

ІОНІЗАЦІЯ АТОМА ЯК РАПТОВЕ ЗБУРЕННЯ ЕЛЕКТРОНА ЗАРЯДОМ ПРОЛІТАЮЧОЇ ЧАСТИНКИ

О.І. ФЕОКТИСТОВ

УДК 533.163
©2010

Інститут ядерних досліджень НАН України
(Просп. Науки, 47, Київ 03680; e-mail: kupyashkinvt@yahoo.com)

Іонізацію атома розглянуто в наближенні раптового збурення електрона атома в момент проходження зарядженої частинки повз нього (в наближенні “струсу”). Її представлено як квантово-механічний перехід системи з початкового стану в кінцевий з випромінюванням електрона із зв’язаного стану в атомі в стан неперервного спектра під дією збурення, що діє впродовж дуже короткого проміжку часу, і для його опису використовуються відповідні формули квантової механіки (формули ефекту струсу). Отримано формулу для визначення розподілу електронів за енергіями в неперервному спектрі кінцевого стану, а також обчислено інтегральний спектр електронів залежно від енергії зарядженої частинки. Зазначено, що формула для визначення ймовірності переходу W від нерухомого заряду має бути доповнена залежністю від швидкості зарядженої частинки $W \sim \nu^{-1}$.

1. Вступ

Під час проходження зарядженої частинки крізь речовину відбувається втрата нею енергії на гальмування та іонізацію атомів. Теорію непружних зіткнень було розроблено Бором і Бете. Зокрема, до цього часу використовуються формули для визначення середніх гальмівних витрат зарядженими частинками на 1 см шляху при проходженні їх крізь речовину [1]. Далі теорію було розвинуто в роботі [2], а нині ці процеси відносять до кінетичної електронної емісії (КЕЕ), в якій електрони збуджуються всередині твердого тіла безпосередньо передачею кінетичної енергії від збуджуючої частинки [3–5]. При цьому основну увагу звернуто на втрати енергії зарядженої частинки під час її проходження повз атома, а не на процес переходу зв’язаних електронів атома за його межі.

Але при розгляді переходу зв’язаних електронів атома в зону неперервного спектра під дією заряду, що раптово виник поблизу атома необхідно врахову-

вати також ефект струсу. При β -розпаді явище іонізації атома вперше теоретично було розглянуто Файнбергом [6] і Мигдалом [7]. Воно полягає у тому, що при спонтанній зміні заряду ядра під дією раптового збурення може відбутися перехід електрона атома зі зв’язаного стану в область неперервного спектра, тобто іонізація атома. Це явище і одержало в літературі назву “струс”. Проте струс електронних оболонок відбувається не тільки при ядерних перетвореннях, але і при переходах в електронних оболонках атома. Без урахування процесу струсу не можна повністю описувати не тільки кінцеві стани системи, але і процеси, які приводять до збудження електронних оболонок [8]. Багато теоретичних і експериментальних робіт присвячено цим питанням, також і огляди [9, 10].

Явище струсу можливо розглянути як протікання його у дві стадії. На першій стадії відбувається раптове збурення системи, коли час проходження цієї стадії τ набагато менший, ніж період низькочастотного руху $2\pi\omega_{fi}^{-1}$ другої стадії, що відбувається після першої. Далі у другій стадії процесу відбувається перехід системи зі стану i в стан f з випромінюванням електрона. Хоча ця друга стадія неможлива за відсутності першої стадії, відповідна їй амплітуда не залежить від фізичної природи першої стадії.

У даній роботі розглянуто іонізацію атома під дією раптового збурення електрона атома зарядом частинки в момент її прольоту повз нього, враховано енергетичний спектр електронів іонізації та розглянуто особливості цього явища. Наш випадок відрізняється від звичайно прийнятої уяви струсу тим, що джерело збурення рухається, а не залишається у спокої. Але вже у роботі [9] та подальших таке збурення системи також відносять до явища струсу. Оскільки збурен-

ня являється раптовим, спочатку будемо нехтувати впливом руху частинки в момент взаємодії, вважаючи заряд нерухомим.

2. Опис ймовірності переходу електрона із зв'язаного стану в область неперервного спектра при струсі

Пролітаючи повз електрон атома, частинка із зарядом $Z_p e$ в момент найбільшого зближення з ним на відстань r створює збурення $V = \frac{Z_p e^2}{r}$.

Якщо швидкість частинки v_p велика, то збурення діє на короткому проміжку часу τ , коли частинка проходить частину траєкторії $\Delta L \sim r$. Для електрона атома таке збурення є раптовим, що приводить до виходу його в неперервний спектр з кінетичною енергією E . Для опису цього квантово-механічного переходу будемо притримуватися теоретичних уявлень, викладених у роботі [11]. У нашому випадку при раптовому збуренні ймовірність переходу електрона зі зв'язаного стану в область неперервного спектра може бути переписана в такому вигляді:

$$dW = \frac{|\int \psi_f^* \frac{Z_p e^2}{r} \psi_i^{(0)} dq|^2}{(E + E_{ЗВ})^2} d\nu = W_{fi} d\nu, \quad (1)$$

де dW – ймовірність переходу зв'язаного електрона атома зі стану i в стан f в інтервалі енергії від E до $E + dE$; а W_{fi} – ймовірність переходу із стану i в один із станів f неперервного спектра; $d\nu$ – число станів електрона в інтервалі енергії від E до $E + dE$; $E_{ЗВ}$ – енергія зв'язку електрона, яка приймається у всіх формулах як позитивне число; $\psi_i^{(0)}$ – координатна частина хвильової функції початкового стану системи; $\psi_f^*(q)$ – координатна частина хвильової функції в кінцевому стані після створення вакансії на одній з підоболонок атома (після іонізації), а q – координати хвильової функції.

Збурення $\frac{Z_p e^2}{r}$ відбувається раптово, тобто за час τ малий в порівнянні з періодом $2\pi\omega_{fi}^{-1}$ переходу із стану i в стан f , так що хвильова функція $\psi_i^{(0)}$ початкового стану системи “не встигає” змінитися і залишається тією ж, що і до збурення. Формула є вірною лише в момент раптового включення збурення. Внесок у значення ймовірності переходу буде здійснюватись тільки за час включення цієї взаємодії, тобто у момент найбільшого зближення частинки та електрона, а оскільки до і після зближення збурення змінюється повільно, адиабатично, то воно не дає внеску у ймовірність переходу W [12].

Ймовірність переходу W_{fi} може бути визначена і з інтеграла перекриття хвильових функцій:

$$W_{fi} = \left| \int \psi_f^* \psi_i^{(0)} dq \right|^2. \quad (2)$$

Обидві хвильові функції являються стаціонарними; кожна для свого гамільтоніана \hat{H}_0 і \hat{H} , тому вони мають вигляд $\Psi = \psi(q)e^{\frac{-iEt}{\hbar}}$, де $\psi(q)$ – хвильова функція тільки від координат і ймовірність переходу W_{fi} , відповідно, не залежить від енергії. За час переходу хвильова функція системи “не встигає” змінитися і залишається тією ж, що і до збурення, проте вона уже не буде виглядати власною функцією нового гамільтоніана системи \hat{H} , тобто стан $\psi_i^{(0)}$ не буде стаціонарним [11]. Зіставляючи формули (1) і (2), знаходимо, що рівність виконується завжди, але тільки коли

$$\frac{Z_p e^2}{r} = E + E_{ЗВ}. \quad (3)$$

Тобто коли потенціальна енергія, набута електронном атома від заряду $Z_p e$, який раптово з'явився на відстані r від нього, долаючи енергію зв'язку, цілком переходить у кінетичну енергію вільного електрона. Аналогом цього процесу може служити фотоефект, де так само після раптового поглинання фотона електрон, долаючи енергію зв'язку, переходить у неперервний спектр [9]. Інший наслідок наближення раптовості збурення – незалежність ймовірності переходу $i \rightarrow f$ від величини енергії, що передається, як це впливає із формули (2) або з формули (1) із врахуванням формули (3). Пролітаючи повз електрон на різних відстанях, заряджена частинка створює однакову ймовірність переходу W_{fi} , незалежно від величини енергії, що передається.

Із розгляду фазового об'єму для електронів, здатних перейти у вакуум, щільність рівнів кінцевого стану виражається такою формулою:

$$\frac{d\nu}{dE} = a\sqrt{E}, \quad \text{де} \quad a = \frac{\sqrt{2}m^{3/2}V}{\pi^2\hbar^3}. \quad (4)$$

Тут m – маса електрона; V – об'єм, який займає один електрон в кінцевому стані. З урахуванням формули (1) розподіл електронів за енергіями після переходу у вакуум описується так:

$$\frac{dN}{dE} = \frac{a\sqrt{E}}{(E + E_{ЗВ})^2}. \quad (5)$$

3. Диференціальна та інтегральна ймовірності переходу електронів іонізації в неперервний спектр

На рис. 1 показано залежність енергетичного розподілу електронів, які вилетіли із атома $\frac{1}{a} \frac{dN}{dE}$ при енергії зв'язку $E_{ЗВ} = 70$ еВ. Така енергія зв'язку приблизно відповідає оже-структурам, що спостерігаються: 63 еВ MVV Cu, 63,2 еВ LMM Al, 69,8 кеВ, N_7VV Au та ін. [3]. У роботі [13] також отримано оцінку енергії зв'язку ~ 70 еВ. Тому допустимо, що енергія зв'язку електрона іонізації становить 70 еВ. Починаючи з нуля, інтенсивність розподілу електронів швидко наростає з ростом енергії і при $E = \frac{E_{ЗВ}}{3}$ досягає максимуму $\frac{1}{a} \frac{dN}{dE} = 0,325 (E_{ЗВ})^{-3/2} = 5,5 \cdot 10^{-4}$, а далі відбувається падіння інтенсивності, так що при $E \simeq 2E_{ЗВ}$ вона зменшується в 2 рази, і при $E \rightarrow \infty$ $\frac{dN}{dE} \rightarrow 0$. Порівняння експериментального розподілу електронів за енергією з формулою (5) могло б служити підтвердженням обґрунтованості застосування наближення раптового збурення при іонізації атома. На жаль, такі експерименти нам невідомі, крім випромінювання e_0 -електронів, для яких цей розподіл підтверджується [13].

Підставляючи (5) в (1), отримуємо ймовірність переходу із зв'язаного стану електрона у вакуум з певною кінетичною енергією $E = \frac{Z_p e^2}{r} - E_{ЗВ}$ або, що те ж саме, коли частинка пролітає повз електрон на деякій певній відстані r :

$$dW = \left(\frac{Z_p e^2}{r} \right)^2 \left| \int \psi_f^* \psi_i^{(0)} dq \right|^2 \frac{a \sqrt{E}}{(E + E_{ЗВ})^2} dE. \quad (6)$$

Далі проводимо інтегрування за всіма можливими станами електрона в неперервному спектрі від енергії $E = 0 = \frac{Z_p e^2}{r_{\max}} - E_{ЗВ}$ до $E = E_{\max} = \frac{Z_p e^2}{r_{\min}} - E_{ЗВ}$. При цьому відстань максимального зближення змінюється від $r_{\max} = \frac{Z_p e^2}{E_{ЗВ}}$ до $r_{\min} = \frac{Z_p e^2}{E_{\max}}$. Крім того, вважаємо, що при прольоті повз атом заряджена частинка потрапляє в діалезон цього зближення з ймовірністю $W = 1$:

$$W_1 = \left(\frac{Z_p e^2}{r_{\min}} \right)^2 \left| \int \psi_f^* \psi_i^{(0)} dq \right|^2 a F(E_{\max}), \quad (7)$$

де

$$F(E) = \frac{1}{\sqrt{E_{ЗВ}}} \arctan \sqrt{\frac{E}{E_{ЗВ}}} - \frac{\sqrt{E}}{E + E_{ЗВ}}, \quad F(0) = 0. \quad (8)$$

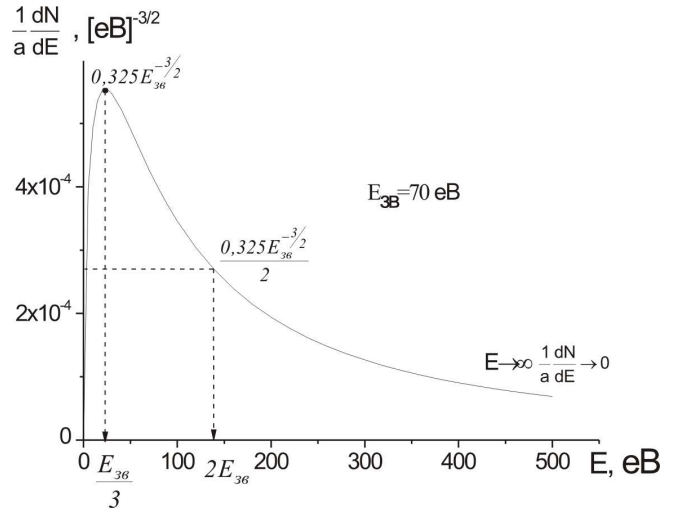


Рис. 1. Залежність енергетичного розподілу електронів в одиницях a , див. (4), які вилетіли із атома, при енергії зв'язку $E_{ЗВ} = 70$ еВ

Нехай заряджена частинка пролітає повз електрон атома з ймовірністю $W = 1$, рівномірно з'являючись у різних місцях кола, у центрі якого знаходиться електрон, а радіус кола прийемо за розміри радіуса атома r_a . Ймовірність того, що заряджена частинка пролетить в інтервалі від r_{\max} до r_{\min} від центра кола, в якому знаходиться електрон, визначається як $W_r = \frac{r_{\max}^2 - r_{\min}^2}{r_a^2}$. Враховуючи, що $F(0) = 0$, при $r = r_{\max}$, отримуємо формулу іонізації атома при раптовому збуренні електрона зарядом частинки в момент її прольоту повз нього. При цьому нехтуємо впливом руху частинки в момент взаємодії, тобто вважаємо заряд частинки нерухомим:

$$W_a = \left(\frac{Z_p e^2}{r_a} \right)^2 \left| \int \psi_f^* \psi_i^{(0)} dq \right|^2 a F(E_{\max}). \quad (9)$$

На рис. 2 наведено функцію $F(E)$ для електрона, який переходить із зв'язаного стану з $E_{ЗВ} = 70$ еВ у неперервний спектр E . Функцію розбито на дві частини з кінетичною енергією від 0 до 200 еВ і від 0 до $2 \cdot 10^5$ еВ. Зі збільшенням енергії зарядженої частинки $F(E_{\max})$ збільшується доти, доки E_{\max} залишається такою, що її можна зіставити з $E_{ЗВ}$, а починаючи з $E_{\max} \sim 21$ кеВ, що відповідає $\frac{E_{\max}}{E_{ЗВ}} \sim 300$ і відстані найбільшого зближення з електроном $r = 7 \cdot 10^{-12}$ см, якщо $Z_p = 1$, практично залишається сталою і суттєво не змінює ймовірність переходу.

Для оцінки значень r_{\max} і r_{\min} допустимо, що при радіоактивному розпаді середня енергія β -частинок близька до 1 МеВ, а для α -частинок близька до

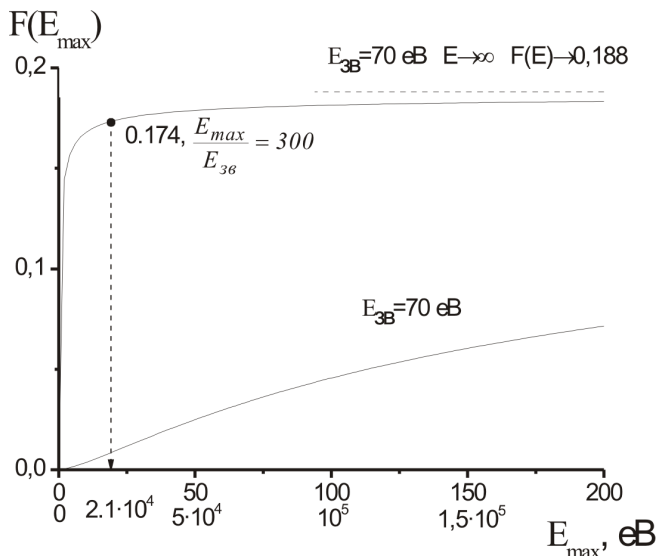


Рис. 2. Функція $F(E)$, див. (8), для електрона, який переходить із зв'язаного стану з $E_{3B} = 70$ еВ в неперервний спектр E . На горизонтальній осі відкладено дві шкали енергії в двох різних масштабах одиниць. Верхня крива $F(E_{\max})$ відноситься до масштабу енергії від 0 до $2 \cdot 10^5$ еВ, а нижня крива – до масштабу від 0 до 200 еВ

6 МеВ. Тоді коли $E_{3B} = 70$ еВ r_{\max} для них, відповідно, дорівнює $2,05 \cdot 10^{-9}$ см і $4,1 \cdot 10^{-9}$ см. Якщо частинка пролітає на більш далекій відстані від центра кола, вона не в змозі передати електрону необхідну енергію, рівну енергії зв'язку. Якщо β -частинка пролітає на відстані $r_{\min} = 1,4 \cdot 10^{-13}$ см, а α -частинка на відстані $r_{\min} = 4,8 \cdot 10^{-13}$ см, заряджена частинка повністю передає всю свою кінетичну енергію E_p електрона. За подальшого зближення, коли $r < r_{\min}$, потрібна передача енергії більша, ніж реально наявна кінетична енергія зарядженої частинки, і такі переходи не можуть здійснюватися внаслідок порушення закону збереження енергії. Ну і така енергія, що передається, занадто велика для застосовності теорії збурень та потребує залучення інших механізмів взаємодії (конвойні електрони, бінарні зіткнення, та ін.) [14]. Очевидно, при розгляді іонізації як струсу, максимальне збурення, що передається, становить приблизно 10^4 кеВ, що відповідає для α -частинки $r_{\min} = 3 \cdot 10^{-11}$ см і значенню $F(E_{\max}) = 0,17$ при $E_{3B} = 70$ еВ.

4. Урахування руху зарядженої частинки в момент взаємодії її з електроном при іонізації

При дослідженні струсу електронів близьконульової енергії з поверхні мішені при раптовому виникнен-

ні заряду внаслідок прольоту зарядженої частинки крізь поверхню нами було встановлено, що ймовірність переходу електрона у вакуум $W \sim \frac{(Z_p e^2)^2}{\nu_p}$ не тільки пропорційна до квадрата заряду частинки, але і обернено пропорційна її швидкості [15–17]. Цю залежність було отримано для електронів та α -частинок, а для α -частинок і важких іонів, як узагальнення експериментальних робіт, в [14]. Першопричиною раптового виникнення заряду в цих випадках є процес іонізації електронів атома при проходженні зарядженої частинки крізь мішень. Тому і ймовірність іонізації атома має бути обернено пропорційна до швидкості налітаючої зарядженої частинки. Така залежність спостерігалася в широкому діапазоні швидкостей заряджених частинок. Зокрема, залежність $W \sim \nu^{-1}$ спостерігали для β -частинок до середньої швидкості $\nu_\beta = 2,7 \cdot 10^{10}$ см·с⁻¹. Незважаючи на наближення до швидкості світла c , характер цієї залежності залишається незмінним. Тому ймовірність струсу при швидкості світла c можна отримати, якщо екстраполювати залежність $W(\nu_\beta)$ до значення її ймовірності при $\nu_\beta = c$ і вважати її еталоном ймовірності іонізації при раптовому збуренні, оскільки більш короткого процесу збурення не існує. Зі зменшенням же швидкості частинок розширюється діапазон часу взаємодії і збільшується ймовірність переходу. Наприклад, якщо швидкість зменшується вдвічі, то і ймовірність переходу збільшується у два рази. Проте це розширення часу взаємодії не має бути у протиріччя з основним наближенням раптового збурення $w_{fi} \frac{\Delta L}{\nu_p} \leq 1$, де w_{fi} – частота переходу, $\Delta L \simeq r_{\max}$, а $\frac{\Delta L}{\nu_p}$ – час прольоту зарядженої частинки повз електрон атома. Підставляючи значення із $\hbar w = 70$ еВ, $r_{\max} = 4,1 \cdot 10^{-9}$ см і $\nu_p \sim 3,4 \cdot 10^9$ см с⁻¹ для α -частинки $E_\alpha = 6$ МеВ, отримуємо $w_{fi} \frac{\Delta L}{\nu_p} = 0,13$. Воно не протирічить застосуванню наближення раповості для α -частинки, і тим більше, для β -частинки, де $\nu_p \sim 10^{10}$ см с⁻¹. Тому формулу (9) із врахуванням впливу руху частинки має бути записано у такому вигляді:

$$W(E) = \text{const} \frac{C}{\nu_p} \left(\frac{Z_p e^2}{r_a} \right)^2 \left| \int \psi_f^* \psi_i^{(0)} dq \right|^2 aF(E), \quad (10)$$

де $\frac{c}{\nu_p}$ визначає, у скільки разів ймовірність переходу при швидкості зарядженої частинки ν_p більша, ніж при швидкості світла.

Ймовірність іонізації атома пропорційна до тривалості раптового збудження його пролітаючою частинкою, квадрата її заряду, ймовірності переходу атома із нейтрального стану у збуджений з появою вакансії

на одній з його підболонок (перехід електрон–дірка) та ймовірності переходу електрона у стан неперервного спектра. Формула (10) дозволяє порівняти ймовірності іонізації атомів у різних експериментальних умовах при допущенні раптового збурення електрона зарядом при бомбардуванні їх частинками різного сорту.

1. *Альфа-, бета- и гамма-спектроскопия*, под ред. К. Зигбана (Атомиздат, Москва, 1969), Т. 1, С. 36.
2. E.I. Sternglass, *Phys. Rev.* **108**, 1 (1957).
3. D. Hasselkamp, in *Springer Tracts Modern Phys.* (Springer, Berlin, 1992), Vol. 123, p. 1.
4. H. Rothard, R.O. Groeneveld, and J. Kemmler, in *Springer Tracts Modern Phys.* (Springer, Berlin, 1992), Vol. 123, p. 97.
5. H.J. Frischkorn, R.O. Groeneveld, D. Hofmann *et al.*, *Nucl. Instr. and Meth.* **214**, 123 (1983).
6. E.L. Feinberg, *J. Phys. (USSR)* **4**, 424 (1941).
7. A. Migdal, *J. Phys. (USSR)* **4**, 449 (1941).
8. В.И. Матвеев, Э.С. Парилis, *УФН* **138**, 573 (1982).
9. А.М. Дыхне, Г.Л. Юдин, *УФН* **121**, 157 (1977).
10. А.М. Дыхне, Г.Л. Юдин, *УФН* **125**, 377 (1978).
11. Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц, *Квантовая механика* (Наука, Москва, 1974).
12. А.С. Давыдов, *Квантовая механика* (Наука, Москва, 1973).
13. О.І. Феоктістов, *УФЖ* **53**, 1043 (2008).
14. В.П. Ковалев, *Вторичные электроны* (Энергоатомиздат, Москва, 1987).
15. В.Т. Купряшкін, Л.П. Сидоренко, О.І. Феоктістов та ін., *УФЖ* **51**, 5 (2006).
16. В.Т. Купряшкін, Л.П. Сидоренко, А.И. Феоктистов и др., *Изв. РАН. Сер. физ.* **63**, 153 (1999).
17. А.О. Вальчук, В.Т. Купряшкін, Л.П. Сидоренко та ін., *УФЖ* **51**, 127 (2006).

Одержано 23.06.08

ИОНИЗАЦИЯ АТОМА КАК ВНЕЗАПНОЕ ВОЗМУЩЕНИЕ ЭЛЕКТРОНА ЗАРЯДОМ ПРОЛЕТАЮЩЕЙ ЧАСТИЦЫ

А.И. Феоктистов

Резюме

Ионизация атома рассмотрена в приближении внезапного возмущения электрона атома в момент прохождения заряженной частицы мимо него (в приближении “встряски”). Она представлена как квантово-механический переход системы из начального состояния в конечное с выбрасыванием электрона из связанного состояния в атоме в состояние непрерывного спектра под влиянием возмущения, действующего в течение очень короткого промежутка времени, и для его описания используются соответствующие формулы квантовой механики (формулы эффекта встряски). Обсуждены формулы для определения распределения электронов по энергии в непрерывном спектре конечного состояния, а также интегральный спектр электронов в зависимости от энергии заряженной частицы. Отмечено, что формула для определения вероятности перехода для неподвижного заряда должна быть дополнена зависимостью W от скорости заряженной частицы $W \sim \nu^{-1}$.

ATOMIC IONIZATION AS A SUDDEN PERTURBATION OF AN ELECTRON BY THE CHARGE OF A PROJECTILE

A.I. Feoktistov

Institute for Nuclear Research, Nat. Acad. of Sci. of Ukraine
(47, Nauky Ave., Kyiv 03680, Ukraine;
e-mail: kupryashkinvt@yahoo.com)

Summary

It is proposed to consider the atomic ionization as a sudden perturbation of an atomic electron at the passage of a charged particle near the atom (“shake-off” approximation). The ionization process is presented as a quantum-mechanical transition of the electron from the bound atomic state to the continuum due to the perturbation acting during a very short time interval. It is described with the help of the corresponding formulas of quantum mechanics (shake-off effect formulas). A formula for the determination of the electron energy distribution in the continuum of the final state is obtained. The integral electron spectrum depending on the energy of the charged particle is calculated. It is noted that the formula used for the determination of the transition probability W for an immobile charge must be supplemented with the dependence on the velocity of the charged particle $W \sim \nu^{-1}$.