НОВЫЙ ПОДХОД К РАСЧЕТУ СЕЧЕНИЯ РАДУЖНОГО РАССЕЯНИЯ АТОМОВ И ИОНОВ

В. П. Кощеев[1,а], **Ю. Н. Штанов**[2,б]

[1] *Московский авиационный институт (национальный исследовательский университет), филиал «Стрела», г. Жуковский, Московская область, Российская Федерация*

[2] *Тюменский индустриальный университет, филиал «Сургутский институт нефти и газа», г. Сургут, Российская Федерация*

[а] *ORCID: https://orcid.org/0000-0002-0724-9760,* ✍ *koshcheev1@yandex.ru*

[б] *ORCID: https://orcid.org/0000-0002-5822-3368, yuran1987@mail.ru*

Аннотация: дифференциальное сечение радужного рассеяния атомов и ионов вычислено в первом порядке теории возмущений с учетом усреднения по коллективным колебаниям атомных электронов и ядер. Показано, что дифференциальное сечение радужного рассеяния атома на атоме равно нулю при нулевом угле вылета, а при рассеянии иона на атоме не равно нулю. Показано, что при нулевом угле вылета должен наблюдаться дискретный спектр значений сечения радужного рассеяния, пропорциональный квадрату степени ионизации иона.

Ключевые слова: радужное рассеяние, теория возмущений, полная энергия, сечение рассеяния, атом, ион, степень ионизации.

Для цитирования: Кощеев В. П., Штанов Ю. Н. Новый подход к расчету сечения радужного рассеяния атомов и ионов. *Успехи кибернетики.* 2026;7(3):40–44.

Поступила в редакцию: 19.07.2026. *В окончательном варианте: 20.09.2026.*

A NEW APPROACH TO DETERMINING RAINBOW SCATTERING CROSS SECTIONS FOR ATOMS AND IONS

V. P. Koshcheev[a], **Yu. N. Shtanov**[b]

[1] *Moscow Aviation Institute (National Research University), Strela Branch, Zhukovsky, Moscow Region, Russian Federation*

[2] *Industrial University of Tyumen, Surgut Branch, Surgut, Russian Federation*

[a] *ORCID: https://orcid.org/0000-0002-0724-9760,* ✍ *koshcheev1@yandex.ru*

[b] *ORCID: https://orcid.org/0000-0002-5822-3368, yuran1987@mail.ru*

Abstract: we calculated the differential cross section for rainbow scattering of atoms and ions using first-order perturbation theory and accounting for the collective oscillations of atomic electrons and nuclei. We found that the differential cross section for atom–atom rainbow scattering is zero at zero scattering angle, whereas it remains nonzero for ion–atom scattering. We also found that, at zero scattering angle, the rainbow-scattering cross section exhibits a discrete set of values proportional to the square of the ion's charge state.

Keywords: rainbow scattering, perturbation theory, total energy, scattering cross-section, atom, ion, degree of ionization.

Cite this article: Koshcheev V. P., Shtanov Yu. N. A New Approach to Determining Rainbow Scattering Cross Sections for Atoms and Ions. *Russian Journal of Cybernetics.* 2026;7(3):40–44.

Original article submitted: 19.07.2026. *Revision submitted: 20.09.2026.*

Введение

В [1] представлены результаты экспериментального и теоретического исследования радужного рассеяния ионов ксенона однослойной плоскостью графена, отмечено, что потенциалы Ziegler-Biersack-Littmark (ZBL) [2] и Nordlund-Lehtola-Hobler (NLH) [3] не описывают радужное рассеяние при нулевом угле вылета для ионов ксенона из графена.

Теория

Дифференциальное сечение радужного рассеяния в первом порядке борновской теории возмущений имеет вид [4]:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{m^2}{4\pi^2\hbar^4}\left|U(q)\right|^2, \tag{1}$$

где $m = \frac{m_1 m_2}{m_1+m_2}$ — приведенная масса; $d\Omega$ — элемент телесного угла; $q = 2k\sin\theta/2$; θ — угол рассеяния в системе центра масс; $\frac{\hbar^2 k^2}{2m}$ — кинетическая энергия частицы.

Фурье-компонента потенциальной энергии взаимодействия двух атомов была вычислена ранее в первом порядке стационарной теории возмущений [5, 6]:

$$U\left(q\right) = \frac{4\pi e^2}{q^2}\left[Z_1 - F_1\left(q\right)\right]\left[Z_2 - F_2\left(q\right)\right]\exp\left(-\frac{q^2\overline{(\delta \mathrm{r})^2}}{2}\right), \tag{2}$$

где $Z_1 e$ и $Z_2 e$ — заряды ядер атомов.

Для каждого значения среднего квадрата амплитуды коллективных колебаний электронов и ядер $\overline{(\delta \mathrm{r})^2} = \overline{(\delta \mathrm{r_{nucl}})^2} + \overline{(\delta \mathrm{r_{el}})^2}$ искалось решение системы нелинейных уравнений [5, 6]:

$$\begin{cases} U\left(r\right) = \frac{1}{2\pi^2}\int_0^\infty U(q)\frac{\sin(qr)}{r}qdq \\ \frac{dU(r)}{dr} = 0 \\ \hbar\omega = 2\overline{(\delta \mathrm{r})^2}\frac{d^2U(r)}{dr^2}. \end{cases} \tag{3}$$

Качественная теория

Если потенциал изолированного атома аппроксимировать экранированным кулоновским потенциалом:

$$\frac{4\pi e}{q^2}\left[Z_2 - F_2\left(q\right)\right] \approx \frac{4\pi Z_2 e}{q^2+\mu_2^2}, \tag{4}$$

то формулу (2) запишем в виде:

$$U\left(q\right) \approx \frac{4\pi e^2 Z_2}{q^2+\mu_2^2}\left[Z_1 - F_1\left(q\right)\right]\exp\left(-\frac{q^2\overline{(\delta \mathrm{r})^2}}{2}\right), \tag{5}$$

где μ_2^{-1} — длина экранирования потенциала изолированного атома (4).

Видно, что при $q = \theta = 0$ дифференциальное сечение (1) равно нулю при рассеянии атома на атоме, так как $F_1(0) = Z_1$, а при рассеянии иона на атоме не равно нулю, так как $F_1^+(0) = Z_1 - 1$.

Численные расчеты

Атомные форм-факторы $F_1(q)$ и $F_2(q)$ изолированных атомов или ионов были вычислены с помощью атомных волновых функций [7], которые аппроксимируют решения уравнений Хартри–Фока. Атомный форм-фактор для атома углерода C(3p) представлен сплошной линией, а для иона углерода C^+(2p) — пунктирной линией на рис. 1.

Множество решений системы уравнений (3) построено при различных значениях среднего квадрата амплитуды коллективных колебаний электронов и ядер $\overline{(\delta \mathrm{r})^2} = \overline{(\delta \mathrm{r_{nucl}})^2} + \overline{(\delta \mathrm{r_{el}})^2}$. На рис. 2 представлена зависимость кванта энергии коллективных колебаний $\hbar\omega$ от минимума потенциальной энергии $U\left(r\right)$ для двух атомов углерода C(3p)+C(3p), атома и иона углерода C^+(2p)+C(3p). В таблице представлено численное значение среднего квадрата амплитуды коллективных колебаний электронов и ядер $\overline{(\delta \mathrm{r})^2}$, при котором потенциальная энергия $U\left(r_{\min}\right)$ и энергия кванта коллективных колебаний $\hbar\omega$ достигают своего минимального и максимального значения соответственно. На рис. 3 представлена полная энергия для двух атомов углерода C(3p)+C(3p), атома и иона углерода C^+(2p)+C(3p) в зависимости от расстояния между ними. В таблице представлены параметры потенциала взаимодействия для двух атомов углерода C(3p)+C(3p), которые хорошо согласуются с некоторыми спектрометрическими параметрами [8] двухатомной молекулы углерода в основном (низколежащем) квантовом состоянии C(3p)+C(3p).

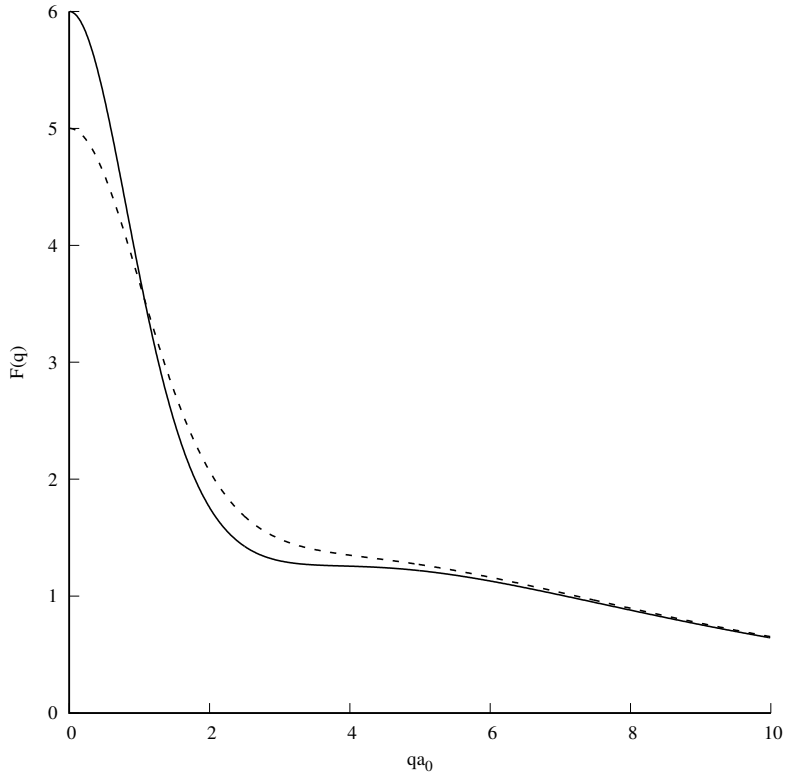


Рис. 1. *График атомного форм-фактора для изолированного атома углерода C(3p) (сплошная линия) и иона углерода C^+(2p) (пунктирная линия)*

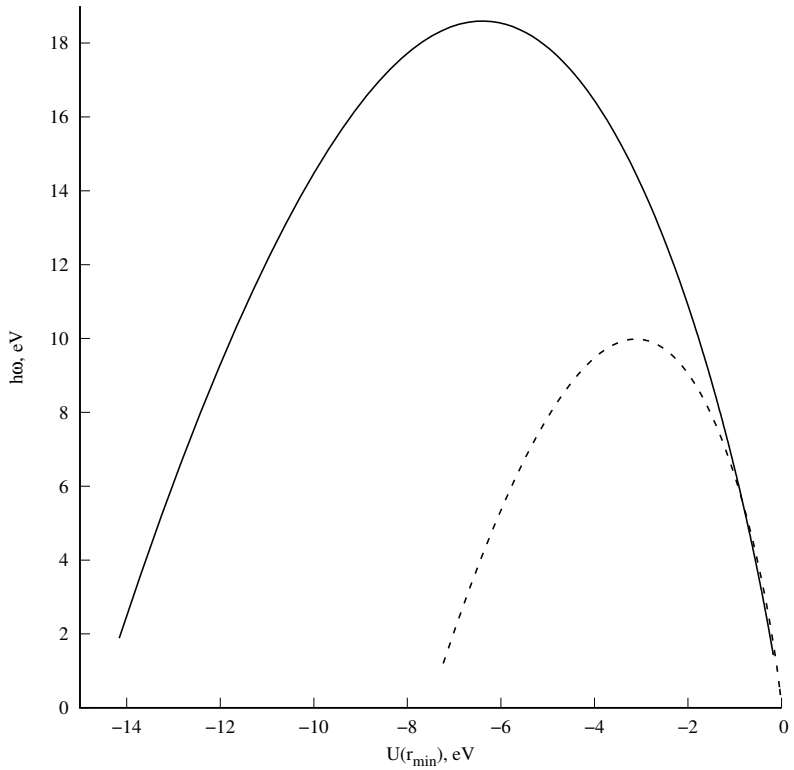


Рис. 2. *График зависимости кванта энергии коллективных колебаний $\hbar\omega$ от минимума потенциальной энергии $U(r)$: для двух атомов углерода C(3p)+C(3p) — сплошная линия, а атома и иона углерода C^+(2p)+C(3p) — пунктирная линия*

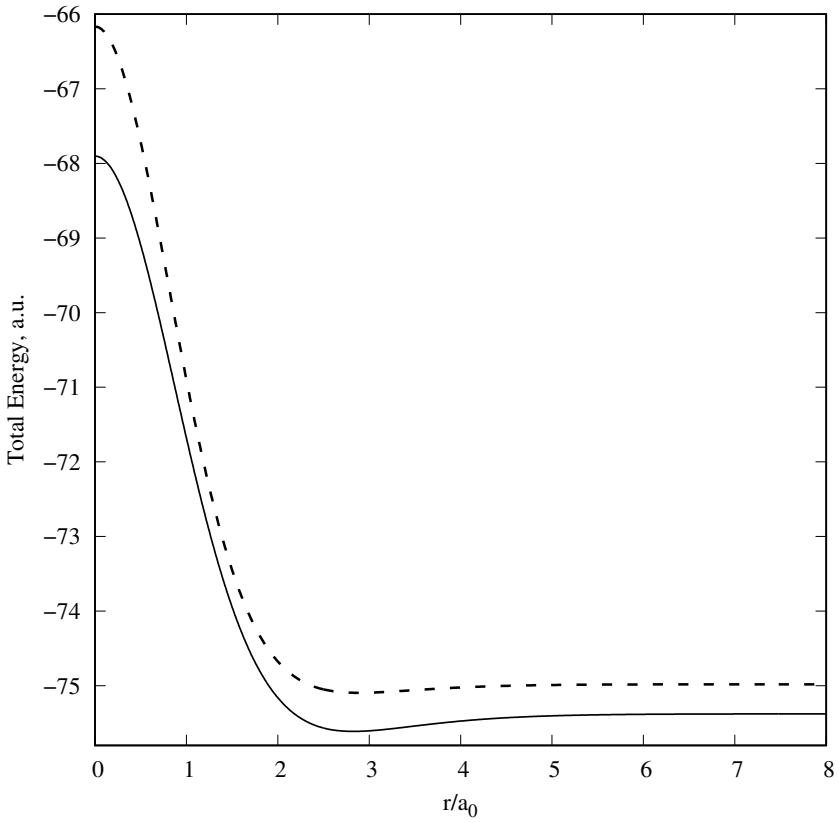


Рис. 3. *График полной энергии для двух атомов углерода C(3p)+C(3p) (сплошная линия), атома и иона углерода C^+(2p)+C(3p) (пунктирная линия) в зависимости от расстояния между ними*

Таблица

Основные рассчитанные значения двух атомов углерода C(3p)+C(3p), атома и иона углерода C^+(2p)+C(3p)

Характеристика	C(3p)+ C(3p)	C^+(2p)+C(3p)
$U\,(0)$, эВ	203.3	239.8
$U\,(r_{\min})$, эВ	-6.39	-3.11
$r_{\min}$, Å	1.496	1.528
$\sqrt{\overline{(\delta \mathrm{r})^2}}$, Å	0.395	0.361
$\hbar\omega$, эВ	18.597	9.984
$\frac{1}{a_0^2}\cdot\frac{d\sigma(q_{\max})}{d\Omega}$	$7.173{\cdot}10^9$	$8.669{\cdot}10^9$
$q_{\max}$	1.035	0.830
$\frac{1}{a_0^2}\cdot\frac{d\sigma(0)}{d\Omega}$	0	$2.783{\cdot}10^9$

На рис. 4 представлена зависимость дифференциального сечения радужного рассеяния $d\sigma/d\Omega$ от переданного импульса $\hbar q$ для двух атомов углерода C(3p)+C(3p), атома и иона углерода C^+(2p)+C(3p). В таблице представлены как максимальные значения сечения радужного рассеяния $\frac{1}{a_0^2}\cdot\frac{d\sigma(q_{\max})}{d\Omega}$, так и значения сечения при $q=\theta=0$. Видно, что численные расчеты с атомным форм-фактором, изображенным на рис. 1, подтверждают предсказание качественной теории. Очевидно, что при $q=\theta=0$ должен наблюдаться дискретный спектр значений сечения радужного рассеяния, пропорциональный квадрату степени ионизации налетающего иона $\frac{d\sigma^{++}(0)}{d\sigma^{+}(0)}=\frac{2^2}{1^2}$ и $\frac{d\sigma^{+++}(0)}{d\sigma^{+}(0)}=\frac{3^2}{1^2}$, так как $F_1^{++}(0)=Z_1-2$ и $F_1^{+++}(0)=Z_1-3$.

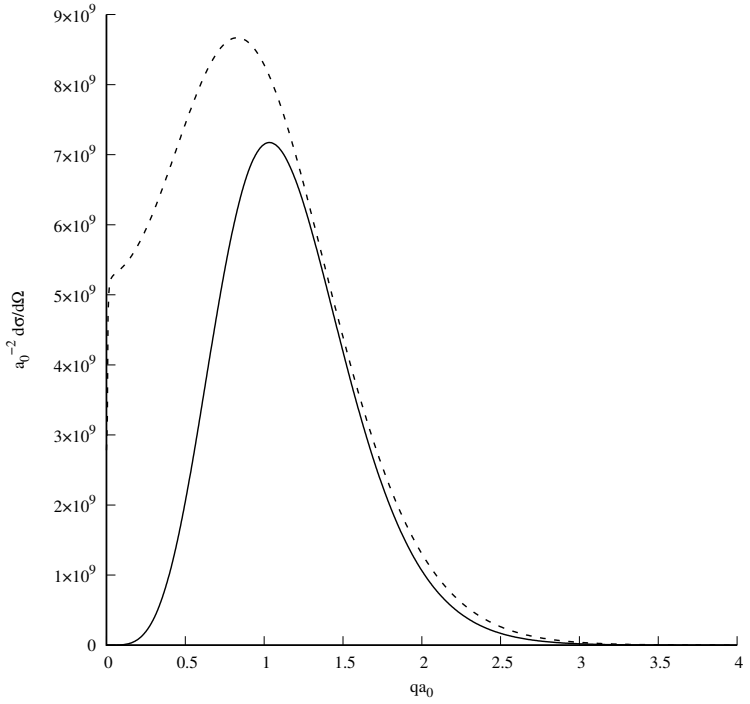


Рис. 4. *График зависимости дифференциальноого сечения радужного рассеяния $d\sigma/d\Omega$ от переданного импульса $\hbar q$: для двух атомов углерода C(3p)+C(3p) — сплошная линия, атома и иона углерода C^+(2p)+C(3p) — пунктирная линия*

Выводы

Дискретный спектр значений сечения радужного рассеяния при нулевом угле вылета, который пропорционален квадрату степени ионизации налетающего иона, можно наблюдать на эксперименте.

Дополнительные материалы к статье размещены в [9].

ЛИТЕРАТУРА

1. Frank C. et al. Observation of Rainbow Scattering in Ion Transmission through Graphene. *Carbon.* 2026;257:121746. DOI: 10.1016/j.carbon.2026.121746.
2. Ziegler J. F., Biersack J. P., Littmark U. Empirical Stopping Powers for Ions in Solids. *Charge States Dyn. Screen. Swift Ions Solids.* 1983:88–100.
3. Nordlund K., Lehtola S., Hobler G. Repulsive Interatomic Potentials Calculated at Three Levels of Theory. *Physical Review A.* 2025;111(3):032818. DOI: 10.1103/PhysRevA.111.032818.
4. Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М. *Курс теоретической физики. Том III. Квантовая механика (нерелятивистская теория).* М.: Физматлит; 2002. 808 с.
5. Кощеев В. П., Штанов Ю. Н. Новый подход к вычислению полной энергии двухатомной молекулы в первом порядке теории возмущений. *Письма в Журнал технической физики.* 2022;48(10):28–32. DOI: 10.21883/PJTF.2022.10.52553.19148.
6. Koshcheev V. P., Shtanov Y. N. Simulation of the Total Energy of a Triatomic Silicon Cluster in the First Order of Perturbation Theory. 2025. arXiv:2507.00053. DOI: 10.48550/arXiv.2507.00053.
7. Clementi E., Roetti C. Roothaan-Hartree-Fock Atomic Wavefunctions: Basis Functions and Their Coefficients for Ground and Certain Excited States of Neutral and Ionized Atoms, Z$\leq$ 54. *Atomic Data and Nuclear Data Tables.* 1974;14(3):177–478. DOI: 10.1016/S0092-640X(74)80016-1.
8. Borsovszky J. et al. Photodissociation of Dicarbon: How Nature Breaks an Unusual Multiple Bond. *PNAS.* 2021;118(52):e2113315118. DOI: 10.1073/pnas.2113315118.
9. Штанов Ю. Н., Кощеев В. П., Моргун Д. А. *Библиотека программ «JINRLIB».* Режим доступа: http://wwwinfo.jinr.ru/programs/jinrlib/tropics/index.html.