

О ВОЗМОЖНОСТИ ПРЯМОГО РАЗРУШЕНИЯ F -ЦЕНТРОВ РЕНТГЕНОВЫМИ ЛУЧАМИ

М. М. АРИНШТЕИН

Облучение щелочно-галогидных кристаллов рентгеновыми лучами приводит как к генерации, так и к разрушению F -центров [1].

В настоящей работе делается попытка оценить роль эффекта разрушения F -центров за счет прямых взаимодействий квантов ионизирующих излучений с электроном F -центра. Такими процессами могут быть фотоэффект и комптоновское рассеяние на электроном F -центра.

В первом приближении можно принять для электрона F -центра водородоподобную волновую функцию [2]. Эффективный поперечник фотоэффекта для такого состояния рассчитан [3] и в интересующем нас случае может быть получен заменой радиуса орбиты a_0 на величину $\frac{a}{\xi}$ из работы [2], где a — постоянная решетки, ξ — вариационный параметр экранизации.

При рассмотрении эффекта Комптона обычно предполагается, что электрон можно считать свободным [3]. Это справедливо для жестких квантов с энергиями порядка сотен keV и выше. Однако при более низких энергиях квантов могут проявиться силы связи электрона. Наличие связи приведет к тому, что в процессе комптоновского рассеяния будет нарушаться закон сохранения импульса. Тогда число конечных состояний электрона увеличивается и эффективное сечение рассеяния изменится.

Этот эффект может представлять интерес для теории взаимодействия рентгеновского излучения с веществом. В настоящей работе рассматривается эффект Комптона на слабо связанном электроном, т. е. когда

$$|E_{\text{св}}| \ll \hbar \omega,$$

где $E_{\text{св}}$ — энергия связи электрона. Гамильтониан взаимодействия излучения с электроном берется в виде

$$\hat{H} = -e_0(\boldsymbol{\alpha}\hat{\mathbf{A}}), \quad (1)$$

где $\boldsymbol{\alpha}$, β — матрицы Дирака, $\hat{\mathbf{A}}$ — векторный потенциал электромагнитного поля.

Начальное состояние связанного электрона можно моделировать водородоподобной волновой функцией

$$\psi_e = \frac{u_0}{\sqrt{\pi}} a_0^{-3/2} \exp\left(-\frac{r}{a_0}\right), \quad (2)$$

где u_0 — спинор, отвечающий состояниям с положительной энергией, у которого две последние компоненты равны нулю. Этот спинор удовлетворяет уравнению: $\beta u_0 = u_0$,

a_0 — радиус орбиты электрона в связанном состоянии. При уменьшении $E_{\text{св}}$ a_0 увеличивается.

Конечное состояние электрона возьмем в виде плоской спинорной волны, нормированной в объеме V . Векторный потенциал разложим по плоским волнам, также нормированным в объеме V :

$$\hat{\mathbf{A}} = c \sqrt{\frac{2\pi\hbar}{V}} \sum_{\mathbf{k}} \frac{\mathbf{e}_{\mathbf{k}}}{\omega_{\mathbf{k}}} e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} (\hat{a}_{\mathbf{k}} + \hat{a}_{-\mathbf{k}}^+),$$

где $\hat{a}_{\mathbf{k}}$, $\hat{a}_{-\mathbf{k}}^+$ — операторы поглощения и рождения квантов с частотой $\omega_{\mathbf{k}}$ и поляризацией $\mathbf{e}_{\mathbf{k}}$.

Во втором порядке теории возмущений получим матричный элемент перехода в виде

$$H_{10} = - \left(\hat{H} \frac{1}{\hat{H}_0 - E_0} \hat{H} \right)_{10} = - \frac{e_0^2 2\pi\hbar c^2}{V^{3/2} \sqrt{\omega_0 \omega_1}} \{I_1 + I_2\}, \quad (3)$$

где

$$I_1 = \int e^{i\mathbf{k}_0\mathbf{r} - i\mathbf{k}_e\mathbf{r}} u_1^+(\mathbf{e}_0, \boldsymbol{\alpha}) \frac{1}{\hat{H}_e + \hbar\omega_1 - E_e^0} e^{-i\mathbf{k}_1\mathbf{r}} (\mathbf{e}_1, \boldsymbol{\alpha}) \psi_e d\mathbf{r},$$

$$\hat{H}_e = \hat{H}_D + W, \quad \hat{H}_D = c(\boldsymbol{\alpha}, \hat{\mathbf{p}}) + \beta mc^2,$$

$$E_e^0 = mc^2 + E_{\text{св}},$$

W — потенциальная энергия;

ω_0 , $\mathbf{k}_0$, $\mathbf{e}_0$ — частота, волновой вектор и единичный вектор поляризации для кванта в начальном состоянии;

ω_1 , $\mathbf{k}_1$, $\mathbf{e}_1$ — то же для конечного состояния кванта; u_1 — спинор, описывающий конечные состояния электрона;

$\mathbf{k}_e$ — волновой вектор электрона.

I_2 может быть получен из I_1 заменой ω_0 на $-\omega_1$, $\mathbf{k}_0$ на $-\mathbf{k}_1$,

$\mathbf{k}_1$ на $-\mathbf{k}_0$. Поэтому достаточно вычислить один из интегралов.

Ввиду того, что энергия связи мала, потенциальную энергию можно рассматривать как возмущение. Тогда

$$\begin{aligned} \frac{1}{\hat{H}_e - \hbar\omega_0 - E_e^0} &= \frac{1}{\hat{H}_D - \hbar\omega_0 - mc^2} - \frac{1}{\hat{H}_D - \hbar\omega_0 - mc^2} (W - E_{\text{св}}) \\ &\quad \frac{1}{\hat{H}_D - \hbar\omega_0 - mc^2} + \dots \end{aligned} \quad (4)$$

Разлагая функцию $\frac{1}{\sqrt{\pi} a_0^{3/2}} \exp\left(-\frac{r}{a_0}\right)$ в интеграл Фурье и ограничиваясь в формуле (4) одним членом, получим

$$I_1 = \frac{8\sqrt{\pi} a_0^{3/2}}{(1 + a_0^2 \mathbf{k}^2)^2} \frac{u_1^+(\mathbf{e}_0, \boldsymbol{\alpha}) [\hbar\omega_1 - E_{\text{св}} + \hbar c(\mathbf{k}_0 - \mathbf{k}_e; \boldsymbol{\alpha})] (\mathbf{e}_1, \boldsymbol{\alpha}) u_0}{2mc^2 \hbar\omega_1 + c^2 \hbar^2 [(\mathbf{k}_0 - \mathbf{k}_e)^2 - \mathbf{k}_1^2]} + \dots, \quad (5)$$

где $\hbar \mathbf{k} = (\mathbf{k}_0 - \mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_e) \hbar$ — величина несохранения импульса.

Оператор, проектирующий спинор u_1 на состояние с положительной энергией, равен

$$\frac{c\hbar}{2E_e} \left[(\boldsymbol{\alpha} \mathbf{k}_e) + \frac{mc}{\hbar} \beta + \frac{E_e}{c\hbar} \right],$$

$$\text{спинор } u_0 = \frac{1 + \beta}{2}.$$

Вводя эти операторы, усредняя по начальным состояниям спина электрона и суммируя по конечным состояниям спина, что сводится при введении проекционных операторов к взятию шпура, получим

$$\begin{aligned} 2 \overline{H_{01}^+ H_{10}} &= \frac{64 \pi^3 e_0^4 \hbar^2 a_0^3}{V^3 m k_0 k_1 E_e (1 + a_0^2 k^2)^4} \left\{ \frac{\omega_0}{\omega_1} + \frac{\omega_1}{\omega_0} - 2 + 4 (\mathbf{e}_0 \mathbf{e}_1)^2 + \right. \\ &\quad + \frac{\hbar}{mc} \frac{k_0 - k_1}{k_0 k_1} \left[(k_0 + k_1) \left(\frac{\mathbf{k}_0}{k_0} + \frac{\mathbf{k}_1}{k_1}; \mathbf{k} \right) + (\mathbf{k}_e \mathbf{k}) + \right. \\ &\quad + \left. \frac{(k_0 + k_1)^2 + k_0 k_1}{2 k_0 k_1} k^2 \right] + \frac{2\hbar}{mc} (\mathbf{e}_1 \mathbf{e}_1) \left[\frac{1}{k_1} (\mathbf{e}_0 \mathbf{k}_1) (\mathbf{e}_1 \mathbf{k}_1) - \right. \\ &\quad - \left. \frac{1}{k_0} (\mathbf{e}_1 \mathbf{k}_0) (\mathbf{e}_0 \mathbf{k}) \right] + \left. \frac{2\hbar}{mc} (\mathbf{e}_0 \mathbf{e}_1)^2 \left(\frac{\mathbf{k}_0}{k_0} + \frac{\mathbf{k}_1}{k_1} - 2 \frac{k_0 - k_1}{k_0 k_1} \mathbf{k}_e; \mathbf{k} \right) \right\} = \\ &= \frac{64 \pi^3 e_0^4 \hbar^2 a_0^3}{V^3 m k_0 k_1 E_e (1 + a_0^2 k^2)^4} \left\{ \frac{\omega_0}{\omega_1} + \frac{\omega_1}{\omega_0} - 2 + 4 (\mathbf{e}_0 \mathbf{e}_1)^2 + \Delta \right\}, \end{aligned} \quad (6)$$

где E_e — энергия электрона в конечном состоянии.

Отсюда получаем дифференциальное эффективное сечение Комптон-эффекта

$$d\sigma = \frac{V}{c} \frac{2\pi}{\hbar} \delta(E_{\text{кон.}} - E_{\text{нач.}}) 2 \overline{H_{01}^+ H_{10}} \frac{V^2}{(2\pi)^6} k_e^2 dk_e d\Omega_e k_1^2 dk_1 d\Omega_1, \quad (7)$$

δ — функция выражает закон сохранения энергии.

Так как энергия электрона полностью определяется через энергию начального и конечного состояний кванта, то выражение (7) можно упростить, проинтегрировав его по dk_e . Так как

$$c^2 \hbar^2 k_e^2 + m^2 c^4 = E_e^2, \text{ то } \frac{dk_e}{E_e} = \frac{dE_e}{c^2 \hbar^2 k_e}$$

и интегрирование по dE_e дает

$$d\sigma = \frac{2 r_0^2 m c a^3 k_e k_1 dk_1 d\Omega_e d\Omega_1}{\hbar \pi^2 k_0 (1 + a_0^2 k^2)^4} \left\{ \frac{\omega_0}{\omega_1} + \frac{\omega_1}{\omega_0} - 2 + 4 (\mathbf{e}_0 \mathbf{e}_1)^2 + \Delta \right\}, \quad (8)$$

где $r_0 = \frac{e_0^2}{mc^2}$ — классический радиус электрона.

Формула (8) дает распределение рассеянных квантов по энергиям и направлениям и распределение комптоновских электронов по направлениям. Так как функция $(1 + a_0^2 k^2)^{-4}$ имеет достаточно острый максимум при $k = 0$, то передача импульса связи не может превышать величину $\frac{\hbar}{a_0}$. При достаточно больших a_0 эта величина очень мала и поправки к формуле Клейна—Нишины, даваемые $\Delta \sim k$, достаточно малы. Для получения распределения квантов проинтегрируем

формулу (8) по направлениям вылета электронов, считая величину импульса электрона заданной:

$$k_e^2 = (k_0 - k_1)^2 + 2(k_0 - k_1) \frac{mc}{\hbar}.$$

Как это непосредственно видно из формулы (8) ширина распределения вторичных квантов по импульсам будет $\sim \frac{\hbar}{a}$. Максимум распределения приходится на импульс, который определяется законами сохранения энергии и импульса в обычной теории комптоновского эффекта

$$\frac{1}{k_1} = \frac{1}{k_0} + \frac{\hbar}{2mc} (1 - \cos \vartheta).$$

Проинтегрировав это распределение возле максимума, получим дифференциальное эффективное сечение рассеяния в заданный угол:

$$d\sigma = \frac{r_0^4}{4} \frac{\omega_1^2}{\omega_0^2} \left\{ \frac{\omega_0}{\omega_1} + \frac{\omega_0}{\omega_1} - 2 + 4(\mathbf{e}_0 \mathbf{e}_1)^2 + \frac{\hbar}{ma_0^2} \frac{\omega_0 - \omega_1}{\omega_0 \omega_1} \times \right. \\ \times \left[\frac{(\omega_0 + \omega_1)^2}{2\omega_0 \omega_1} + 2(\mathbf{e}_0 \mathbf{e}_1) + \frac{\frac{1}{2}(\omega_0^2 - \omega_1^2)(1 + \cos \vartheta)}{\omega_0^2 + \omega_1^2 - 2\omega_0 \omega_1 \cos \vartheta} + \right. \\ \left. \left. + \frac{(\mathbf{e}_0 \mathbf{e}_1)^2 \omega_0 \omega_1 (1 + \cos \vartheta)}{\omega_0^2 + \omega_1^2 - 2\omega_0 \omega_1 \cos \vartheta} + \frac{(\mathbf{e}_0 \mathbf{e}_1)(\mathbf{e}_1 \mathbf{k}_0)(\mathbf{e}_0 \mathbf{k}_1)}{(\mathbf{k}_0 - \mathbf{k}_1)^2} \right] \right\} d\Omega_1 = d\sigma_0 + d\sigma'. \quad (9)$$

В случае неполяризованного излучения нужно усреднить по поляризациям начального кванта и просуммировать по состояниям конечного кванта. При этом усреднении $(\mathbf{e}_0 \mathbf{e}_1)^2$ дает $\frac{1 + \cos^2 \vartheta}{2}$,

$$(\mathbf{e}_0 \mathbf{e}_1)(\mathbf{e}_1 \mathbf{k}_0)(\mathbf{e}_0 \mathbf{k}_1) \text{ дает } -\frac{1}{2} \sin^2 \vartheta \cos \vartheta k_0 k_1.$$

В предельных случаях нерелятивистском и крайнем релятивистском полученные формулы упрощаются.

а. Нерелятивистский случай:

$$\alpha = \frac{\hbar \omega_0}{mc^2} = \frac{\lambda_k}{\lambda_0} \ll 1.$$

Тогда поправка к дифференциальному эффективному сечению будет

$$d\sigma' = \frac{r_0^2}{32} \left(\frac{\lambda_k}{2\pi a_0} \right)^2 [13 - 12 \cos \vartheta + 5 \cos^2 \vartheta - 2 \cos^3 \vartheta] d\Omega. \quad (10)$$

Поправка к интегральному сечению

$$\sigma' = \frac{11}{6} \pi r_0^2 \left(\frac{\lambda_k}{2\pi a_0} \right)^2, \quad (11)$$

в то время как формула Клейна—Нишины в нерелятивистском случае дает томсоновское сечение

$$\sigma_0 = \frac{8}{3} \pi r_0^2.$$

б. Крайне релятивистский случай:

$$\alpha \gg 1.$$

Поправки к дифференциальному и интегральному сечениям будут

$$d\sigma' = \frac{r_0^2}{8\alpha} \left(\frac{\lambda_k}{2\pi a_0} \right)^2 d\Omega \quad (12)$$

и

$$\sigma' = \frac{\pi r_0^2}{2\alpha} \left(\frac{\lambda_k}{2\pi a_0} \right)^2. \quad (13)$$

При этом формула Клейна—Нишины дает

$$\sigma_0 = \frac{\pi r_0^2}{\alpha} \ln 2\alpha.$$

Таким образом, мы видим, что поправки к формуле Клейна—Нишины получают заметную величину тогда, когда эффективные размеры волновой функции a_0 достаточно малы (не намного превышают комптоновскую длину), что возможно только в случае не очень слабой связи.

В наших условиях, когда $a_0 \sim 10^{-8}$ см, относительная величина поправки $\frac{\sigma'}{\sigma_0} \sim 10^{-5}$, то есть формула Клейна—Нишины дает достаточную точность.

При облучении рентгеновскими лучами с $\lambda_{\text{хар}} = 1,537 \text{ \AA}$ (рентгеновская трубка с медным антикатодом) и $\lambda_{\text{эфф}} = 0,385 \text{ \AA}$ (рентгеновская трубка с вольфрамовым антикатодом) величина сечения для прямых процессов имеет следующие значения:

Таблица 1

	Фотоэффект		Комптон-эффект	
	$\sigma (\text{см}^2)$		$\sigma_0 (\text{см}^2)$	$\sigma' (\text{см}^2)$
	$\lambda_{\text{хар}} = 1,537 \text{ \AA}$	$\lambda_{\text{эфф}} = 0,385 \text{ \AA}$		
LiF	$1,73 \cdot 10^{-26}$	$1,38 \cdot 10^{-28}$	$0,67 \cdot 10^{-20}$	$0,50 \cdot 10^{-25}$
NaCl	$0,58 \cdot 10^{-26}$	$0,46 \cdot 10^{-28}$		$0,35 \cdot 10^{-25}$
KCl	$0,42 \cdot 10^{-26}$	$0,33 \cdot 10^{-28}$		$0,28 \cdot 10^{-25}$
RbBr	$0,30 \cdot 10^{-26}$	$0,24 \cdot 10^{-28}$		$0,25 \cdot 10^{-25}$

Из табл. 1 видно, что в наших условиях прямые эффекты имеют очень малое сечение.

Обычно при изучении кинетики накопления F -центров при облучении рентгеновыми лучами применяются потоки 10^{11} квантов/см² в 1 сек.

Если $\sigma_0 \sim 10^{-20}$, то вероятность разрушения одного F -центра при падении 10^{11} квантов/см² в 1 сек равна 10^{-9} сек⁻¹, т. е. в 1 сек разрушается один из 10^9 F -центров.

ЛИТЕРАТУРА

1. P. V. Mitchell, D. A. Wiegand, and R. Smoluchowski, Phys. Rev., **121**, 484, 1961.
2. Б. Гурари и Ф. Адриан. Сб. „Центры окраски“, ИЛ, 1958.
3. В. Гайтлер. Квантовая теория излучения. ИЛ, 1956.