ИЗВЕСТИЯ
ТОМСКОГО ОРДЕНА ТРУДОВОГО КРАСНОГО ЗНАМЕНИ ПОЛИТЕХНИЧЕСКОГО ИНСТИТУТА имени С. М. КИРОВА

Том 140 1965

О ВОЗМОЖНОСТИ ПРЯМОГО РАЗРУШЕНИЯ F-ЦЕНТРОВ РЕНТГЕНОВЫМИ ЛУЧАМИ

М. М. АРИНШТЕЙН

Облучение щелочно-галоидных 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 ионизируюших излучений с электроном F-центра. Такими процессами могут быть фотоэффект и комптоновское рассеяние на электроне 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 электроне, т. е. когда

$$|E_{св}| \ll h\omega,$$

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

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

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

Начальное состояние связанного электрона можно моделировать водородоподобной волновой функцией

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

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 $E_{св}$ 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:

$$\hat{\mathbf{A}} = c\sqrt{\frac{2\pi\hbar}{V}} \sum \frac{\mathbf{e}_к}{\sqrt{\omega_к}} e^{i\mathbf{k}\boldsymbol{r}} (\hat{a}_к + \hat{a}_{-к}^{+}),$$

где $\hat{a}_к$, $\hat{a}_{-к}^{+}$ — операторы поглощения и рождения квантов с частотой $\omega_к$ и поляризацией $\boldsymbol{e}_к$.

Во втором порядке теории возмущений получим матричный элемент перехода в виде

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

где

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

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

$$\mathrm{E}_e^0 = mc^2 + \mathrm{E}_{св},$$

W — потенциальная энергия;

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

ω_1, $\boldsymbol{k}_1$, $\mathbf{e}_1$ — 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 $-\mathbf{k}_1$, $\boldsymbol{k}_1$ на $-\mathbf{k}_0$. Поэтому достаточно вычислить один из интегралов.

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

$$\frac{1}{\hat{\mathrm{H}}_e - \hbar\omega_0 - \mathrm{E}_e^0} = \frac{1}{\hat{\mathrm{H}}_\mathrm{D} - \hbar\omega_0 - mc^2} - \frac{1}{\hat{\mathrm{H}}_\mathrm{D} - \hbar\omega_0 - mc^2} \left(W - \mathrm{E}_{св}\right) \frac{1}{\hat{\mathrm{H}}_\mathrm{D} - \hbar\omega_0 - mc^2} + \ldots \tag{4}$$

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

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

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

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

спинор $u_0 = \dfrac{1+\beta}{2}$.

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

$$2\overline{H_{01}^{+} H_{10}} = \frac{64\pi^3 e_0^4 \hbar^2 a_0^3}{V^3 m k_0 \kappa_1 E_e (1 + a_0^2 k^2)^4}\left\{\frac{\omega_0}{\omega_1} + \frac{\omega_1}{\omega_0} - 2 + 4(\mathbf{e}_0\mathbf{e}_1)^2 + \right.$$

$$+ \frac{\hbar}{mc}\frac{k_0 - k_1}{k_0 k_1}\left[(k_0 + k_1)\left(\frac{\mathbf{k}_0}{k_0} + \frac{\mathbf{k}_1}{k_1};\ \mathbf{k}\right) + (\mathbf{k}_e\mathbf{k}) + \right.$$

$$\left. + \frac{(k_0 + k_1)^2 + k_0 k_1}{2 k_0 k_1} k^2\right] + \frac{2\hbar}{mc}(\mathbf{e}_1\mathbf{e}_1)\left[\frac{1}{k_1}(\mathbf{e}_0\mathbf{k}_1)(\mathbf{e}_1\mathbf{k}_1) - \right.$$

$$\left.\left. - \frac{1}{k_0}(\mathbf{e}_1\mathbf{k}_0)(\mathbf{e}_0\mathbf{k})\right] + \frac{2\hbar}{mc}(\mathbf{e}_0\mathbf{e}_1)^2\left(\frac{\mathbf{k}_0}{k_0} + \frac{\mathbf{k}_1}{k_1} - 2\frac{k_0 - k_1}{k_0 k_1}\mathbf{k}_e;\ \mathbf{k}\right)\right\} =$$

$$= \frac{64\pi^3 e_0^4 h^2 a_0^3}{V^3 m k_0 k_1 E_e (1 + a_0^2 k^2)^4}\left\{\frac{\omega_0}{\omega_1} + \frac{\omega_1}{\omega_0} - 2 + 4(\mathbf{e}_0\mathbf{e}_1)^2 + \Delta\right\}, \tag{6}$$

где E_e — энергия электрона в конечном состоянии.

Отсюда получаем дифференциальное эффективное сечение Комптон-эффекта

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

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

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

где $r_0 = \dfrac{e_0^2}{mc^2}$ — 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 $\dfrac{\hbar}{a_0}$. 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:

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

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

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

и

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

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

Таблица 1

	Фотоэффект σ(*см*²)		Комптон-эффект	
	$\lambda_{хар}=1{,}537$ Å	$\lambda_{эфф}=0{,}385$ Å	σ_0 (*см*²)	σ' (*см*²)
LiF	$1{,}73 \cdot 10^{-26}$	$1{,}38 \cdot 10^{-28}$		$0{,}50 \cdot 10^{-25}$
NaCl	$0{,}58 \cdot 10^{-26}$	$0{,}46 \cdot 10^{-28}$		$0{,}35 \cdot 10^{-25}$
KCl	$0{,}42 \cdot 10^{-26}$	$0{,}33 \cdot 10^{-28}$	$0{,}67 \cdot 10^{-20}$	$0{,}28 \cdot 10^{-25}$
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.