

АТОМНАЯ И ЯДЕРНАЯ ФИЗИКА

УДК 539.17.015

РЕЛЯТИВИСТСКИЕ $(e, 2e)$ -ЭКСПЕРИМЕНТЫ:
ЭЙКОНАЛЬНОЕ ПРИБЛИЖЕНИЕ

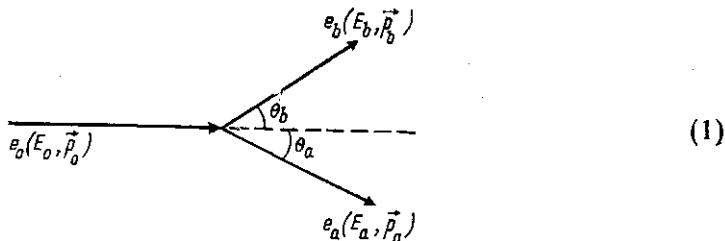
Ю. В. Попов, Н. М. Кузьмина
(НИИЯФ)

Приведены расчеты дифференциальных сечений $(e, 2e)$ -реакций на атомах Си и Ag в эйкональном приближении для релятивистских $(e, 2e)$ -экспериментов, недавно проведенных в Тюбингене. Показано, что даже для высокоэнергетичных налетающих частиц угловой профиль дифференциального сечения рассеяния чувствителен к величине среднего внутриатомного поля. Отсюда вытекает идея использования сдвига максимума дифференциального сечения по углу в симметричных $(e, 2e)$ -экспериментах для непосредственного определения величины среднего внутриатомного поля.

1. Введение

1. В настоящее время $(e, 2e)$ -эксперименты стали мощным средством изучения как структуры атомов, так и механизмов ионизационных процессов, сопровождающихся образованием трех заряженных частиц в конечном состоянии. За прошедшие 20 лет с момента проведения в 1969 г. первого $(e, 2e)$ -эксперимента накоплен богатейший экспериментальный материал. Исследованию подвергались различные атомы (в основном инертные газы), молекулы и даже тонкие пленки, энергия падающих электронов варьировалась от предпороговых до релятивистских, а энергии и углы вылета конечных электронов изменялись в самых широких диапазонах.

2. Рассматриваемый $(e, 2e)$ -процесс — это ионизация атома (молекулы, тонкой пленки). Его можно представить диаграммой



Законы сохранения энергии и импульса в этом случае выглядят так:

$$\begin{cases} E = E_0 + (-\epsilon_0 + mc^2) = E_a + E_b, \\ \mathbf{p}_0 = \mathbf{p}_a + \mathbf{p}_b + \mathbf{q}. \end{cases} \quad (2)$$

Здесь ϵ_0 — так называемый потенциал ионизации, т. е. энергия отрыва электрона при его переходе в континуум, \mathbf{q} — импульс отдачи, или импульс иона-остатка (энергией иона-остатка обычно пренебрегают, так как его масса $M_A \gg m$).

Если все три частицы (e_a, e_b, e_0) лежат в одной плоскости, то говорят о компланарной геометрии реакции.

Различают бинарные и дипольярные кинематические случаи. В пер-

вом из них энергии и углы вылета конечных электронов близки или равны между собой. Во втором — энергия одного электрона, скажем e_a , близка к энергии падающего на атом электрона e_0 , а угол θ_a обычно невелик и фиксирован. Дифференциальное сечение реакции $d^3\sigma$ (в западной литературе его обозначают как TDCS) есть функция угла θ_b , и его удобно представлять в полярных координатах, откуда и название кинематики.

3. Если в нерелятивистском случае задачу ионизации можно решать исходя из уравнения Шрёдингера, то в релятивистском пределе более удобен метод диаграммного представления амплитуды. При этом процесс ионизации рассматривается как рассеяние двух (нескольких) частиц во внешнем классическом поле.

Выбирая атомную систему единиц ($m=e=\hbar=1$), релятивистски инвариантное TDCS в лабораторной системе можно записать в виде

$$\frac{d^3\sigma}{dE_b d\Omega_a d\Omega_b} = \frac{N_i E_0}{c^4 p_0} E_a p_a E_b p_b \sum_{s_f s_i} |T_{fi}(\mathbf{p}_a \mathbf{p}_b) - T_{fi}(\mathbf{p}_b \mathbf{p}_a)|^2. \quad (3)$$

Здесь N_i — количество электронов в ионизуемой оболочке, $\sum_{s_f s_i}$ в (3)

означает суммирование по спинам и проекциям спинов конечных электронов и усреднение по проекциям начального электрона, T_{fi} означает соответствующим образом нормализованную амплитуду рассеяния. В этой работе мы будем придерживаться обозначений статьи [1].

Релятивистский закон дисперсии $E^2 = p^2 c^2 + m^2 c^4$ может быть представлен в терминах кинематической энергии частицы $\tilde{E} = E - mc^2$. В этом случае в атомных единицах

$$p = \sqrt{2\tilde{E} + \alpha^2 \tilde{E}^2},$$

где \tilde{E} измеряется в ридбергах (Ry), т. е. $\tilde{E}(\text{Ry}) = \tilde{E}(\text{эВ})/27,2$, и $\alpha = (137)^{-1}$.

2. Теория

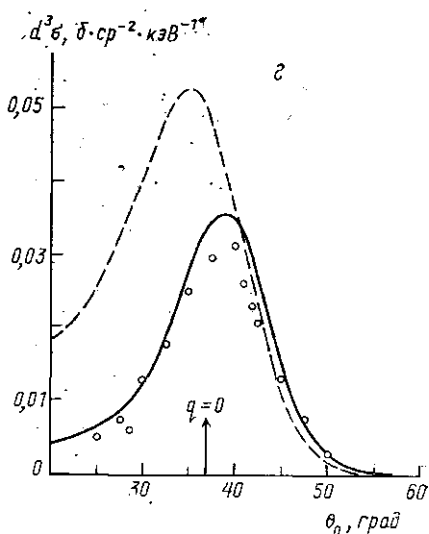
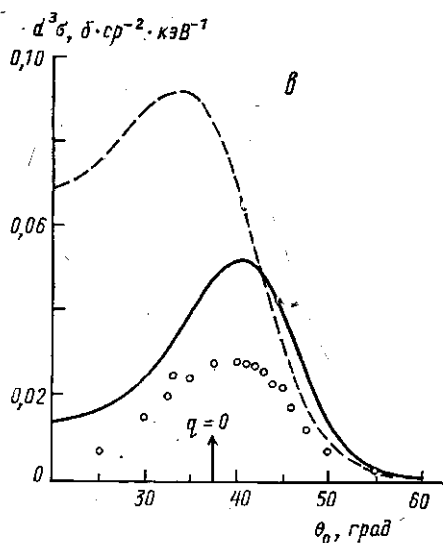
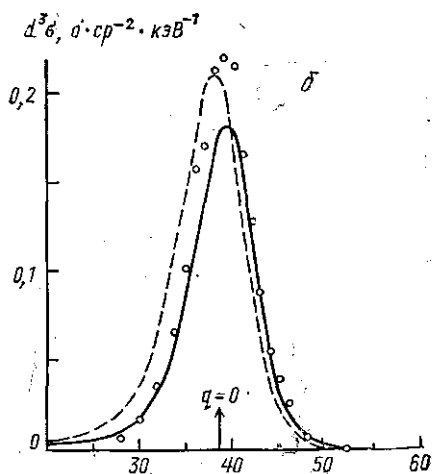
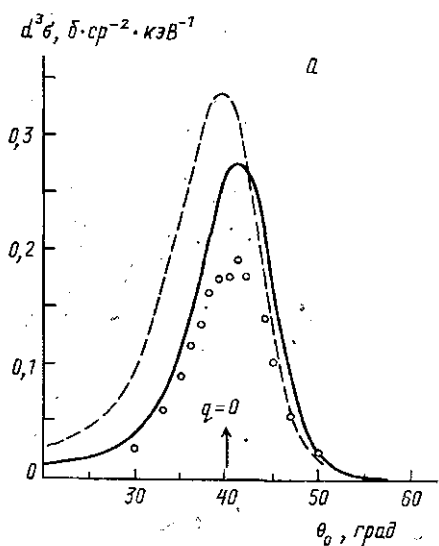
1. Релятивистские $(e, 2e)$ -эксперименты в настоящее время в основном проводятся группой Накеля (Тюбинген), и в последнее время ею представлена серия экспериментальных данных по ионизации K -оболочки атомов Cu, Ag и Au [2]. Геометрия экспериментов — компланарная, кинематика — симметричная. Начальные кинетические энергии равны соответственно $\tilde{E}_0 = 500$ и 300 кэВ. Эти энергии существенно превышают энергию отрыва K -электрона от атома Cu ($\epsilon_0 = 9$ кэВ) и Ag ($\epsilon_0 = 25,5$ кэВ), однако они не слишком велики для атома Au ($\epsilon_0 \approx 79$ кэВ). Так как электроны в K -оболочке находятся в S -состоянии, то дифференциальное сечение по форме имеет колоколообразный вид с максимумом при $q \sim 0$, т. е. при углах $\theta_0 = \theta_a = \theta_b$, определяемых условием

$$\cos \theta_0 = \frac{p_0}{2p_a} = \frac{\sqrt{2\tilde{E}_0 + \alpha^2 \tilde{E}_0^2}}{2\sqrt{2\tilde{E}_a + \alpha^2 \tilde{E}_a^2}},$$

причем $\tilde{E}_a = (1/2)(\tilde{E}_0 - \epsilon_0)$.

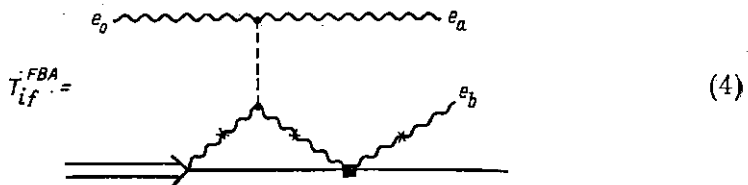
Несмотря на большие кинетические энергии электронов, расчеты в плосковолновом борновском приближении (PWBA) неудовлетвори-

тельно описывают эксперимент. Обращает на себя внимание регулярный сдвиг экспериментальных точек вправо, в сторону больших углов по сравнению с PWBA-расчетами (рисунок).



Дифференциальное сечение рассеяния $d^2\sigma$ для ионизации K -оболочки как функция угла рассеяния θ_0 ; сплошная линия — EWB-расчеты с использованием формулы (6), штриховая — PWBA-расчеты ($\bar{V}=0$), экспериментальные точки взяты из работы [2]: для Cu ($z=29$) при $\bar{V}=14$ кэВ, $\bar{E}_0=300$ (а) и 500 кэВ (б) и для Ag ($z=47$) при $\bar{V}=42$ кэВ, $\bar{E}_0=300$ (в) и 500 кэВ (з)

Расчет рассматриваемых процессов в работах [1] и [3] проводился в основном с помощью диаграммы в первом борновском приближении (FBA)



При этом электроны e_0 и e_a описывались дираковскими плоскими волнами, а электрон e_b — либо дарвиновской приближенной волновой функцией [4], либо функцией Зоммерфельда—Мауэ [3] (что отражено крестиками на диаграмме (4)). И в том и в другом случае он рассматривался как квантовая частица в поле иона-остатка. Очевидно, такое описание более соответствует дипольярной кинематике, однако при больших начальных энергиях в случае симметричной кинематики отклонение волновой функции эжектированного электрона от плоской волны невелико, что и выражается в расположении максимума рассчитанного дифференциального сечения на оси $q=0$ и несильном отличии расчетов от РВВА-приближения.

2. Аналогичный сдвиг измеренных дифференциальных сечений по сравнению с расчетами в первом борновском (импульсном) приближении наблюдался и в нерелятивистской области энергий [5], в $(e, 2e)$ -экспериментах на атоме He. Указанный сдвиг удалось объяснить и добиться более или менее удовлетворительного согласия с экспериментом исходя из двух противоположных точек зрения. В первом случае [6] предполагалось, что электрон, попадая в атом, находится в потенциальной яме, созданной в основном ядром (ионом-остатком). При этом связь его энергии и импульса описывалась следующей простейшей формулой дисперсии:

$$p_i = \sqrt{2(\tilde{E}_i + \bar{V})}, \quad (5)$$

где \bar{V} — постоянное среднее поле внутри атома, играющее роль свободного параметра теории. Такое описание возможно, поскольку в матричном элементе, соответствующем диаграмме (4), интегрирование ограничено радиусом одноэлектронной хартри-фоковской волновой функции, т. е. размерами ионизируемой оболочки. Меняя величину поля \bar{V} , можно было сдвигать теоретическую кривую дифференциального сечения в нужную сторону.

Во втором случае [7], наоборот, предполагалось, что быстрые электроны, покидая оболочку атома, несут информацию об угловом распределении, описываемом чисто плосковолновой частью диаграммы [5], однако во внешней области их траектории искажаются за счет трехчастичного (особенно взаимного) поствзаимодействия, отчего электроны фиксируются детекторами под большими углами, что и обуславливает сдвиг экспериментальной кривой вправо по сравнению с расчетом по формуле (4). Этот сдвиг пропорционален величине

$$\lambda = \frac{1}{8} \left(\frac{r_H}{r_0} \right) \tilde{E}_{a(b)}^{-1},$$

где r_H — радиус атома водорода, а r_0 — радиус ионизируемой оболочки (свободный параметр, близкий, однако, к среднему радиусу оболочки по смыслу приближения).

Квазиклассический подход к описанию поствзаимодействия, представленный в работах [8], позволяет согласовать эти точки зрения, что нашло в принципе отражение в работах группы Клара [9].

3. При ионизации внутренней K -оболочки тяжелого атома, очевидно, большую часть времени взаимодействия электроны проводят в сложном атомном поле, что указывает на необходимость поиска поправок в случае быстрых электронов с использованием эйконального приближения в его простейшей форме типа (5). При этом оценки величины постэффектов без каких-либо искусственных построений в теории при энергиях падающих электронов 500 и 300 кэВ показывают, что угловые отклонения траекторий от прямолинейных как минимум на два порядка меньше наблюдаемого углового сдвига.

Следует отметить, что в случае рассматриваемой в данной работе бинарной симметричной кинематики важно сохранить симметрию и в описании обоих уходящих из атома электронов, тогда как в работе [1] такая симметрия была нарушена, поскольку там в основном рассматривались несимметричные, дипольные процессы.

В настоящей работе все электроны описываются дираковскими плоскими волнами, однако закон дисперсии выбран в виде

$$\tilde{p}_i = \sqrt{2(\tilde{E}_i + \bar{V}) + \alpha^2(\tilde{E}_i + \bar{V})^2}. \quad (6)$$

В остальном описание процесса не выходит за рамки PWBA в форме (4).

4. Приведем кратко подробности вычислений. Амплитуда T_{if} в выражении (3) для дифференциального сечения определялась в приближении искаженных волн (DWBA) по следующей формуле:

$$T_{if}^{DWBA} = \langle \varphi_i^-(\mathbf{p}_a), \varphi_2^-(\mathbf{p}_b) | V_{12} | \varphi_{02}, \varphi_1^+(\mathbf{p}_0) \rangle. \quad (7)$$

Каждая искаженная волна (дираковский спинор) $|\varphi_{1,2}^\pm(\mathbf{p})\rangle$ в (7) удовлетворяет релятивистскому уравнению электрона в электромагнитном поле (внутри атома)

$$\left[\left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - e\bar{V} \right)^2 - c^2 \left(-i\hbar \mathbf{A} - \frac{e}{c} \mathbf{A} \right)^2 - m^2 c^4 \right] \langle \mathbf{r}, t | \varphi_{1,2}^\pm(\mathbf{p}) \rangle = 0,$$

и в калибровке $\mathbf{A}=0$ после подстановки

$$\langle \mathbf{r}, t | \varphi_{1,2}^\pm(\mathbf{p}) \rangle = \exp \left\{ -\frac{i}{\hbar} (\tilde{E} + mc^2) t \right\} \langle \mathbf{r} | \varphi_{1,2}^\pm(\mathbf{p}) \rangle$$

легко получить для функции $\langle \mathbf{r} | \varphi_{1,2}^\pm(\mathbf{p}) \rangle$ уравнение, аналогичное по внешнему виду нерелятивистскому уравнению Шрёдингера для свободной волны (мы снова переходим в атомные единицы):

$$\left[\frac{1}{2} \Delta + \frac{p^2}{2} \right] \langle \mathbf{r} | \varphi_{1,2}^\pm(\mathbf{p}) \rangle = 0,$$

но с дисперсионной формулой (6), связывающей энергию и импульс электрона внутри атома, если \bar{V} — подгоночное среднее постоянное поле. Это приближение мы и называем эйкональным плосковолновым борновским приближением (EWBA). Явный вид функции $\langle \mathbf{r} | \varphi_{1,2}^\pm(\mathbf{p}) \rangle$ в приближении EWBA записывается следующим образом:

$$\langle \mathbf{r} | \varphi_{1,2}^\pm(\mathbf{p}) \rangle = \frac{c}{(2\pi)^{3/2}} \sqrt{\frac{\tilde{E}_p + 2mc^2}{2\tilde{E}_p + 2mc^2}} \hat{a}_p \exp \{i\tilde{\mathbf{r}}\mathbf{p}\}. \quad (8)$$

В формуле (8) оператор \hat{a}_p — спиновая часть волновой функции, а коэффициент C появляется вследствие шивки функции (8) и обычной плоской волны (при $\bar{V}=0$) на поверхности атома, и $|C|^2$ описывает вероятность проникновения электрона в атом. В принципе $|C|^2 < 1$, однако отличие от единицы мало вследствие больших энергий электронов.

В качестве волновой функции связанного состояния K -электрона в наших расчетах, как и в работе [1], выбиралась нерелятивистская водородоподобная функция $\varphi_{02}(r)$ с эффективным зарядом z_T в приближении Дарвина:

$$\langle r | \varphi_{02}(r) \rangle = \left[1 + \left(\frac{z_T c}{-\epsilon_0 + 2mc^2} \right)^2 \right]^{-1/2} \tilde{a}_0 \varphi_{02}(r). \quad (9)$$

В расчетах были проделаны необходимые ортогонализационные процедуры, однако они не внесли существенных коррекций в угловое положение пиков в рассматриваемой кинематике реакции.

3. Результаты и обсуждение

Вычисления дифференциальных сечений были сделаны по компьютерной программе, аналогичной использованной в работе [1]. Основное отличие подхода состоит в том, что расчет импульсов велся в соответствии с формулой (6). Результаты расчетов представлены сплошной кривой на рисунке. Выбор оптимального значения \bar{V} определялся по соответствию положения пиков вычисленной кривой дифференциального сечения и распределения экспериментальных точек. Было получено

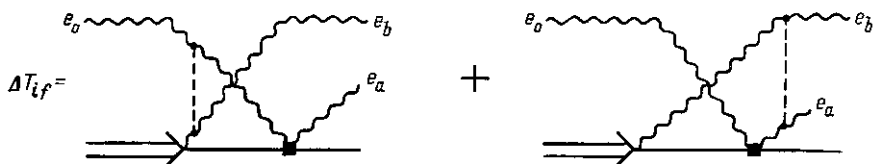
$$\bar{V}_{Ag} \sim 42 \text{ кэВ}, \quad \bar{V}_{Cu} \sim 14 \text{ кэВ}. \quad (10)$$

Эти результаты в целом удовлетворительны, так как если бы можно было редуцировать данную многотельную задачу к трехтельной с эффективным кулоновским потенциалом, то при использовании вириальной теоремы мы имели бы соотношение

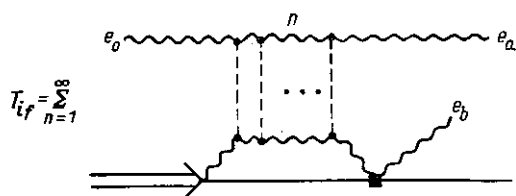
$$\bar{V} = 2\epsilon_0. \quad (11)$$

Так как для K -оболочки $\epsilon_0^{Cu} \approx 9$ кэВ и $\epsilon_0^{Ag} \approx 25,5$ кэВ, то выражения (10) и (11) дают близкие по порядку величины для среднего поля.

Таким образом, как и следовало ожидать, сдвиг кривой дифференциального сечения в сторону больших углов в данном случае связан преимущественно с взаимодействием электронов со средним полем иона-остатка. При этом не имеет глубокого смысла при данных больших энергиях усложнять расчеты уточнением пробных функций, конкретизацией вида потенциала и т. п., поскольку волновые функции непрерывного спектра достаточно учитывать в эйковальном приближении либо учесть поправки порядка \bar{V}/E_0 к диаграмме (4), что выразится в появлении дополнительных диаграмм типа



И еще один момент, который следует обсудить. В работах [2] обращает на себя внимание регулярное превышение теоретических значений, вычисленных в первом борновском приближении, над экспериментальными, особенно в области малых относительных углов конечных электронов. Частичное объяснение этого эффекта в нерелятивистской теории заключается в учете полного (ee)-взаимодействия в промежуточном состоянии, т. е. вместо диаграммы (4) рассматривается ряд



включающий многофотонные обмены. В результате суммирования появляется так называемая полувнеэнергетическая амплитуда (ee)-рассеяния, что приводит к появлению дополнительного фактора в выражении для дифференциального сечения:

$$f(x) = x/(e^x - 1),$$

где $x = 2\pi/|p_a - p_b|$. Заметим, во-первых, что фактор $f(x)$ растет с увеличением энергии электрона, оставаясь при этом всегда меньше единицы, и, во-вторых, сильно уменьшает теоретическое сечение в области малых относительных углов электронов.

По всей видимости, следует ожидать появления подобного эффекта и в релятивистском случае. Конечно, при рассматриваемых энергиях электронов фактор $f(x)$ практически равен единице, однако не исключено, что в числителе $f(x)$ может присутствовать некоторый большой коэффициент, отражающий то, что распространение конечных электронов происходит в атомной среде, а не в вакууме. По крайней мере, эта проблема требует своего дальнейшего теоретического осмысления.

Кроме того, присутствие коэффициента C в (8) также в принципе уменьшает абсолютную величину пиков.

Авторы выражают благодарность проф. Д. Якубасе-Амундсен за предоставленную возможность использовать ее компьютерную программу для проведения численных расчетов.

Работа выполнена в рамках программы «Университеты России».

ЛИТЕРАТУРА

- [1] Jakubassa-Amundsen D. H. // Z. f. Phys. D. 1989. 11. P. 305. [2] Bonfert J., Graf H., Nakel W. // J. Phys. B. 1991. 24. P. 1423; Shroter C. D., Graf H., Bonfert J., Nakel W. // (e, 2e) Collisions and Related Problems: The Mater. of II Europ. Conf./Ed. J. Stefani. Montelibretty, Italy, 1990. P. 65. [3] Das J. N., Konar A. N. // J. Phys. B. 1974. 7. P. 2417. [4] Davidovič D. M., Moiseiwitsch B. L., Norrington P. M. // J. Phys. B. 1978. 11. P. 847. [5] Stefani G., Camilloni R., Giardini-Guidoni A. // Phys. Lett. 1978. 64A. P. 364. [6] Camilloni R., Giardini-Guidoni A., McCarthy I. E., Stefani G. // Phys. Rev. 1978. A17. P. 1634; Camilloni R., Giardini-Guidoni A., McCarthy I. E., Stefani G. // J. Phys. B. 1980. 13. P. 397. [7] Popov Yu. V., Benayoun J. J. // J. Phys. B. 1981. 14. P. 3513. [8] Avaldi L., Camilloni R., Popov Yu. V., Stefani G. // Phys. Rev. 1986. A33. P. 851; Avaldi L., Camilloni R., Popov Yu. V., Stefani G. // Sov. JETP. 1986. 90. P. 1191. [9] Klar H., Franz A., Tenhagen H. // Z. f. Phys. D. 1986. 1. P. 373.

Поступила в редакцию
02.09.92