltzmann equation for fast atoms // J.Phys. A: Math. Gen. **9**(5), 771, (1976)
119. I.N.Ivchenko, S.K.Loyalka, R.V.Tompson. On the collision kernels for gas mixtures // Ann. Nucl. Energy, **23**(18), 1489-1495 (1996)

120. C.L.Pekeris, Z.Alterman, L.Finkelstein and K.Frankowski. // Phys. Fluids, **5**(12), 1608-1616 (1962)
121. Л.Вальдман. Явления переноса в газах при среднем давлении // В кн. Термодинамика газов, М., Машиностроение, 1970.
122. А.Я.Эндер, И.А.Эндер, Л.А.Бакалейников. Некоторые общие свойства нелинейного интеграла столкновений уравнения Больцмана // ЖТФ **80**(10), 12-21 (2010)
123. А.Я.Эндер, И.А.Эндер, Л.А.Бакалейников, Е.Ю.Флегонтова. Матричные элементы и ядра интеграла столкновений уравнения Больцмана // ЖТФ, **81**(4), 24-34 (2011)
124. А.Н.Тихонов, А.А.Самарский. Асимптотическое разложение интегралов с медленно убывающим ядром // ДАН СССР, **126**(1), 26-29 (1959)
125. Г.Бейтмен, А.Эрдейи. Таблицы интегральных преобразований. Т.1. Москва, Наука, 1969, 344с.
126. А.Эрдейи. Асимптотические разложения. Москва, Физматгиз, 1962, 128 с.
127. А.Я.Эндер, И.А.Эндер, Л.А.Бакалейников, Е.Ю.Флегонтова. Построение некоторых ядер нелинейного интеграла столкновений уравнения Больцмана с помощью преобразования Лапласа // ЖТФ, **82**(6), 1-8 (2012)
128. А.В.Бобылев. О точных решениях уравнения Больцмана // ДАН СССР, **225**(6), 1296-1299 (1975)
129. И.Н.Колышкин, А.Я.Эндер, И.А.Эндер. Численное решение задач изотропной релаксации методом разложения по максвеллианам // ЖВММФ, **28**(6), 902-915 (1988)
130. Д.Белл, С.Глесстон. Теория ядерных реакторов. Пер. с англ. М., Атомиздат, 1974
131. Б.Р.Бергельсон, А.П.Суворов, Б.З.Торлин. Многогрупповые методы расчета защиты от нейтронов. М., Атомиздат, 1970.
132. Б.Дэвисон. Теория переноса нейтронов. Пер. с англ. Под ред. Г.И. Марчука, М., Атомиздат, 1960
133. Защита от ионизирующих излучений. Т.1, М., Атомиздат, 1969
134. Г.И.Марчук. Методы расчета ядерных реакторов, М., Атомиздат, 1961
135. P.J.Bunyan, J.L.Schonfelder. Polarization by mercury of 100 to 2000 eV electrons // Proc.Phys.Soc., **85**(3), 455-462 (1965)
136. M.J.Seaton. The Hartree-Fock Equations for Continuous States with Application to Electron Excitation of Ground Configuration Terms of O // Phil. Trans. R. Soc. A, **245**(901), 469-499 (1953)
137. D.W.Walker. Relativistic effects in low energy electron scattering from atoms // Adv. Phys., **20**, 257-323 (1971)

138. R.A.Bonham, T.G.Strand. Analytical Expression for Potentials of Neutral Thomas-Fermi-Dirac Atoms and for the Corresponding Atomic Scattering Factors for X Rays and Electrons // J. Chem. Phys., **39**(9), 2200 (1963)
139. A.Jablonsky, F.Salvat and C.J.Powell. Evaluation of elastic-scattering cross sections for electrons and positrons over a wide energy range // Surf. Interface Anal., **37**, 1115-1123 (2005)
140. E.Reichert. Die Winkelverteilung im Bereich 30 bis 155° von elastisch an Golddampf gestreuten Elektronen mit Energien zwischen 150 und 1900 eV // Z.Physik A, **173**, 392 (1963)
141. Z.-J.Ding, H.Yoshikawa, R.Shimizu. Angular Distribution of Elastically Reflected Electrons from Au // Phys stat. Sol. (b), **161**(1), 257-269 (1990)
142. A. Jablonski, F. Salvat, and C. J. Powell, NIST Standard Reference Data-base 64 version 3.1, 2003, <http://www.nist.gov/srd/nist64.htm>
143. "Elastic scattering of electrons and positrons," ICRU Report No. 77, 2007; ICRU Report 77, Journal of the ICRU, **7**(1), 2007
144. M.Inokuti. Inelastic Collisions of Fast Charged Particles with Atoms and Molecules – The Bethe Theory Revisited // Rev.Mod.Phys., **43**, 297-347 (1971)
145. Р.К.Петеркоп. Теория ионизации атомов электронным ударом. Рига: Зинатне, 1975, 190 с.
146. Б.А.Зон, В.Б.Зон. Логарифмически точные полные сечения рассеяния быстрых электронов на атомах // ЖТФ, **77**(1), 38- 41 (2007)
147. L.Van Hove. Correlations in Space and Time and Born Approximation Scattering in Systems of Interacting Particles // Phys.Rev., **95**, 249-262 (1954)
148. D.Pines. Elementary Excitations in Solids. Benjamin, New York, 1964.
149. J.Lindhard. Kgl.Danske Videnskab. Selskab, Mat.-Fys. Medd., **28**, 8 (1954)
150. J.P.Ganachaud and M.A.Cailler. Monte Carlo calculation of secondary electron emission of normal metals // Surf. Sci., **83**, 498-530 ((1979)
151. M.Cailler and J.P.Ganachaud. Secondary electron emission from solids II. Theoretical description. In Fundamental Electron and Ion Beam Interactions with solids for Microscopy, Microanalysis and Microlithography (Eds. Schou J., Kruit P., Newbary D.E.), Scanning Microscopy Supplement 4, Scanning Microscopy International, Chicago, 1990, 81-110.
152. J.P.Walter, M.L.Cohen. Frequency- and Wave-Vector-Dependent Dielectric Function for Silicon // Phys. Rev. **B5**, 3101-3110 (1972)
153. J.P.Walter, M.L.Cohen. Frequency- and Wave-Vector-Dependent Dielectric Function for Ge, GaAs, and ZnSe // Phys. Rev. **B6**, 3800-3804 (1972)
154. F.Nizzol. A model calculation of the dielectric function in trigonal Se and Te with local-field corrections included // J.Phys. C **11**(4), 673-684 (1978)

155. K.Sturm. Electron energy loss in simple metals and semiconductors // Adv.Phys. **31**, 1-64 (1982)
156. D.R.Penn. Electron mean-free-path calculations using a model dielectric function // Phys.Rev.B. **35**, 482-486 (1987)
157. J.C.Ashley. Interaction of low-energy electrons with condensed matter: stopping powers and inelastic mean free paths from optical data // J.Electron Spectrosc. Related Phenomena, **46**(1), 199-214 (1988)
158. Z.-J.Ding, R.Shimizu. Inelastic collisions of kV electrons in solids // Surf.Sci. **222**(2-3), 313-331 (1989).
159. Z.-J.Ding. Fundamental studies on the interactions of kV electrons with solids for applications to electron spectroscopies. PHD Thesis, Osaka University, Japan, 1990. 219 c.
160. S.Tanuma, C.J.Powell and D.R.Penn. Calculation of electron inelastic mean free paths for 31 materials // Surf. Interface Anal. **11**(11), 577-589 (1988).
161. W.Brandt and J.Reinheimer. Theory of Semiconductor Response to Charged Particles // Phys. Rev. B. **2**, 3104-3112 (1970)
162. B.I.Lundqvist Single-particle spectrum of the degenerate electron gas // Phys. kondens. Materie, **6**(3), 206-217 (1967)
163. C.M.Kwei, C.J.Tung. Stopping power of semiconducting III-V compounds for low-energy electrons // J. Phys. D. **19**, 255-263 (1986)
164. S.Tougaard. Quantitative analysis of the inelastic background in surface electron spectroscopy // Surf. Interface Anal. **11**(9), 453-472 (1988).
165. Е.Ю.Флегонтова, Л.А.Бакалейников, К.Ю.Погребницкий, Hwack-Joo Lee, Yang-Koo Cho, Hyun-Min Park and Yong-Won Song. Эффективная реализация расчета потери энергии и угла рассеяния при неупругом взаимодействии электрона с веществом // ЖТФ, 70(12), 6-11 (2000)
166. S.F.Mao, Y.G.Li, R.G.Zeng and Z.-J.Ding. Electron inelastic scattering and secondary electron emission calculated without the single-pole approximation // J. Appl. Phys. **104**, 114907 (2008).
167. D.R.Penn. Electron mean-free-path calculations using a model dielectric function // Phys. Rev. B **35**, 482 (1987)
168. S.Tanuma, C.J.Powell, and D.R.Penn. Calculations of electron inelastic mean free paths VIII. Data for 15 elemental solids over the 50–2000 eV range // Surf. Interface Anal. **37**, 1 (2005)
169. S.Tanuma, C.J.Powell, and D.R.Penn. Calculations of stopping powers of 100 eV to 30 keV electrons in 10 elemental solids // Surf. Interface Anal. **37**, 978-988 (2005)

170. C.J.Powell and A.Jablonski. NIST Electron Inelastic-Mean-Free-Path Database - Version 1.2, National Institute of Standards and Technology, Gaithersburg, MD (2010).
171. C.Jacoboni, and L.Reggiani. The Monte Carlo method for the solution of charge transport in semiconductors with applications to covalent materials // *Rev. Mod. Phys.*, **55**, 645-705 (1983)
172. M.Green. A Monte Carlo Calculation of the Spatial Distribution of Characteristic X-ray Production in a Solid Target // *Proc. Phys. Soc.* **82**, 204-215 (1963)
173. K.Murata, T.Matsukawa, R.Shimizu. Monte Carlo calculations on electron scattering in a solid target // *Jpn.J.Appl.Phys.* **10**, 678-686 (1971)
174. D.F.Kyser, K.Murata. Quantitative Electron Microprobe Analysis of thin films on substrates // *IBM J. Res. Develop.* **18**(4), 352-369 (1974)
175. D.E.Newbury, R.L.Myklebust. In: "A Monte Carlo electron trajectory simulation for analytical electron microscopy", Ed. Geiss R.H., San Francisco: San Fransico Press Inc., 1981, p 91-98.
176. D.O.Schneider, D.V.Cormack. Monte Carlo Calculation of Electron Energy Loss // *Radiation research* **11**, 418 (1959)
177. M.J.Berger. Monte Carlo calculation of the penetration and diffusion of fast charged particles. In: "Methods in Computational Physics", vol. 1, Eds. Alder B., Fernback S., Rotenberg M., Academic Press, New York, 1963, p.135-215.
178. R.Shimizu, T.Ikuta, K.Murata. The Monte Carlo technique as applied to the fundamentals of EPMA and SEM // *J.Appl.Phys.* **43**(10), 4233 (1972)
179. L.Reimer, E.R.Krefting. The effect of scattering models on the results of Monte Carlo calculations. In "Use of Monte Carlo calculations in electron probe microanalysis and scanning electron microscopy", Eds. K.F.J. Heinrich, D.E.Newbury, H.Jakowitz, NBS Special Publ 460, U.S. Government Printing Office, Washington, 1976, p.45
180. S.Ichimura, R.Shimizu. Backscattering corrections for quantitative Auger analysis: I. Monte Carlo calculations of backscattering factors for standard materials // *Surf.Sci.*, **112**(3), 386-408 (1981)
181. K.Murata, D.F.Kyser, C.H.Ting. Monte Carlo simulation of fast secondary electron producing in electron beam resist // *J.Appl.Phys.*, **52**, 4396 (1981)
182. L.Reimer, D.Stelter. FORTRAN-77 monte carlo program for minicomputers using mott cross-sections // *Scanning* **8**, 265 (1986)
183. T.S.Rao-Sahib, D.B.Wittry. X-ray continuum from thick elemental targets for 10-50-keV electrons // *J.Appl.Phys.*, **45**, 5060 (1974)
184. D.C.Joy. A model for calculating secondary and backscattered electron yields // *J.Microsc* **147**(1), 51-64 (1987)

185. S.C.Luo, Y.S.Zhang, Z.Q.Wu. A Monte Carlo calculation of secondary electrons emitted from Au, Ag and Cu // *J.Microsc.* **148**(3), 289-295 (1987)
186. C.J.Tung, J.C.Ashley, R.H.Ritchie. Electron inelastic mean free paths and energy losses in solids II: Electron gas statistical model // *Surf.Sci.* **81**, 427-439 (1979)
187. A.Desalvo, R.Rosa. Monte Carlo simulation of elastic and inelastic scattering of electrons in thin films. II. Core electron losses // *J.Phys. D* **20**(6), 790-796 (1987)
188. E.H.Darlington. Backscattering of 10-100keV electrons from thick targets // *J. Phys. D: Appl. Phys.*, **8**, 85, (1975)
189. C.J.Powell, J.B.Swan. Origin of the Characteristic Electron Energy Losses in Aluminum // *Phys Rev.*, **115**, 869-875 (1959)
190. M.Yasuda, H.Kawata, K.Murata. Study of the spatial distribution of backscattered electrons from a gold target with a new Monte Carlo simulation // *J.Appl.Phys.*, **77**, 4706-4713 (1995)
191. A.Jablonski, S.Toogaard. Escape probability of electrons from solids. Influence of elastic electron scattering // *Surf. Sci.*, **432**(3), 211-227 (1999)
192. A.Jablonski, H.Ebel. Effects of photoelectron collisions in quantitative XPS // *Surf. Interface Anal.*, **6**(1), 21-28 (1984)
193. A.Jablonski, H.Ebel. Comparison of electron attenuation lengths and escape depths with inelastic mean free paths // *Surf. Interface Anal.*, **11**(12), 627-632 (1988)
194. A.Jablonski, S.Tougaard. Comparison of the attenuation lengths and the inelastic mean-free path for photoelectrons in silver // *J. Vac. Sci. Technol., A* **8**, 106 (1990)
195. I.S.Tilinin. Escape probability of Auger electrons from noncrystalline solids: Exact solution in the transport approximation // *Phys. Rev. B* **46**, 13739-13746 (1992)
196. W.S.M.Werner, H.Stori, H.Winter. Quantitative model for the surface sensitivity in Auger-photoelectron coincidence spectroscopy (APECS) // *Surf. Sci.*, **518**, L569-L576 (2002)
197. S.Tougaard, P.Sigmund. Influence of elastic and inelastic scattering on energy spectra of electrons emitted from solids // *Phys.Rev.B* **25**, 4452-4466 (1982)
198. Л.И.Добрецов, М.В.Гомоюнова. Эмиссионная электроника. Москва, 1966, 564 с.
199. G.D.Archard. Back Scattering of Electrons // *J.Appl.Phys.* **32**, 1505 (1961)
200. L.A.Bakaleinikov, K.Yu.Pogrebitsky, E.A.Tropp, Yu.N.Yur'ev, Se Ahn Song. Simulation of the X-ray induced electron emission at the absorption edge // *The Nucleus*, **34**(1-2), 1-9 (1997)
201. R.Castaing. // *Adv. in Electronics and Electron Physics*, **13**, 317-386 (1960)
202. G.S.Almasi, J.Blair, R.E.Ogilvie and R.J.Schwartz. A Heat-Flow Problem in Electron-Beam Microprobe Analysis // *J.Appl.Phys.*, **36**, 1848-1854 (1965).
203. C.F.Friskney, C.W.Haworth. Heat-Flow Problems in Electron-Probe Microanalysis // *J.Appl.Phys.*, **38**, 3796-3798 (1967).

204. H.Amano, M.Kito, K.Hiromatsu, I.Akasaki. P-Type conduction in Mg-doped GaN treated with low-energy electron beam irradiation // Jpn. J.Appl.Phys., **28**, L2112-L2114 (1989)
205. С.К.Обыден, Г.А.Перловский, Г.В.Сапарин, С.И.Попов. Исследование температурных полей, наводимых в образцах нитрида галлия электронным зондом // Изв. АН Сер. Физ. **48**, 2374-2377 (1984)
206. Л.А.Бакалейников, Е.В.Галактионов, В.В.Третьяков, Э.А.Тропп. Расчет теплового воздействия электронного зонда на образец нитрида галлия // ФТТ, **43**(5), 779-785 (2001)
207. И.Г.Стойнова, Е.М.Белавцева. Исследование термического действия электронов на объект в электронном микроскопе // Изв. АН СССР. Сер. Физ., **23**, 754-757 (1959)
208. И.Г.Стойнова, И.В.Анашкин. Физические основы методов просвечивающей электронной микроскопии. М.: Наука, 1972.
209. В.Н.Королук, Ю.Г.Лаврентьев. О нагреве минералов под действием электронного зонда В кн.: Рентгеновский микроанализ с электронным зондом в минералогии. Л.: Наука, 1980, с.7-13.
210. М.Н.Филиппов. Оценка теплового воздействия электронного зонда в растровой электронной микроскопии и рентгеноспектральном микроанализе // Изв. АН. Сер. Физ. 1993, 57(8), 165-171 (1993).
211. T.E.Everhart, P.H.Hoff. Determination of Kilovolt Electron Energy Dissipation vs Penetration Distance in Solid Materials // J.Appl.Phys., **42**, 5837-5846 (1971).
212. Электронная база данных <http://www.ioffe.rssi.ru/ES>
213. H.-J.Fitting, H.Glaefke, W.Wild. Electron penetration and energy transfer in solid targets // Phys. Stat. Sol. (a), **43**, 185-190 (1977)
214. С.Г.Конников, В.А.Соловьев, В.Е.Уманский, В.М.Чистяков. Функция генерации электронно-дырочных пар в полупроводниках $A^{III}B^V$ при возбуждении электронным пучком // ФТП, **21**, 2028 (1987)
215. Н.Н.Лебедев, И.П.Скальская, Я.С.Уфлянд. Сборник задач по математической физике. М.: Гос. Изд. Техничко-Теор. Лит., 1955
216. K.Kanaya, S.Okayama. Penetration and energy-loss theory of electrons in solid targets // J.Phys. D. Appl. Phys., **5**(1), 43-58 (1972)
217. Растровая электронная микроскопия и рентгеновский анализ, Ред. В.И.Петрова, М., Мир, 1984.
218. L.A. Bakaleinikov, E.Yu.Flegontova, E.Zolotoyabko. Combined x-ray-electron imaging techniques: limitation on lateral resolution // Journal of electron Spectroscopy and Related Phenomena, **151**, 97-104 (2006)

219. E. H. Anderson, D.L.Olynick, B.Harteneck et al. Nanofabrication and diffractive optics for high resolution x-ray applications // J. Vac. Sci. Technol. B **18** (6), 2970-2975 (2000).
220. W.Chao, B.D.Harteneck, J.A.Liddle, E.H.Anderson, and D.T.Attwood. Soft X-ray microscopy at a spatial resolution better than 15 nm // Nature, **435**, 1210-1214 (2005)
221. U.Lev, S.Heun, A.Locatelli, and E.Zolotoyabko. Imaging of ferroelectric thin films by X-ray photoemission electron microscopy (XREEM) // Ultramicroscopy **104**, 169-175 (2005)
222. H.Seiler. Secondary electron emission in the scanning electron microscope // J. Appl. Phys. **54**, R1-R18 (1983)
223. B.L.Henke, J.Liesegang, and S.D.Smith. Soft-x-ray-induced secondary-electron emission from semiconductors and insulators: Models and measurements // Phys. Rev. B **19** 3004-3021 (1979)
224. B.L.Henke, J.P.Knauer and K.Premaratne. The characterization of x-ray photocathodes in the 0.1-10-keV photon energy region // J. Appl. Phys. **52**, 1509-1520 (1981)
225. B.Davison and J.B.Sykes. Neutron Transport Theory. Oxford University Press, 1957
226. D.A.Verner, D.G.Yakovlev, I.M.Band, and M.B.Trzhaskovskaya. Subshell Photoionization Cross Sections and Ionization Energies of Atoms and Ions from He to Zn // Atom. Data and Nucl. Data Tables **55**, 233-280 (1993)
227. Z.-J.Ding, H.M.Li, K.Goto, Y.Z.Jiang, and R.Shimizu. Energy spectra of backscattered electrons in Auger electron spectroscopy: comparison of Monte Carlo simulations with experiment // J. Appl. Phys., **96**, 4598 (2004).
228. E.Bauer. The possibilities for analytical methods in photoemission and low-energy microscopy // Ultramicroscopy, **36**(1-3), 52-62 (1991)
229. Л.А. Бакалейников, Я.В. Домрачева, М.В. Заморянская, Е.В. Колесникова, Т.Б. Попова, Е.Ю. Флегонтова. Послойный рентгеноспектральный микроанализ полупроводниковых структур методом вариации энергии электронного зонда // ФТП, **43**(4), 568-573 (2009)
230. J.A.Nedler, R.Mead. A Simplex method for function minimization // Computer Journal, **7**, 308-313 (1965)
231. С.Г.Конников, А.А.Гуткин, М.В.Заморянская, Т.Б.Попова, А.А.Ситникова, А.А.Шахмин, М.А.Яговкина. Комплексная диагностика гетероструктур с квантово-размерными слоями // ФТП, **43**(9), 1280-1287 (2009)
232. J.-L.Pouchou. X-ray microanalysis of thin surface films and coatings // Microchim. Acta, **138**, 133-152 (2002)

233. T.M.Phung, J.M.Jensen, D.C.Johnson, J.J.Donovan, B.G.McBurnett. Determination of the composition of Ultra-thin Ni-Si films on Si: constrained modeling of electron probe microanalysis and X-ray reflectivity data // X-Ray Spectrometry, **37**, 608-614 (2008)
234. T.Nagatomi. Monte-Carlo modeling of electron-excited X-ray emission from bulk materials and thin-film/substrate systems // Surf.Interf.Anal., **37**(11), 887-894 (2005)
235. R.Gauvin. Quantitative X-ray microanalysis of heterogeneous materials using Monte Carlo simulations // Microchim.Acta, **155**, 75-81 (2006)
236. X.Llovet, C.Merlet. Electron probe microanalysis of thin films and multilayers using the computer program XFILM // Microsc.Microanal., **16**(1), 21-32 (2010)
237. Т.Б.Попова, Л.А.Бакалейников, Е.Ю.Флегонтова, А.А.Шахмин, М.В.Заморянская. Рентгеноспектральный микроанализ гетероструктур с наноразмерными слоями // ФТП, **45**(2), 263-267 (2011)
238. Т.Б.Попова, Л.А.Бакалейников, М.В.Заморянская, Е.Ю.Флегонтова. Рентгеноспектральный микроанализ полупроводниковых эпитаксиальных гетероструктур на основе моделирования транспорта электронов методом Монте-Карло // ФТП, **42**(6), 686-691 (2008)

Список основных публикаций по теме диссертации

1. Л. А. Бакалейников, Э. А. Тропп. Асимптотическая форма уравнения переноса для быстрых электронов с учетом динамики атома в решетке кристалла // ЖТФ, **51**, 233-238 (1981).
2. Л. А. Бакалейников. Исследование собственных чисел интеграла столкновений при упругом рассеянии быстрых электронов на экранированном кулоновском потенциале. // ЖТФ, **52**, 147-149 (1982).
3. Л. А. Бакалейников. Асимптотическое преобразование неупругой части интеграла столкновений для быстрых электронов // ЖТФ, **54**, 1241-1245 (1984).
4. Л. А. Бакалейников, Э. А. Тропп. Пограничные слои в задаче релаксации пучка электронов средних энергий в полубесконечных тяжелых мишенях // ЖТФ, **56**, 16-26 (1986).
5. Л. А. Бакалейников, Э. А. Тропп. Структура решения кинетического уравнения в задаче о взаимодействии электронного пучка с тяжелой мишенью // В кн «Методы рентгеноспектрального анализа», Новосибирск, «Наука», Сиб.Отд. , 1986, стр.111-120.
6. Л. А. Бакалейников, С. Г. Конников, В. З. Латута, К. Ю. Погребницкий, Ю. Г. Пухов, Н. Н. Фалеев. Способ определения состава и толщин слоев в многослойных твердых телах. // Авт. свид. №1373139.
7. Л. А. Бакалейников, С. Г. Конников, В. А. Соловьев, В. Е. Уманский. Анизотропия энергетического спектра отраженных электронов на гетеропереходе // Изв.АН СССР, сер. Физическая, **51**, 458-461 (1987).
8. L. A. Bakaleinikov, E. A. Tropp The kinetic equation based calculation of the electron distribution in the target exposed to the electron beam // X-Ray Spectrometry, **23**, 125-129 (1994).
9. Л. А. Бакалейников, С. Г. Конников, К. Ю. Погребницкий, Д. Ж. Сайфидинов, Э. А. Тропп, Ю. Н. Юрьев. Определение функции выхода для электронов средних энергий на основе использования кинетического уравнения // ЖТФ, **64**, 9-16 (1994).
10. L. A. Bakaleinikov, S. G. Konnikov, K. Ju. Pogrebitsky, Yu. N. Yur'ev, A. A. Vereninov, R. Svagera, R. Kaitna, G. Barnegg-Golwig. A New Nondestructive Quantitative Composition Deph Profiling Technique Based on X-ray Exited Electron Emission // Advances in X-Ray Analysis, **35**, 1243-1246 (1992).
11. Yu. N. Yur'ev, K. Ju. Pogrebitsky, L. A. Bakaleinikov, I. I. Lodyzhensky and S. G. Konnikov. Simulation of X-ray Exited Electron Emission in Vicinity of K-shell Electron Binding Energies // Phys.Low.-Dim.Struct., **8**, 55-64 (1994).

12. L. A. Bakaleinikov, V. V. Tretyakov. The influence of elastic and ionization cross section approximations on the result of Monte Carlo simulation // Scanning, **16**, Suppl.IV, May/June, IV-61 – IV-62 (1994).
13. L. A. Bakaleinikov, V. V. Tretyakov. The influence of film composition and features of the electron-matter interaction on X-ray generation in substrate in film/substrate system // Scanning, **18**, 231 (1996).
14. L. A. Bakaleinikov, S. G. Konnikov, K. Ju. Pogrebitsky, E. A. Tropp, Yu. N. Yur'ev, S. A. Song. Simulation of the X-ray Induced Electron Emission at the Absorption Edge // The Nucleus, **34**, 1-9 (1997).
15. Е. Ю. Флегонтова, Л. А. Бакалейников, К. Ю. Погребницкий, Hwack-Joo Lee, Yang-Koo Cho, Hyun-Min Park and Yong-Won Song. Эффективная реализация расчета потери энергии и угла рассеяния при неупругом взаимодействии электрона с веществом // ЖТФ, **70**, 6-11 (2000).
16. Е. Ю. Флегонтова, Л. А. Бакалейников, К. Ю. Погребницкий, Hwack-Joo Lee, Yang-Koo Cho, Hyun-Min Park and Yong-Won Song. Аналитический и численный подходы к расчету функции выхода электронов средних энергий из однородных образцов // ЖТФ, **71**, 14-20 (2001).
17. Е. Ю. Флегонтова, Л. А. Бакалейников, К. Ю. Погребницкий, Hwack-Joo Lee, Yang-Koo Cho, Hyun-Min Park and Yong-Won Song. Расчет функции выхода и фотоэмиссии электронов средних энергий из образцов типа слой на подложке // ЖТФ, **72**, 119-129 (2002).
18. Л. А. Бакалейников, Е. В. Галактионов, В. В. Третьяков, Э. А. Тропп. Расчет теплового воздействия электронного зонда на образец нитрида галлия // ФТТ, **43**, 779-785 (2001).
19. Л. А. Бакалейников, Э. А. Тропп, А. Я. Эндер, И. А. Эндер. Асимптотика матричных элементов интеграла столкновений в изотропном случае // ЖТФ, **73**, 12-23 (2003).
20. Л. А. Бакалейников, М. В. Заморянская, Е. И. Колесникова, В. И. Соколов, Е. Ю. Флегонтова. Модификация диоксида кремния электронным пучком // ФТТ, **46**, 989-994 (2004).
21. Л. А. Бакалейников, Е. Ю. Флегонтова, К. Ю. Погребницкий, И. В. Еремин. Теоретические принципы работы полупроводникового детектора, основанного на p-n-переходе // ЖТФ, **74**, 77-85 (2004).
22. L. A. Bakaleinikov, E. Yu. Flegontova, E. Zolotoyabko. Combined x-ray-electron imaging techniques: limitation on lateral resolution // Journal of Electron Spectroscopy and Related Phenomena, **151**, 97-104 (2006).
23. Л.А.Бакалейников, А.Я.Эндер, И.А.Эндер. Расчет линейного ядра интеграла

- столкновений в случае псевдомаксвелловских молекул // В кн. «Вопросы математической физики и прикладной математики», СПб, 2005, 133-148.
24. Л. А. Бакалейников, А. Я. Эндер, И. А. Эндер. Расчет линейного ядра интеграла столкновений в случае псевдомаксвелловских молекул // ЖТФ, **76**, 6-15 (2006).
25. Т. Б. Попова, Л. А. Бакалейников, М. В. Заморянская, Е. Ю. Флегонтова. Рентгеноспектральный микроанализ полупроводниковых эпитаксиальных гетероструктур на основе моделирования транспорта электронов методом Монте-Карло // ФТП, **42**, 686-691 (2008).
26. E. Yu. Flegontova, L. A. Bakaleinikov, Ki-Yong Nam, Jung Gon Park, Kyong-Woo Kim, Kwon Su Chon, Kwon-Ha Yoon. Monte Carlo Simulation of X-ray Source Characteristics Using MCPETS and MCNPX Codes for Mammography // Journal of the Korean Physical Society, **51**, 65-77 (2007).
27. Л. А. Бакалейников, Е. Ю. Флегонтова, А. Я. Эндер, И. А. Эндер. Расчет линейного ядра интеграла столкновений для потенциала твердых шаров // ЖТФ, **79**, 22-35 (2009).
28. T. B. Popova, E. Yu. Flegontova, L. A. Bakaleinikov, and M. V. Zamoryanskaya. Monte Carlo calculations in X-ray microanalysis of epitaxial layers // Microchimica Acta, **161**, 459-463 (2008).
29. Y. V. Domracheva, L. A. Bakaleinikov, E. Y. Flegontova, V. N. Jmerik, T. B. Popova, M. V. Zamoryanskaya. Investigation of In, Ga, N layers by local methods // Microchimica Acta, **161**, 371-375 (2008).
30. Л. А. Бакалейников, Я. В. Домрачева, М. В. Заморянская, Е. В. Колесникова, Т. Б. Попова, Е. Ю. Флегонтова. Послойный рентгеноспектральный микроанализ полупроводниковых структур методом вариации энергии электронного зонда // ФТП, **43**, 568-573 (2009).
31. А. Я. Эндер, И. А. Эндер, Л. А. Бакалейников. Некоторые общие свойства нелинейного интеграла столкновений уравнения Больцмана // ЖТФ, **80**, 12-21 (2010).
32. А. Я. Эндер, И. А. Эндер, Л. А. Бакалейников, Е. Ю. Флегонтова. Матричные элементы и ядра интеграла столкновений уравнения Больцмана // ЖТФ, **81**, 24-34 (2011).
33. А. Я. Эндер, И. А. Эндер, Л. А. Бакалейников, Е. Ю. Флегонтова. О некоторых общих свойствах нелинейных ядер интеграла столкновений уравнения Больцмана // В кн. «Вопросы математической физики и прикладной математики», СПб, 2010, 8-17.
34. Т. Б. Попова, Л. А. Бакалейников, Е. Ю. Флегонтова, А. А. Шахмин, М. В. Заморянская. Рентгеноспектральный микроанализ гетероструктур с наноразмерными слоями // ФТП, **45**, 263-267 (2011).
35. А. Я. Эндер, И. А. Эндер, Л. А. Бакалейников. Связи между нелинейными ядрами интеграла столкновений // ДАН, **437**, 1-3 (2011).

36. А. Я. Эндер, И. А. Эндер, Л. А. Бакалейников, Е. Ю. Флегонтова. Построение некоторых ядер нелинейного интеграла столкновений уравнения Больцмана с помощью преобразования Лапласа // ЖТФ, **82**, 1-8 (2012).

37. A. Ya. Ender, I. A. Ender, L. A. Bakaleinikov, E. Yu. Flegontova. Recurrence relations between kernels of the nonlinear Boltzmann collision integral // Europ.J.Mech B/Fluids **36**, 17-24 (2012).