

С. Н. Федоткин

Институт ядерных исследований НАН Украины, Киев

РОЛЬ ЭКРАНИРОВАНИЯ В ПРОЦЕССЕ ИОНИЗАЦИИ АТОМА ПРИ АННИГИЛЯЦИИ ПОЗИТРОНОВ, ИСПУЩЕННЫХ В β^+ -РАСПАДЕ

Исследована роль экранирования заряда ядра электронами и корректность использования борновского приближения для вылетающего из атома электрона в процессе ионизации атома при аннигиляции позитрона с электроном дочернего атома при β^+ -распаде. Рассмотрен процесс выбивания электрона с различных атомных оболочек ($n = 1, 2, 3, 4$) при аннигиляции позитрона, испущенного при β^+ -распаде, с К-электроном дочернего атома. Показано, что учет экранирования важен только для верхней оболочки $n = 4$, в то время как выход за рамки борновского приближения играет существенную роль для всех оболочек. Однако, как и в случае водородоподобного атома, наиболее вероятный процесс связан с выбиванием другого электрона с К-оболочки.

Ключевые слова: аннигиляция, β^+ -распад, L, M, N-оболочки атома, экранирование.

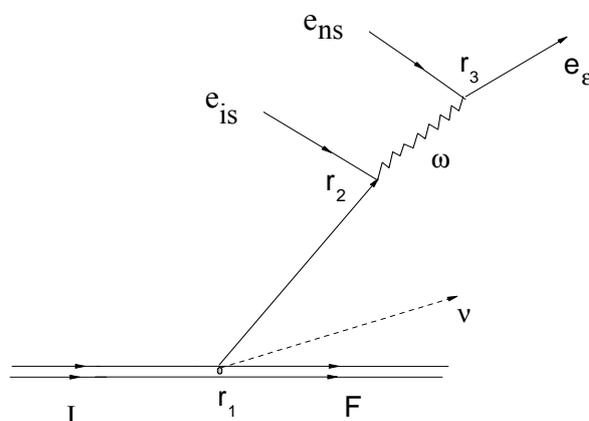
Введение

При падении пучка позитронов на атом наблюдаются либо однофотонная аннигиляция, либо происходят безрадиационные процессы возбуждения атомной оболочки [1] или ядра [2 - 5]. Аналогичные процессы могут происходить и при β^+ -распаде. Возбуждение ядра при аннигиляции испущенного при β^+ -распаде позитрона с электроном дочернего атома исследовалось экспериментально [6] и теоретически [7] в случае β^+ -распада ядра ^{45}Ti и последующего заселения возбужденного состояния ядра ^{45}Sc .

В работах [8, 9] был рассмотрен процесс аннигиляции позитрона, испущенного при β^+ -распаде, с К-электроном дочернего атома, с передачей части энергии другому s-электрону из K, L, M или N-оболочек, в результате чего он покидает атом. Сходные процессы ионизации атома при электронном захвате рассматривались в работе [10]. Для волновых функций атомных электронов в [9] использовались водородоподобные функции. Однако необходимо исследовать применимость подобного рассмотрения, поскольку для достаточно удаленных оболочек существенную роль играет взаимодействие между электронами в атоме. В настоящей работе в некотором приближении это взаимодействие учитывается путем введения эффективных зарядов. Кроме того, более корректно описывается конечное состояние электрона, покинувшего атом, которое ранее рассматривалось в борновском приближении.

Учет экранирования и выход за рамки борновского приближения в расчете вероятности ионизации атома при аннигиляции позитрона с К-электроном при β^+ -распаде

В работе [9] был рассмотрен процесс аннигиляции позитрона, испущенного при β^+ -распаде, с электроном дочернего атома с передачей части энергии другому атомному s-электрону из L, M или N-слоя (соответствующие главные квантовые числа равны $n = 2, 3, 4$).



Диаграмма, описывающая аннигиляцию испущенного в процессе β^+ -распада позитрона с электроном К-оболочки с передачей энергии ω s-электрону n-оболочки.

В качестве волновых функций атомных электронов использовались водородоподобные волновые функции. Однако с увеличением квантового числа n возрастает роль экранирования заряда ядра облаком электронов из более близких

к центру оболочек. Поэтому возникает необходимость учесть наличие этого эффекта. В настоящей работе рассматривается один из подходов, позволяющих оценить важность экранирования.

На рисунке представлена диаграмма Фейнмана, соответствующая рассматриваемому процессу.

Здесь I и F - начальное и конечное состо-

$$S_{\beta} = -\frac{ie^2}{16\pi^3} G_V M_{FI}^{\beta} \bar{\psi}_V \iint d\mathbf{r}_2 d\mathbf{r}_3 (\bar{\psi}_{\varepsilon}(\mathbf{r}_3) \gamma_{\mu} \psi_{ns}(\mathbf{r}_3)) \frac{e^{i\omega|\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_3|}}{|\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_3|} (S_{E_{03}}(\mathbf{r}_2) \gamma_{\mu} \psi_{1s}(\mathbf{r}_2)) \delta(E_3 - \varepsilon - p_V). \quad (1)$$

Здесь ψ_{ns} , $\bar{\psi}_{\varepsilon}$ - волновые функции s-электрона из оболочки n и электрона, покинувшего атом; $\bar{\psi}_V$ - волновая функция нейтрино; M_{FI}^{β} - ядерный матричный элемент, соответствующий переходу ядра из состояния I в F ; e - заряд электрона; G_V - константа векторной части слабого взаимодействия. Максимальная энергия электрона, покинувшего атом, имеет вид $E_3 = E_{IF} + E_{1s} + E_{ns}$, где $E_{IF} = E_F - E_I$, E_I и E_F - энергии ядерных состояний, а E_{1s} и E_{ns} - энергии соответствующих электронов в атоме (здесь и далее используется система единиц $\hbar = c = 1$).

Для координатной части волновой функции связанного электрона ψ_{ns} используется выражение

$$\psi_{ns}(r) = \frac{\eta_{en}^{3/2}}{\sqrt{\pi}} \frac{e^{-\eta_{en}r}}{n} L_{n-1}^1(2\eta_{en}r), \quad (2)$$

где $L_{n-1}^1(2\eta_{en}r)$ - присоединенный полином Лаггера; $\eta_{en} = Z_n m \alpha / n$; Z_n - эффективный заряд ядра, экранированный другими электронами; m - масса электрона; α - постоянная тонкой структуры. Волновая функция 1s-электрона, который аннигилирует с позитроном, имеет аналогичный вид, но с заменой $\eta_{en} \rightarrow \eta_0 = Z_0 m \alpha$, где Z_0 - эффективный заряд для этого электрона. Отметим, что волновые функции (2), строго говоря, не являются волновыми функциями атомных электронов в кулоновском поле ядра [11] несмотря на внешнее сходство обеих. Для последних вместо эффективного заряда Z_n используется один и тот же для всех электронов заряд ядра Z . В нашем подходе приближенно учитывается взаимодействие между электронами в атомной оболочке путем введения экранирующего потенциала и, следовательно, эффективного заряда Z_n для каждого электрона. Имеются различные подходы, позволяющие учитывать межэлектронное взаимодействие. Наиболее последовательным явля-

ется метод Хартри - Фока - Дирака, в рамках которого взаимодействие между атомными электронами учитывается путем самосогласованного решения уравнения Дирака. Метод Томаса - Ферми является также достаточно эффективным для расчета средних и тяжелых ядер и больших n. Однако эти методы предполагают сложные численные расчеты. Поэтому в настоящей работе используется приближенный метод, предложенный Слэтером в работе [12]. В этом подходе предполагается, что каждый электрон движется в кулоновском поле ядра и центральном поле других электронов и предлагается полуэмпирический рецепт расчета получаемого таким образом эффективного заряда Z_{ef} для электрона любой оболочки.

Здесь, как и в предыдущей работе [9], рассматриваются отношения вероятностей процессов для электронов из разных оболочек. Поэтому в расчетах пренебрегается влиянием кулоновского поля на функцию Грина и для нее используется выражение $S_{E_{03}}(\mathbf{r}) = 2\pi^2 B_3 \frac{e^{ib_n r}}{r}$ [8], где

$$B_3 = \beta E_{03} + m, \quad b_n = \sqrt{E_{03}^2 - m^2},$$

$$E_{03} = E_{1s} + E_{ns} - \varepsilon. \quad (3)$$

Для волновой функции вылетающего из атома электрона $\bar{\psi}_{\varepsilon}(\mathbf{r}_3)$ используется приближение плоских волн вместо волновых функций непрерывного спектра в кулоновском поле. Поскольку это приближение является недостаточно точным при малых энергиях вылетающего электрона, при вычислении полной вероятности процесса будет использован фактор Зоммерфельда $\Phi_n(\varepsilon)$, приближенно корректирующий поведение волновой функции при малых энергиях [13, 14]:

$$\Phi_n(\varepsilon) = \frac{2\pi\xi}{(1 - e^{-2\pi\xi})}, \quad \xi = \frac{Z_n \alpha}{v}, \quad (c = 1) \quad (4)$$

где V - скорость вылетевшего из атома электрона, имеющего энергию ε . Борновское приближение корректно при $\xi \ll 1$. Этот подход позволяет, с одной стороны, максимально упростить расчет координатной части амплитуды вероятности S_{fi} (1), а с другой стороны, за счет фактора

$$S_{fi} = -\frac{ie^2 \eta_0^{3/2} \eta_{en}^{3/2}}{16\pi^4} G_V M_{FI}^\beta (\bar{u}_\varepsilon \gamma_\mu u_{ns}) (\bar{u}_\nu \gamma_4 (1 + \gamma_5) B_3 \gamma_\mu u_{1s}) I_n(\mathbf{p}_\varepsilon) \delta(E_3 - \varepsilon - p_\nu). \quad (5)$$

Здесь $\bar{u}_\nu, \bar{u}_\varepsilon, u_{ns}$ - биспинорные части волновых функций нейтрино, вылетевшего из атома электрона с энергией ε и s-электронов соответ-

$$I_n(\mathbf{p}_\varepsilon) = \frac{1}{n} \int \frac{d\mathbf{q} d\mathbf{r}_2 d\mathbf{r}_3}{q^2 \cdot r_2} e^{i\mathbf{r}_2 \mathbf{q} + (ib_n - \eta_0) r_2} e^{i\mathbf{r}_3 (\mathbf{q} - \mathbf{p}_\varepsilon) - \eta_{en} r_3} L_{n-1}^1(2\eta_{en} r_3) \quad (6)$$

и был вычислен в работе [9] для случая, когда экранирование не учитывалось. Определяя амплитуду вероятности S_{fi} стандартным образом

$$S_{fi} = 2\pi U_{fi} \delta(E_3 - \varepsilon - p_\nu), \quad (7)$$

где U_{fi} имеет вид

$$U_{fi} = -\frac{ie^2 \eta_0^{3/2} \eta_{en}^{3/2}}{32\pi^5} G_V M_{FI}^\beta (\bar{u}_\varepsilon \gamma_\mu u_{ns}) \times (\bar{u}_\nu \gamma_4 (1 + \gamma_5) B_3 \gamma_\mu u_{1s}) I_n(\mathbf{p}_\varepsilon), \quad (8)$$

получаем для вероятности процесса $W_{\beta^+K,n}$ с выбиванием электрона из атомной оболочки ns выражение:

$$J_{\beta^+K,n} = \int_m^{E_3} d\varepsilon \frac{(E_3 - \varepsilon)^2 \sqrt{\varepsilon^2 - m^2} [(\varepsilon + m)(\varepsilon - 3m)^2 + 3(\varepsilon - m)^3] |3\eta_0 - ib_n|^2}{(\varepsilon^2 - m^2 + \eta_{sn}^2)^{2n} |\varepsilon^2 - m^2 + 4\eta_0^2 - b_n^2 - 4i\eta_0 b_n|^2 |\eta_0 - ib_n|^2} F_n(\varepsilon) \Phi_n(\varepsilon). \quad (11)$$

Функции $F_n(\varepsilon)$ для различных значений n представлены формулами (11):

$$F_1(\varepsilon) = 1, \quad F_2(\varepsilon) = (\varepsilon^2 - \eta_{e2}^2 - m^2)^2,$$

$$F_3(\varepsilon) = [(\varepsilon^2 - m^2)^2 - \frac{10}{3}(\varepsilon^2 - m^2)\eta_{e3}^2 + \eta_{e3}^4]^2,$$

$$F_4(\varepsilon) = [(\varepsilon^2 - m^2)^3 - 7(\varepsilon^2 - m^2)^2 \eta_{e4}^2 + 7(\varepsilon^2 - m^2) \eta_{e4}^4 - \eta_{e4}^6]^2. \quad (12)$$

Определим теперь отношение вероятности аннигиляции испущенного при β^+ -распаде позитрона с К-электроном дочернего атома и выбивании из атомной оболочки второго К-электрона

Зоммерфельда $\Phi_n(\varepsilon)$ в значительной мере компенсировать неточность приближения плоских волн.

Пренебрегая запаздыванием, представим амплитуду вероятности рассматриваемого процесса S_{fi} в следующем виде:

ствующих оболочек соответственно. Интеграл $I_n(\mathbf{p}_\varepsilon)$ имеет вид

$$W_{\beta^+K,n} = 2\pi \sum_{s_\varepsilon, s_\nu} \int \frac{d\mathbf{p}_\varepsilon}{(2\pi)^3} \frac{d\mathbf{p}_\nu}{(2\pi)^3} |U_{fi}|^2 \delta(E_3 - \varepsilon - p_\nu). \quad (9)$$

Выполняя суммирование по проекциям спинов всех частиц в начальном и конечном состояниях способом, указанным в [8], усредняя по спинам начальных состояний и выполняя интегрирование по углам вылета частиц и по энергии нейтрино, получаем окончательное выражение для вероятности аннигиляции испущенного при β^+ -распаде позитрона с К-электроном дочернего атома и выбивании из атомной оболочки с квантовым числом ns-электрона

$$W_{\beta^+K,n} = \frac{4\alpha^2 (Z_0 Z_n)^3 (m\alpha)^6}{\pi^3 n^3} |M_{FI}^\beta|^2 J_{\beta^+K,n}. \quad (10)$$

Интеграл $J_{\beta^+K,n}$ имеет вид

$W_{\beta^+K,1}$ к вероятности β^+ -распада W_{β^+} [8]:

$$\frac{W_{\beta^+K,1}}{W_{\beta^+}} = 8\alpha^2 (Z_0 Z_1)^3 (m\alpha)^6 \frac{J_{\beta^+K,1}}{I_{\beta^+}}. \quad (13)$$

Выражение для интеграла I_{β^+} приведено в [8].

Формулы для вероятности процесса (9), полученные выше, являются общими и могут быть применимы для любого атома. В случае β^+ -распада ^{45}Ti и образованием ^{45}Sc согласно методу Слэтера [12], который подробно изложен в [15], получаем следующие значения эффективных зарядов для электронов на различных s-оболочках:

$$Z_0 = 20,7, \quad Z_1 = 21, \quad Z_2 = 17,7, \\ Z_3 = 10,75, \quad Z_4 = 2,8. \quad (14)$$

Используя определения (14) для эффективных зарядов, получаем оценку для числа случаев аннигиляции позитрона с К-электроном с выбиванием другого К-электрона на один акт β^+ -распада [8]:

$$\frac{W_{\beta^+K,1}}{W_{\beta^+}} \approx 5 \cdot 10^{-5}. \quad (15)$$

Согласно определению (10), определим отношения вероятности аннигиляции испущенного при β^+ -распаде позитрона с К-электроном дочернего атома и выбивании s-электрона из атомной оболочки с квантовым числом n ($n = 2, 3, 4$) $W_{\beta^+K,n}$ к вероятности $W_{\beta^+K,1}$:

$$\frac{W_{\beta^+K,n}}{W_{\beta^+K,1}} = \frac{1}{n^3} \left(\frac{Z_n}{Z_1} \right)^3 \frac{J_{\beta^+K,n}}{J_{\beta^+K,1}}. \quad (16)$$

Вычисляя интегралы $J_{\beta^+K,n}$ (11) с помощью соотношения (16), получаем следующие оценки для отношения вероятностей различных процессов с учетом экранирования и выходом за рамки борновского приближения:

$$\frac{W_{\beta^+K,2}}{W_{\beta^+K,1}} \approx 0,324, \quad \frac{W_{\beta^+K,3}}{W_{\beta^+K,1}} \approx 0,114, \\ \frac{W_{\beta^+K,4}}{W_{\beta^+K,1}} \approx 0,012. \quad (17)$$

Отметим, что в случае, когда не учитывается экранирующее действие электронов атомной оболочки и используется приближение плоских волн для волновой функции выбитого из атомной оболочки электрона, для этих отношений ранее были получены такие оценки [9]:

$$\frac{W_{\beta^+K,2}}{W_{\beta^+K,1}} \approx 0,17, \quad \frac{W_{\beta^+K,3}}{W_{\beta^+K,1}} \approx 0,057, \\ \frac{W_{\beta^+K,4}}{W_{\beta^+K,1}} \approx 0,024. \quad (18)$$

Если же учитывать экранирование, но использовать борновское приближение, то получаются следующие результаты:

$$\frac{W_{\beta^+K,2}}{W_{\beta^+K,1}} \approx 0,18, \quad \frac{W_{\beta^+K,3}}{W_{\beta^+K,1}} \approx 0,059, \\ \frac{W_{\beta^+K,4}}{W_{\beta^+K,1}} \approx 0,01. \quad (19)$$

Таким образом, если учитывать только экранирующее влияние электронов, то согласно результатам (19) и (18) отношение вероятностей рассматриваемых процессов для различных оболочек очень слабо меняется для оболочек с $n = 2, 3$ и заметно уменьшается лишь для $n = 4$. Если при этом учитывать как экранирующее влияние электронов, так и поправки к борновскому приближению, то согласно (17) отношения вероятностей для $n = 2, 3$ сильно увеличиваются, а для $n = 4$ заметно уменьшаются по сравнению с оценками (18).

Следовательно, процесс аннигиляции испущенного при β^+ -распаде позитрона с К-электроном дочернего атома с последующим выбиванием из атомной оболочки второго К-электрона с учетом экранирования и выходом за рамки борновского приближения является значительно более вероятным по сравнению с процессами, в которых атомный электрон выбивается из более удаленных слоев L, M, N. Причем выход за рамки борновского приближения при расчете волновой функции электрона в конечном состоянии оказывается значительно более существенным, чем учет экранирования. Чем с более удаленного слоя выбивается электрон, тем меньше вероятность рассматриваемого процесса. Электроны с орбитальным моментом, отличным от нуля, для каждого слоя являются менее связанными и более удаленными от ядра, чем s-электроны, поэтому аналогичное уменьшение вероятности рассмотренных процессов с увеличением квантового числа n должно происходить и для них.

Выводы

Исследованы влияние экранирования заряда ядра атомными электронами и уточнения борновского приближения на вероятность ионизации атома при аннигиляции позитрона с электроном дочернего атома при β^+ -распаде. Рассмотрены процессы выбивания электрона с различных атомных оболочек ($n = 1, 2, 3, 4$) при аннигиляции позитрона, испущенного при β^+ -распаде, с К-электроном дочернего атома. Показано, что учет экранирования важен только для расчета вероятности процесса с участием электронов верхней оболочки с $n = 4$, в то время как выход за рамки борновского приближения при расчете

волновой функции электрона в конечном состоянии существенен для всех ns-оболочек ($n = 1, 2, 3, 4$). Однако, как и в случае водородоподобного

атома, наиболее вероятный процесс связан с выбиванием другого электрона с K-оболочки.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Shimizu S., Mucoyama T., Nakayama Y. Radiationless annihilation of positron in lead // Phys.Rev. - 1968. - Vol. 173, № 2. - P. 405 - 416.
2. Present R., Chen S. Nuclear desintegration by positron- K-electron annihilation // Phys. Rev. - 1952. - Vol.85. - P. 447 - 451.
3. Mukoyama T., Shimizu S. Nuclear excitation by positron annihilation // Phys. Rev. - 1972. - Vol. C5. - P. 95 - 99.
4. Вишневецкий И.Н., Желтоножский В.А., Свято В.П., Тришин В.В. Ядерное возбуждение под действием бесфотонной аннигиляции позитронов // Письма ЖЭТФ. - 1979. - Т. 30. - С. 394.
5. Гречухин Д.П., Солдатов А.А. Возбуждение ядра при аннигиляции позитронов на K-оболочке тяжелых атомов // ЖЭТФ. - 1978. - Т. 74. - С. 13 - 22.
6. Борозенец Г.П., Вишневецкий И.Н., Желтоножский В.А. Возбуждение ядра при аннигиляции позитронов в процессе β^+ -распада // Ядерная физика. - 1986. - Т. 43, вып. 1. - С. 14 - 16.
7. Коломиец В.М., Пунинский О.Г., Федоткин С.Н. Возбуждение ядра при аннигиляции позитрона с K-электроном в процессе β^+ -распада // Изв. АН СССР. Сер. физ. - 1988. - Т. 52, № 1. - С. 12 - 17.
8. Федоткин С.Н. Аннигиляция позитронов, испущенных при β^+ -распаде, с электронами дочернего атома // Ядерна фізика та енергетика. - 2010. - Т. 11, № 3. - С. 233 - 238.
9. Федоткин С.Н. Ионизация атома при аннигиляции позитронов, испущенных при β^+ -распаде // Ядерна фізика та енергетика. - 2011. - Т. 12, № 4. - С. 335 - 338.
10. Mukoyama T., Shimizu S. L-shell contributions to internal ionization accompanying electron capture // Phys. Rev. - 1974. - Vol. 9. - P. 2300 - 2306.
11. Бете Г., Солтимер Э. Квантовая механика атомов с одним и двумя электронами. - М.: Физматгиз, 1960. - 562 с.
12. Slater J.C. // Phys. Rev. - 1930. - Vol. 36. - P. 37 - 49.
13. Elwert G. // Ann. d. Phys. - 1939. - Vol. 34. - P. 178 - 189.
14. Гайтлер В. Квантовая теория излучения. - М.: Изд-во иностр. лит., 1956. - 491 с.
15. Фриш С.Э. Оптические спектры атомов. - М.: Физматгиз, 1963. - 641 с.

С. М. Федоткин

**РОЛЬ ЕКРАНУВАННЯ У ПРОЦЕСІ ІОНІЗАЦІЇ АТОМА
ПРИ АНІГІЛЯЦІЇ ПОЗИТРОНІВ, ВИПУЩЕНИХ У β^+ -РОЗПАДІ**

Досліджено роль екранування заряду ядра та коректність використання борнівського наближення для електрона, що покидає атом, у процесі іонізації атома при анігіляції позитрона з електроном дочірнього атома при β^+ -розпаді. Розглянуто процес вибивання електрона з різних атомних оболонок ($n = 1, 2, 3, 4$) при анігіляції позитрона, випущеного при β^+ -розпаді, з K-електроном дочірнього атома. Показано, що врахування екранування важливе тільки для верхньої оболонки $n = 4$, у той час як вихід за межі борнівського наближення грає суттєву роль для всіх оболонок. Однак найбільш імовірний процес пов'язаний з вибиванням другого електрона з K-оболонки.

Ключові слова: анігіляція, β^+ -розпад, атомна оболонка, L, M, N-шари атома, екранування.

S. N. Fedotkin

**ATOMIC IONIZATION AT POSITRON ANNIHILATION
AT β^+ -DECAY WITH TAKING INTO ACCOUNT SCREENING**

The role of the nuclear charge screening and correctness of Born approximation for electron which is leaving atom in the process of atomic ionization at annihilation of positron with another electron of daughter's atom at β^+ -decay is studied. Processes of the different atomic shells ionization at annihilation of positron, emitted at β^+ -decay, with K-electron of daughter's atom are considered. It is shown that the screening effect is important only for shell with $n = 4$. While corrections to the Born approximation plays the essential role for all shells. It is shown that the most probable process is related with emission of other K-electron.

Keywords: annihilation, β^+ -decay, atomic shell, K-electron, L, M, N-atomic shells, screening.

Надійшла 31.08.2012

Received 31.08.2012