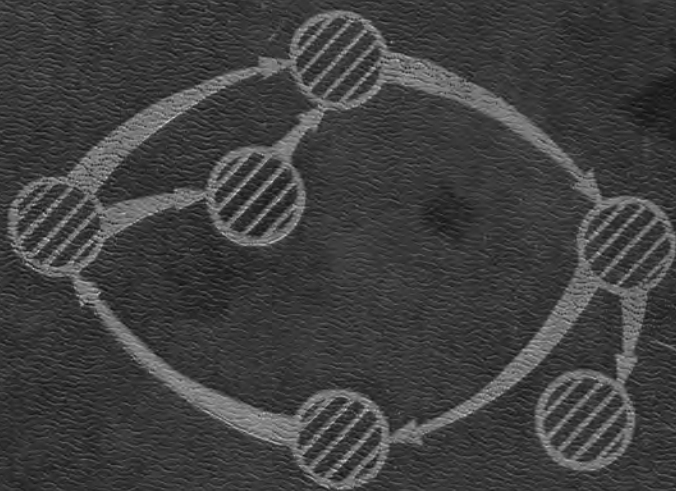




*В. В. Балашов*

# СТРОЕНИЕ ВЕЩЕСТВА



ИЗДАТЕЛЬСТВО  
МОСКОВСКОГО  
УНИВЕРСИТЕТА

В. В. Балашов

# СТРОЕНИЕ ВЕЩЕСТВА

Рекомендовано Комитетом по высшей школе  
Миннауки России в качестве учебного пособия для  
студентов высших учебных заведений, обучающихся  
по направлению и специальности «Физика»

ИЗДАТЕЛЬСТВО  
МОСКОВСКОГО  
УНИВЕРСИТЕТА

1993

Рецензенты:

кафедра теоретической ядерной физики Московского инженерно-физического института,  
доктор физико-математических наук, профессор Л. П. Пресняков

**Балашов В. В.**

Б20 Строение вещества: Учеб. пособие. — М.: Изд-во МГУ, 1993. — 216 с.: ил.

ISBN 5-211-01585-1.

В учебном пособии изложены современные представления о взаимодействии заряженных частиц, нейтронов и электромагнитного излучения с веществом. Показаны примеры конкретных результатов из экспериментальных и теоретических работ самого последнего времени, в том числе относящихся к каналированию заряженных частиц в кристаллах, эффекту Мёссбауэра, взаимодействию молекулярных ионов с поверхностью металла,  $\mu$ -катализу ядерного синтеза. Пособие планируется как первая часть единого курса, включающего в себя также вопросы применения методов теории столкновений в атомной и ядерной физике и проблему ядерного вещества.

Для студентов физических специальностей университетов.

Б 1604090000 (4309000000) —140 102—92  
077(02)—93

ББК 22.38

Учебное издание

Балашов Всеволод Вячеславович

**СТРОЕНИЕ ВЕЩЕСТВА**

Зав. редакцией Л. А. Николова. Редактор Т. В. Властовская. Художественный редактор Ю. М. Добрянская. Технический редактор Н. И. Смирнова. Корректоры И. А. Мушников, Е. Н. Павлова

ИБ № 4126

Сдано в набор 29.06.92. Подписано в печать 13.05.93. Формат 60×90<sup>1</sup>/<sub>16</sub>.  
Бумага тип. № 2. Гарнитура литературная. Высокая печать.  
Усл. печ. л. 13,5. Уч.-изд. л. 13,41. Тираж 900 экз. Заказ 2165. Изд. № 3704.

Ордена «Знак Почета» издательство Московского университета  
103009, Москва, ул. Герцена, 5/7

Серпуховская типография Упрполиграфиздата Мособлисполкома

ISBN 5-211-01585-1

© Издательство Московского университета, 1993

## ОГЛАВЛЕНИЕ

Предисловие .....	5
ВВЕДЕНИЕ: ЭЛЕМЕНТЫ СТРОЕНИЯ ВЕЩЕСТВА .....	7
А. Основные характеристики элементарных частиц .....	7
Б. Атомное ядро .....	21
В. Атомы и молекулы .....	32
<b>РАЗДЕЛ I. ПРОХОЖДЕНИЕ ЗАРЯЖЕННЫХ ЧАСТИЦ ЧЕРЕЗ ВЕЩЕСТВО</b> .....	46
<b>Лекция 1</b> .....	46
§ 1.1. Ионизационное торможение и многократное рассеяние быстрых тяжелых частиц в неупорядоченных средах; связь характеристик прохождения частиц через вещество с характеристиками элементарных процессов .....	46
§ 1.2. Классическая теория ионизационного торможения .....	53
<b>Лекция 2</b> .....	57
§ 2.1. Квантовая теория ионизационного торможения быстрых заряженных частиц .....	57
§ 2.2. Время замедления и пробеги частиц в веществе .....	65
§ 2.3. Вычисление среднего угла многократного рассеяния .....	67
§ 2.4. Стрэгглинг. Флуктуации ионизационных потерь .....	69
<b>Лекция 3</b> .....	71
§ 3.1. «Диэлектрическая теория» ионизационного торможения .....	71
§ 3.2. Применение «диэлектрической теории»: ионизационное торможение в разреженном газе .....	73
§ 3.3. Торможение заряженной частицы в вырожденном электронном газе .....	75
§ 3.4. Приближение локальной плотности .....	77
§ 3.5. Релятивистские эффекты; формула Бете — Блоха .....	78
<b>Лекция 4</b> .....	80
§ 4.1. Ионизационное торможение медленных частиц .....	80
§ 4.2. Композиционный закон Брэгга .....	82
§ 4.3. Тормозная способность вещества для частиц и античастиц. $Z^3$ -поправка к формуле Бете — Блоха .....	83
§ 4.4. Прохождение через вещество многозарядных ионов .....	87
§ 4.5. Прохождение через вещество электронов .....	91
<b>Лекция 5</b> .....	95
§ 5.1. Каналирование .....	95
§ 5.2. Эффект теней (блокировка) .....	102
<b>Лекция 6</b> .....	106
§ 6.1. Взаимодействие с веществом молекулярных ионов .....	106
§ 6.2. Применение метода компьютерного моделирования .....	117
<b>РАЗДЕЛ II. ЭЛЕКТРОМАГНИТНОЕ ИЗЛУЧЕНИЕ</b> .....	128
<b>Лекция 7</b> .....	128
§ 7.1. Прохождение $\gamma$ -излучения через вещество .....	128

§ 7.2. Взаимодействие $\gamma$ -квантов с ядрами атомов вещества. Эффект Мёссбауэра .....	132
<b>Лекция 8</b> .....	
§ 8.1. Вращение плоскости поляризации света как эффект несохранения четности в атомах .....	140
§ 8.2. Экспериментальное обнаружение несохранения четности в атомах .....	145
<b>Лекция 9</b> .....	
§ 9.1. Электромагнитное излучение при прохождении частиц через вещество; прямые процессы генерации .....	146
§ 9.2. Характеристическое излучение атомов среды при взаимодействии частиц с веществом .....	150
§ 9.3. Угловая анизотропия характеристического излучения. Явление выстраивания атомов среды .....	153
§ 9.4. Электромагнитное излучение при каналировании заряженных частиц .....	157
<b>РАЗДЕЛ III. ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ НЕЙТРОНОВ С ВЕЩЕСТВОМ</b> .....	163
<b>Лекция 10</b> .....	
§ 10.1. Элементарная теория замедления нейтронов .....	163
§ 10.2. Среднее время замедления нейтрона; длина замедления .....	168
<b>Лекция 11</b> .....	
§ 11.1. Движение нейтронов после термализации; коэффициент диффузии .....	173
§ 11.2. Уравнение диффузии; среднее время жизни нейтрона .....	178
§ 11.3. Типовые задачи теории диффузии тепловых нейтронов .....	179
<b>Лекция 12</b> .....	
§ 12.1. Дифракция нейтронов на кристалле .....	182
§ 12.2. Когерентное и некогерентное рассеяние нейтронов .....	186
§ 12.3. Влияние тепловых колебаний решетки; явление неупругой дифракции .....	188
§ 12.4. Рассеяние нейтронов поликристаллами .....	189
<b>РАЗДЕЛ IV. МЕЗОАТОМНЫЕ И МЕЗОМОЛЕКУЛЯРНЫЕ ПРОЦЕССЫ</b> .....	191
<b>Лекция 13</b> .....	
§ 13.1. Мезоатомы и их свойства .....	191
§ 13.2. Каскад электромагнитных переходов в мезоатомах. Влияние среды на мезоатомный каскад .....	195
§ 13.3. Пионные и мюонные методы в химических исследованиях .....	200
<b>Лекция 14</b> .....	
§ 14.1. Образование мезомолекул .....	204
§ 14.2. Мюонный катализ ядерного синтеза .....	208
<i>Рекомендуемая литература</i> .....	216

## ПРЕДИСЛОВИЕ

Предлагаемая читателю книга представляет собой первую часть задуманного автором учебного пособия под общим названием «Строение вещества». Вторая часть должна быть посвящена вопросам применения методов теории столкновений в атомной и ядерной физике, третья — проблеме строения ядерного вещества. В основу пособия положен годового курса лекций, читавшийся в течение ряда лет на отделении ядерной физики физического факультета Московского университета. Общая задача курса — служить «введением в специальность» для будущих экспериментаторов и теоретиков, которым предстоит работать над вопросами физики микромира. Пособие рассчитано на студентов VI—VII семестров, уже знакомых с основными понятиями атомной физики. Предполагается, что параллельно с этим курсом студенты изучают квантовую механику в объеме стандартной университетской программы.

Вопросы взаимодействия частиц и излучений с веществом, разбираемые в данной книге, чаще всего включаются в университетские программы как вопросы вспомогательные, необходимые для последующего изучения экспериментальных методов в атомной и ядерной физике и работы в практикумах. Однако за последние годы резко возросло самостоятельное значение исследований физических процессов, происходящих при взаимодействии заряженных частиц, электромагнитного излучения и нейтронов с веществом. Это заставило несколько отойти от традиционного изложения предмета, ослабить упор на преподнесение конечных результатов исследований, расчетных формул, таблиц и т. п. и, наоборот, максимально привлечь читателя к разбору физической сути исследуемых явлений. Опыт показывает, что такое изучение вопросов взаимодействия частиц и излучений с веществом является отличной школой для начинающего физика. Особая наглядность изучаемых здесь явлений, тесное взаимопроникновение представлений, относящихся к физике микро- и макромира, естественное переплетение используемых здесь методов классической и квантовой теории — все это способствует развитию у студента физической интуиции и широты взглядов, столь необходимых ему для будущей самостоятельной работы. Читатель найдет в книге интересные примеры конкретных результатов, взятые из экспери-

ментальных и теоретических работ самого последнего времени. Надо только оговориться, что подбор материала для иллюстраций сделан исключительно из соображений его наглядности, и ссылки на те или иные работы в подписях к рисункам не преследуют цели показать их место в становлении или развитии соответствующих направлений исследований.

В заключение — о названии курса. В него вложен не только прямой смысл. «Строение вещества» — именно так называлась вся система лекционных курсов, семинаров, практикумов по физике микромира, которую в 50-е гг. преподавали нам, студентам-ядерщикам МГУ, В. И. Векслер, Л. В. Грошев, И. М. Франк, Д. И. Блохинцев, Ю. М. Широков, В. А. Петухов. Я посвящаю эту книгу моим учителям.

Я благодарен своим коллегам — Н. Г. Гончаровой, Ф. А. Живописцеву, Н. М. Кабачнику, Н. П. Юдину и А. С. Ярову, которые вели семинарские занятия по этому курсу, за многочисленные обсуждения.

Автор

## ВВЕДЕНИЕ: ЭЛЕМЕНТЫ СТРОЕНИЯ ВЕЩЕСТВА

### А. Основные характеристики элементарных частиц

Крупнейшим достижением физики последних десятилетий явилось установление небольшого числа фундаментальных принципов, на основе которых создана исключительная по своей строгости и изяществу классификация элементарных частиц. Новые данные об элементарных частицах, в том числе касающиеся как свойств вновь открываемых, так и уточнения количественных характеристик уже известных частиц, регулярно публикуются в журналах. Мы приведем ниже часть таких данных из таблиц 1990 г. [Particle Data Group, «Review of Particle Properties»// Phys. Lett. 1990. Vol. B 239. P. 1—516].

Первую группу составляют калибровочные бозоны (gauge bosons) (табл. А.1). Сюда входят фотон  $\gamma$  и промежуточные бозо-

Таблица А.1

Свойства калибровочных бозонов ( $J=1$ )

Частица	Масса $m$ МэВ	Время жизни $\tau$ (ширина $\Gamma$ )	Каналы распада
$\gamma$	$< 3 \cdot 10^{-33}$	стабилен	
$W^\pm$	$80600 \pm 400$	$2,25 \pm 0,14$ ГэВ	$e\nu$ ( $\sim 10\%$ ) $\mu\nu$ ( $\sim 10\%$ ) $\tau\nu$ ( $\sim 10\%$ )
$Z$	$91161 \pm 31$	$2,534 \pm 0,02$ ГэВ	адроны ( $\sim 70\%$ ) $e^+e^-$ ( $\sim 3\%$ ) $\mu^+\mu^-$ ( $\sim 3\%$ ) $\tau^+\tau^-$ ( $\sim 3\%$ ) $\nu\bar{\nu}$ ( $\sim 19\%$ )

ны: заряженные  $W^\pm$  и нейтральный  $Z^0$ . Фотон служит переносчиком электромагнитного,  $W^-$  и  $Z$ -бозоны — слабого взаимодействия. Все они являются векторными частицами, так как их внутренний момент — единица, а внутренняя четность отрицательна ( $J^P=1^-$ ). Единая теория электромагнитного и слабого взаимодействия объединяет фотон и промежуточный бозон в одну груп-

пу. Есть между ними и существенное различие: фотон — безмассовая частица, тогда как  $W$ - и  $Z$ -бозоны — самые тяжелые из известных нам элементарных частиц. Здесь есть прямая связь с тем, что электромагнитное взаимодействие является дальнедействующим, тогда как слабое — предельно короткодействующим. В табл. А.1 приведены масса частиц и их среднее время жизни  $\tau$ . Согласно «соотношению неопределенностей» между временем жизни и энергией, эквивалентом среднего времени жизни системы может служить ширина разброса ее энергии (массы):

$$\Gamma = \frac{\hbar}{\tau}. \quad (\text{A.1})$$

В табл. А.1—А.4 значение  $\Gamma$  приводится вместо  $\tau$  в случаях, относящихся к быстро распадающимся частицам; для оценок удобно пользоваться соотношением (А.1) в форме  $\Gamma(\text{эВ}) \approx \approx 10^{-15}/\tau(\text{с})$ , где время жизни  $\tau$  выражается в секундах, а ширина  $\Gamma$  — в электрон-вольтах. В последнем столбце таблиц указываются основные каналы распада нестабильных частиц и относительный вес отдельных каналов, т. е. отношение вероятности распада по данному каналу к суммарной вероятности распада по всем возможным каналам. Так, из табл. А.1 мы видим, что заряженный  $W$ -бозон распадается, например, на позитрон (электрон) и нейтрино (антинейтрино), а нейтральный  $Z^0$ -бозон — на электрон-позитронную пару  $e^+e^-$  или пару  $\mu^+\mu^-$ .

Вторую группу элементарных частиц составляют лептоны (табл. А.2). Сюда входят электрон  $e$  и электронное нейтрино  $\nu_e$ , мюон  $\mu$  и мюонное нейтрино  $\nu_\mu$ ,  $\tau$ -лептон («тяжелый лептон») и

Таблица А.2

Свойства лептонов ( $J=1/2$ )

Частица	Масса $m$ , МэВ	Время жизни $\tau$ (ширина $\Gamma$ )	Каналы распада
$\nu_e$	$< 17 \text{ эВ}$	стабилен	
$\nu_\mu$	$< 0,27$	»	
$\nu_\tau$	$< 35$	»	
$e$	$0,51099906 \pm \pm 0,00000015$	»	
$\mu$	$105,658387 \pm \pm 0,000034$	$2,197 \cdot 10^{-6} \text{ с}$	$\mu^- \rightarrow e^- + \bar{\nu}_e + \nu_\mu$ ( $\sim 100\%$ )
$\tau$	$1784^{+2,7}_{-3,6}$	$3 \cdot 10^{-13} \text{ с}$	$\mu^- \bar{\nu}_\nu$ (18,5%) $e^- \bar{\nu}_\nu$ (16,5%) $\pi \nu$ (10,3%) $\rho \nu$ (22,1%) и др.

$\tau$ -нейтрино  $\nu_\tau$ . Каждой из этих частиц соответствует античастица:

$$\begin{aligned} e^- &\rightarrow e^+; & \nu_e &\rightarrow \bar{\nu}_e \\ \mu^- &\rightarrow \mu^+; & \nu_\mu &\rightarrow \bar{\nu}_\mu \\ \tau^- &\rightarrow \tau^+; & \nu_\tau &\rightarrow \bar{\nu}_\tau. \end{aligned} \quad (\text{A.2})$$

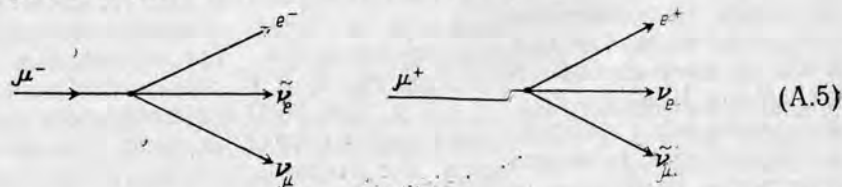
Собственный момент (спин) каждой из этих частиц равен  $1/2$ . Взаимные превращения и распад лептонов слабого взаимодействия, которые включают в себя законы сохранения энергии, импульса, электрического заряда и момента количества движения, а также сохранения лептонов квантового числа — лептонного заряда (точнее, сохранение в отдельности каждого из трех сортов лептонного заряда ( $L_e, L_\mu$  и  $L_\tau$ )):

$$L_e = \begin{cases} +1; e, \nu_e \\ -1; e^+, \bar{\nu}_e \end{cases}, \quad L_\mu = \begin{cases} +1; \mu^-, \nu_\mu \\ -1; \mu^+, \bar{\nu}_\mu \end{cases}, \quad L_\tau = \begin{cases} +1; \tau^-, \nu_\tau \\ -1; \tau^+, \bar{\nu}_\tau \end{cases}. \quad (\text{A.3})$$

Проиллюстрируем действие законов слабого взаимодействия на примере распада мюона. Например, канал  $\mu^- \rightarrow e^- + \nu_e$ , разрешенный с точки зрения сохранения электрического заряда, запрещен по спину; каналы  $\mu^- \rightarrow e^- + \nu_e + \nu_e$  или  $\mu^- \rightarrow e^- + \nu_e + \nu_\mu$  запрещены по электронному  $L_e$  и мюонному  $L_\mu$  лептонным зарядам. В результате для  $\mu^+$ - или  $\mu^-$ -мюона остается по одному-единственному каналу распада:

$$\begin{aligned} \mu^- &\rightarrow e^- + \bar{\nu}_e + \nu_\mu; \\ \mu^+ &\rightarrow e^+ + \nu_e + \bar{\nu}_\mu. \end{aligned} \quad (\text{A.4})$$

Эти распады удобно изображать диаграммами



которые соответствуют представлению о «точечном» (контактном) взаимодействии лептонов. Установление существования промежуточных бозонов позволило раскрыть четырехчастичную вершину слабого взаимодействия с точки зрения универсального для всех типов взаимодействия обменного механизма. Например, первой из диаграмм (А.5) теперь соответствует диаграмма с обменом  $W$ -бозоном (см. (А.6)).

Сформулированные выше законы сохранения должны соблюдаться в каждой из вершин этой диаграммы. В теории поля показывается, что масса частицы  $m$ , которой соответствует внутренняя линия диаграммы, определяет «радиус»



(A.6)

«взаимодействия», т. е. пространственные размеры области взаимодействия, ответственного за описываемый диаграммой процесс:

$$a = \frac{\hbar}{mc} \quad (\text{A.7})$$

Опять-таки для оценок удобно пользоваться этим соотношением в следующей форме:  $a$  (фм)  $\approx 200/m$  (МэВ), где масса частиц выражена в МэВ, а радиус взаимодействия — в ферми (1 фм =  $10^{-13}$  см). Поскольку масса промежуточного бозона составляет более 80 ГэВ, радиус слабого взаимодействия оказывается порядка  $10^{-15}$  см, т. е. значительно меньше, чем типичные «ядерные» размеры  $10^{-13}$  см. Отсюда видно, что в сравнении с процессами сильного взаимодействия процессы типа (A.6) выглядят «контактными» и их можно, в определенном смысле, изобразить диаграммами четырехчастичного взаимодействия (A.5).

Обратимся теперь к третьей, самой большой группе элементарных частиц — *адронам* (сильновзаимодействующим частицам). Набор квантовых чисел, характеризующих их свойства, включает ряд специфических характеристик. Это прежде всего изоспин  $I$  (в физике ядра он обозначается символом  $T$ ) — квантовое число, принимающее либо целые, либо полуцелые значения. При объединении двух и более адронов в единую систему их изоспины складываются между собой по правилам векторного сложения моментов количества движения. Так, суммарный изоспин  $I_{12}$  двух адронов с изоспинами  $I_1$  и  $I_2$  принимает значения из набора  $I_{12} = |I_1 - I_2|, \dots, I_1 + I_2$ . При  $I \neq 0$  определенному значению изоспина  $I$  соответствует целая группа адронов, называемая *изобарическим мультиплетом*. Их различают между собой дополнительным квантовым числом  $I_3$ , которое представляет собой проекцию изоспина на ось  $z$  в абстрактном (изобарическом) пространстве и при заданном  $I$  принимает дискретный набор значений

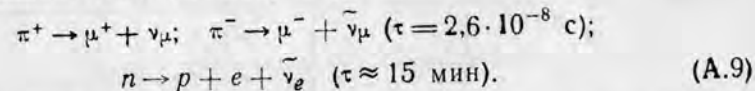
$$I_3 = -I, -I+1, \dots, I-1, I, \quad (\text{A.8})$$

полное число которых (мультиплетность) равно  $2I+1$ . Сильные взаимодействия обладают свойством изобарической инвариантности: это значит, что адроны, входящие в один изобарический мультиплет, ведут себя совершенно одинаково во всем, что касается сильных взаимодействий. Они, однако, имеют разные электрические заряды и, следовательно, по-разному ведут себя в электромагнитных взаимодействиях (что проявляется, в частности, в несовпадении масс адронов, входящих в один мультиплет).

Адроны с изоспином  $I=1$  образуют изобарический триплет (таковы, например, тройки мезонов  $\pi^+, \pi^0, \pi^-$ ;  $\rho^+, \rho^0, \rho^-$ , а также  $\Sigma$ -гиперонов  $\Sigma^+, \Sigma^0, \Sigma^-$ ; соответственно  $I_3 = +1, 0, -1$ ); адроны с изоспином  $I=1/2$  — изобарический дублет (например, пара нуклонов — протон  $p$  ( $I_3 = +1/2$ ) и нейтрон ( $I_3 = -1/2$ )). В приведенных ниже таблицах мы видим также и изобарические синглеты, когда  $I=0$  (например,  $\eta$ -мезон или  $\omega$ -мезон), и изобарические квадруплеты, когда  $I=3/2$  (таков, например, нуклонный резонанс  $\Delta$  (1232), являющийся низшим возбужденным состоянием нуклона; он встречается в четырех различных зарядовых состояниях:  $\Delta^{++}, \Delta^+, \Delta^0$  и  $\Delta^-$ ; соответственно  $I_3 = 3/2, 1/2, -1/2, -3/2$ ).

Другая специфическая характеристика адронов — *странность*. Соответствующее квантовое число  $S$  принимает целочисленные значения  $S=0; \pm 1; \dots$ . Обобщая понятие странности, мы приходим к понятиям *очарования* («чарм»,  $\text{charm}$ ; соответствующее квантовое число обозначается символом  $c$ ) и *красоты*, или *прелести* (*beauty*; квантовое число  $B$ ). Все эти квантовые числа сохраняются в процессах, за которые ответственно сильное взаимодействие адронов.

Указанные законы сохранения вместе с законами сохранения четности, электрического заряда и момента количества движения налагают строгие ограничения на характер взаимных превращений и распадов адронов, обусловленных сильным взаимодействием. Как правило, скорость таких процессов велика. Так, например, мезон  $\rho$  (770), являющийся легчайшим из векторных мезонов ( $J^P = 1^-$ ), имеет разброс массы более 100 МэВ (табл. A.3); это значит, что его среднее время жизни  $\tau$  меньше чем  $10^{-23}$  с. Адроны могут участвовать и в слабом взаимодействии. В частности, именно слабое взаимодействие отвечает за распады адронов с образованием лептонов. Например:



Скорость таких процессов на много порядков меньше, чем процессов, обусловленных сильным взаимодействием. В слабых взаимодействиях адронов четность не сохраняется; применительно к ним не действуют также законы сохранения изоспина, странности и других квантовых чисел, характерных только для адронов.

Рассмотрим данные, приведенные в табл. A.3. Обращает на себя внимание большее — более чем в сто раз — различие ширины  $\eta$ -мезона и следующего непосредственно за ним по массе  $\rho$ -мезона. Кроме того, в отличие от  $\rho$ -мезона  $\eta$ -мезон не распадается по каналу  $\eta \rightarrow 2\pi$ , хотя этот канал распада вполне разрешен по энергии. В чем причина такого запрета? Применим к интересующему нас каналу распада

$$\eta \rightarrow 2\pi(?) \quad (\text{A.10})$$

сформулированные выше законы сохранения в их совокупности.

## Свойства адронов

Частица	Изоспин, спин, четность	$m$ , МэВ	$\tau$ (Г)	Каналы распада
1	2	3	4	5
Нестранные мезоны ( $S=0$ )				
$\pi^\pm$	$1(0^-)$	139,57	$2,6 \cdot 10^{-8}$ с	$\mu\nu$ ( $\sim 100\%$ )
$\pi^0$	$1(0^-)$	134,97	$0,84 \cdot 10^{-16}$ с	$\gamma\gamma$ ( $\sim 98,8\%$ ) $\gamma e^+ e^-$ (1,2%)
$\eta$	$0(0^-)$	$548,8 \pm 0,6$	$1,19 \pm 0,12$ кэВ	$\gamma\gamma$ (39%) $3\pi^0$ (31,8%) $\pi^+ \pi^- \pi^0$ (23,7%) и др.
$\rho(770)$	$1(1^-)$	$768,3 \pm 0,5$	$149,1 \pm 2,9$ МэВ	$\pi\pi$ ( $\sim 100\%$ ) $\pi\gamma$ (0,05%)
$\omega(783)$	$0(1^-)$	$781,9 \pm 0,14$	$8,43 \pm 0,10$ МэВ	$\pi^+ \pi^- \pi^0$ (88,8%) $\pi^0 \gamma$ (8,5%)
Странные мезоны ( $S=\pm 1$ )				
$K^\pm$	$\frac{1}{2}(0^-)$	493,64	$1,237 \cdot 10^{-8}$	$\mu\nu$ (63,5%) $2\pi$ (21,2%) $3\pi$ (7,3%)
$K^0, \bar{K}^0$	$\frac{1}{2}(0^-)$	497,7	$0,8 \cdot 10^{-10}$ ( $K_s^0$ )	$2\pi$
			$5 \cdot 10^{-8}$ ( $K_L^0$ )	$3\pi$ (61%) $\pi\mu\nu$ (39%)
Нестранные барионы ( $S=0$ )				
$p$	$\frac{1}{2}\left(\frac{1}{2}^+\right)$	938,27	$> 10^{32}$ лет	
$n$	»	939,57	$\sim 15$ мин	$p\bar{e}\bar{\nu}_e$
$\Delta(1232)$	$\frac{3}{2}\left(\frac{3}{2}^+\right)$	1232 МэВ	$\sim 115$ МэВ	$N\pi$
$N(1440)$	$\frac{1}{2}\left(\frac{1}{2}^+\right)$	1440 МэВ	$\sim 200$ МэВ	$N\pi$ ( $\sim 55\%$ ) и др.

1	2	3	4	5
Странные барионы (гипероны) ( $S \neq 0$ )				
$\Lambda$	$0\left(\frac{1}{2}^+\right)$ $S=-1$	1115,6 МэВ	$2,6 \cdot 10^{-10}$	$p\pi^-$ (64,2%) $n\pi^0$ (35,8%)
$\Sigma^+$	$1\left(\frac{1}{2}^+\right)$ $S=-2$	1189,37	$0,8 \cdot 10^{-10}$	$N\pi$
$\Sigma^0$	»	1192,55	$7 \cdot 10^{-20}$	$\Lambda\gamma$
$\Sigma^-$	»	1197,43	$1,48 \cdot 10^{-10}$	$N\pi$
$\Xi^0$	$\frac{1}{2}\left(\frac{1}{2}^+\right)$ $S=-2$	1314,9	$2,90 \cdot 10^{-10}$	$\Lambda\pi$
$\Xi^-$	»	1321,32	$1,64 \cdot 10^{-10}$	$\Lambda\pi$
Адроны с очарованием ( $c$ ) и прелестью ( $B$ )				
$D^\pm$	$\frac{1}{2}(0^-)$ $c=\pm 1$	$1869,3 \pm 0,4$ МэВ	$1,06 \cdot 10^{-12}$	$K + \dots$ ( $\sim 70\%$ )
$\Lambda_c^+$	$0\left(\frac{1}{2}^+\right)$ $c=1$	$2285,2 \pm 1,2$ МэВ	$1,91 \cdot 10^{-13}$	$\Lambda(\Sigma) + \dots$ ( $\sim 50\%$ )
$B^\pm$	$\frac{1}{2}(0^-)$ $B=\pm 1$	$5277,6 \pm 1,4$ МэВ	$1,18 \cdot 10^{-12}$	$K + \dots$ ( $\sim 80\%$ )

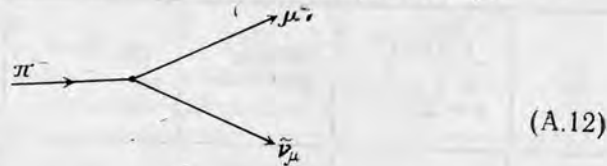


$\eta$ -Мезон представляет собой изосинглет ( $I=0$ );  $\pi$ -мезоны образуют изотриплет ( $I_\pi=1$ ). Согласно правилу векторного сложения моментов  $1+1=0, 1, 2$ , распад  $\eta(I=0) \rightarrow \pi(I=1) + \pi(I=1)$  (скажем,  $\eta \rightarrow \pi^+\pi^-$ ) по изоспину разрешен. Обратимся к закону сохранения четности. Внутренняя четность  $\eta$ -мезона отрицательна ( $P_\eta=-1$ ); то же имеет место и для внутренней четности пионов ( $P_\pi=-1$ ). В сильных взаимодействиях четность сохраняется. Это значит, что полная четность системы  $2\pi$  в конечном состоянии процесса (A.10) должна быть отрицательной. С другой стороны, она есть произведение внутренних четностей двух пионов на четность их относительного движения в системе  $2\pi$ , которая в свою очередь определяется величиной орбитального момента  $L$  этого относительного движения. Итак,

$$P_{2\pi} = P_\pi P_\pi (-1)^L = (-1)^L. \quad (\text{A.11})$$

Чтобы эта величина была отрицательной (и, следовательно, совпадала с внутренней четностью  $\eta$ -мезона  $P_\eta=-1$ ), орбитальный момент  $L$  системы двух пионов, образующихся в процессе (A.10), должен быть нечетным, т. е. ненулевым ( $L \neq 0$ ), а поскольку пион — бесспиновая частица ( $J^P=0^-$ ), то в этом процессе ненулевым должен быть и полный угловой момент системы  $2\pi$ . В то же время в начальном состоянии этого процесса полный угловой момент рассматриваемой системы равен нулю ( $\eta$ -мезон — тоже бесспиновая частица:  $J^P=0^-$ ). Таким образом, распад (A.10) оказывается строго запрещенным по совокупности законов сохранения момента количества движения и четности в сильных взаимодействиях. Можно показать, что в случае трехчастичного канала распада  $\eta \rightarrow 3\pi$  те же законы сохранения не приводят к запрету; однако в этом случае требуется гораздо более сложная перестройка внутренней структуры адрона, в результате чего распад  $\eta \rightarrow 3\pi$  и идет гораздо медленнее, чем, скажем, распад  $\rho \rightarrow 2\pi$ .

Приведем примеры диаграмм для процессов распада адронов. Распад заряженного пиона (слабое взаимодействие):



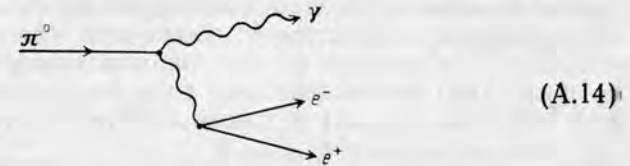
(A.12)

Распад нейтрального пиона (электромагнитное взаимодействие):



(A.13)

Канал  $\pi^0 \rightarrow 2\gamma$  является основным для распада  $\pi^0$ -мезона. В табл. А.3 мы находим также указание на канал  $\pi^0 \rightarrow \gamma e^+ e^-$ , доля которого в полной вероятности распада нейтрального пиона составляет около одного процента. Приведем соответствующую ему диаграмму:



(A.14)

Здесь внутренняя линия соответствует виртуальному фотону, а нижняя вершина — его превращению в электрон-позитронную пару. Отношение вероятностей распада по каналам (A.14) и (A.13) можно оценить, приняв во внимание, что амплитуда распада (A.14)  $A(\pi^0 \rightarrow \gamma e^+ e^-)$  содержит лишний по сравнению с амплитудой  $A(\pi^0 \rightarrow 2\gamma)$  множитель — константу электромагнитного взаимодействия  $e$  (заряд электрона):

$$A(\pi^0 \rightarrow \gamma e^+ e^-) \sim \frac{e}{\sqrt{\hbar c}} A(\pi^0 \rightarrow 2\gamma) \quad (\text{A.15})$$

(фактор  $1/\sqrt{\hbar c}$  делает выражение  $e/\sqrt{\hbar c}$  безразмерным). Отсюда для отношения вероятностей распада  $\pi^0$ -мезона по двум каналам получаем оценку

$$\frac{W(\pi^0 \rightarrow \gamma e^+ e^-)}{W(\pi^0 \rightarrow 2\gamma)} = \left| \frac{A(\pi^0 \rightarrow \gamma e^+ e^-)}{A(\pi^0 \rightarrow 2\gamma)} \right|^2 \sim \frac{e^2}{\hbar c} = \frac{1}{137}, \quad (\text{A.16})$$

которая, как видно из табл. А.3, качественно согласуется с экспериментальными данными.

В современной теории элементарных частиц лептоны и промежуточные бозоны трактуются как бесструктурные частицы, что касается адронов, то они состоят из кварков. Теория требует 6 типов кварков (табл. А.4). Все они имеют дробный заряд и в

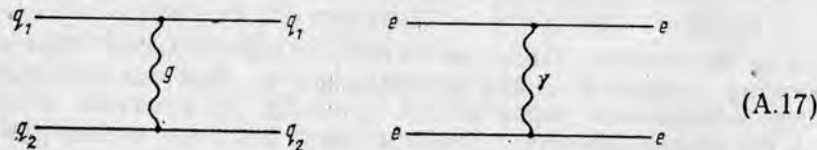
Таблица А.4

Характеристика кварков

Тип кварка (аромат)	Заряд	Масса	Изоспин	$S$	$C$	$b$	$t$
$u$	$2/3$	1 МэВ	$1/2$	0	0	0	0
$d$	$-1/3$	1 МэВ	$1/2$	0	0	0	0
$s$	$-1/3$	150 МэВ	0	-1	0	0	0
$c$	$2/3$	2 ГэВ	0	0	1	0	0
$b$	$-1/3$	5 ГэВ	0	0	0	-1	0
$t$	$2/3$	?	0	0	0	0	1

свободном виде, вероятно, существовать не могут. Как составляющие адронов обнаружены  $u$ -,  $d$ -,  $s$ -,  $c$ - и  $b$ -кварки; в настоящее время ведется интенсивный направленный поиск шестого, самого тяжелого,  $t$ -кварка.

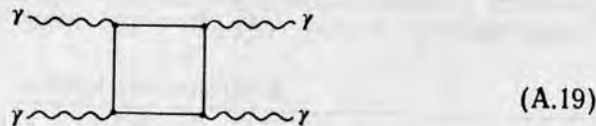
В количественном отношении кварковая теория элементарных частиц (*квантовая хромодинамика*, КХД) очень сложна. Это связано с особым характером обменного взаимодействия между кварками. На первый взгляд взаимодействие двух кварков  $q_1$  и  $q_2$  аналогично взаимодействию двух электрических зарядов (скажем, двух электронов) в квантовой электродинамике (КЭД):



Взаимодействие зарядов осуществляется благодаря обмену виртуальным фотоном, в квантовой хромодинамике эту роль выполняет глюон  $g$ . Однако глюоны, в отличие от фотонов, могут непосредственно взаимодействовать между собой: в КХД, например, возможна простейшая диаграмма



тогда как в КЭД взаимодействие фотонов между собой описывается лишь диаграммой 4-го порядка



(вероятность такого взаимодействия пропорциональна  $(\frac{e^2}{\hbar c})^4$  и, следовательно, очень мала).

Благодаря процессам типа (A.18) взаимодействие кварков между собой оказывается совершенно непохожим на все, что было известно в физике элементарных частиц в «докварковый» период. Здесь и усиление (а не ослабление, как обычно) взаимодействия двух частиц (кварков) между собой по мере их удаления друг от друга, и связанное с этим явление «удержания»

кварков внутри адронов, из-за которого мы не знаем их в свободном виде («конфайнмент», confinement). В развитии кварковой теории прослеживаются два направления: последовательные, строгие, но очень громоздкие (доступные только самым мощным ЭВМ) расчеты в рамках КХД и, с другой стороны, модели, позволяющие выявить, подчеркнуть какую-то определенную сторону кварковой структуры адронов. Между этими двумя направлениями существует тесная связь.

Таблица А.5

Кварковый состав некоторых барионов

Барион	Кварковый состав
$p$	$uud$
$n$	$udd$
$\Lambda$	$uds$
$\Delta^{++}$ (1232)	$uuu$
$\Xi^0$	$uss$

Таблица А.6

Кварковый состав некоторых мезонов

Мезон	Кварковый состав
$\pi^+$	$u\bar{d}$
$\pi^0$	$u\bar{u}, d\bar{d}$
$K^+$	$u\bar{s}$
$\eta$	$u\bar{u}, d\bar{d}, s\bar{s}$
$D^-$	$\bar{c}d$

В табл. А.5 и А.6 показан кварковый состав адронов. Барионы состоят из трех кварков  $qqq$ , мезоны — из кварка  $q$  и антикварка  $\bar{q}$  или, в некоторых случаях, из комбинаций пар  $(q\bar{q})$ . Обратим внимание на кварковую структуру  $\eta$ -мезона. В отличие от  $\pi$ -мезонов, в составе которых нет кварков или антикварков со странностью, и, с другой стороны, в отличие от  $K$ -мезонов, которые являются странными адронами ( $S = \pm 1$ ),  $\eta$ -мезон не является странным адроном, однако странный кварк  $s$  и антикварк  $\bar{s}$  входят в его состав (правильнее сказать,  $\eta$ -мезон проводит какую-то долю времени в виде системы  $s\bar{s}$ ). Мы говорим в таком случае об адроне со *скрытой странностью*. Аналогично понятие *скрытого очарования*; им обладают странные и нестранные тяжелые мезоны, в состав которых входит пара  $c\bar{c}$ .

В основе классификации элементарных частиц лежит теоретико-групповой подход. Три кварка  $u, d, s$  образуют базис фундаментального представления унитарной группы  $SU_3$ . Пользуясь общими правилами теории групп, можно группировать адроны с одинаковым барионным зарядом  $B$ , а также с одинаковым спином и четностью  $J^P$  (такие адроны имеют сходную, почти одинаковую пространственную внутреннюю структуру), но различающиеся электрическим зарядом, изоспином и странностью в определенные  $SU_3$ -мультиплеты: октеты [8], декуплеты [10] и т. д.; некоторые адроны не группируются с другими, а являются  $SU_3$ -синглетами [1]. На рис. А.1—А.3 приведены примеры барионных и мезонных октетов и декуплета с иллюстрацией кваркового состава входящих в этот мультиплет адронов. По осям абсцисс и орди-

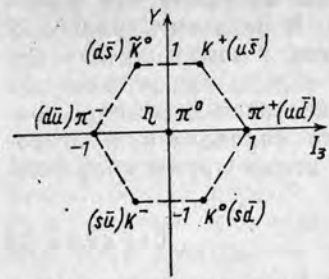


Рис. А.1. Октет псевдоскалярных мезонов ( $J^P=0^-$ )

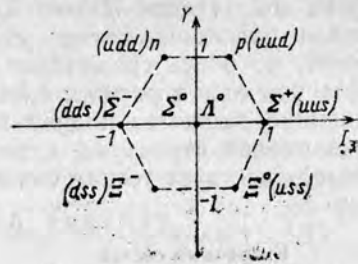


Рис. А.2. Октет барионов ( $J^P=1/2^+$ )

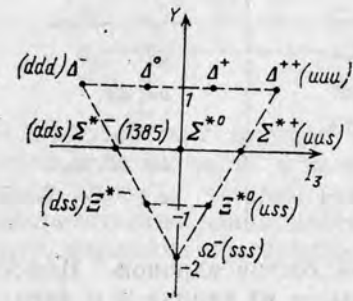
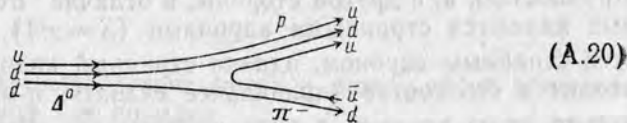


Рис. А.3. Декуплет барионов ( $J^P=3/2^+$ )

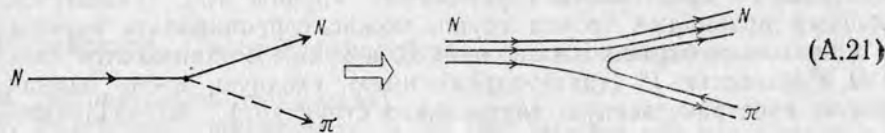
нат приведенных диаграмм отложены значения проекции изоспина  $I_3$  и гиперзаряда  $Y=B+S$  — квантового числа, величина которого определяется барионным зарядом частицы  $B$  и ее странностью  $S$ .

На языке кварков можно по-новому изобразить диаграммы различных процессов с участием адронов. Так, например, распад  $\Delta$ -изобары  $\Delta \rightarrow N + \pi$  трактуется как рождение пары кварк-антикварк с перегруппировкой кварков внутри бариона:



(A.20)

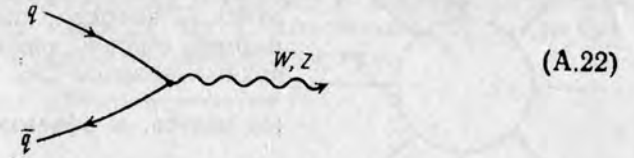
Аналогичным образом раскрывается структура вершин  $NN\pi$  в диаграммах сильного взаимодействия:



(A.21)

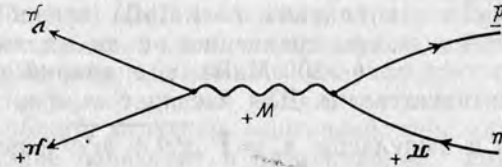
Что касается процессов слабого взаимодействия с участием адронов, то на кварковом языке диаграммы всех таких процессов можно изобразить единообразно с помощью элементарной диаграммы

раммы взаимодействия кварка (антикварка) с промежуточным бозоном:



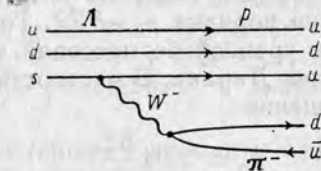
(A.22)

Такова, например, кварковая диаграмма, изображающая распад пиона  $\pi \rightarrow \mu + \nu_\mu$ :



(A.23)

Другой пример — распад  $\Lambda$ -гиперона  $\Lambda \rightarrow p + \pi^-$ :



(A.24)

Здесь нарушение странности происходит в вершине  $suW$ .

Переходя к вопросу о массе кварков, надо различать понятия массы «голого» кварка (соответствующие значения приведены в табл. А.4, именно эти значения входят в качестве «изначальной», «затравочной» массы кварка в последовательные КХД-расчеты) и массы кварков как составных частиц адронов («конституентных» кварков), когда в массу кварка включается и вся энергия глюонного поля, приходящаяся на один конституентный кварк. Исходя из массы нуклона ( $\sim 1$  ГэВ), масса конституентного  $u$ - или  $d$ -кварка составляет примерно 300 МэВ; масса конституентного  $s$ -кварка, если исходить из массы  $\Lambda$ -гиперона, примерно на 150 МэВ выше (такова же разность между «затравочными» массами  $m_s$  и  $m_{ud}$ ).

Одной из простейших, но очень полезной моделью адронов является модель кваркового мешка (рис. А.4). Согласно этой модели невылетание кварков из адронов («конфайнмент») обеспечивается особыми силами, которые действуют извне, со стороны «вакуума», на кварковый мешок, не давая ему беспредельно расширяться. Кварки внутри мешка полагаются свободными, они не взаимодействуют между собой. В своем простейшем варианте модель кваркового мешка содержит единственный (универ-

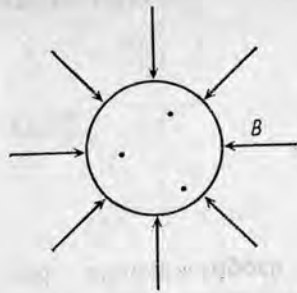


Рис. А.4. Модель кваркового мешка

сальный для всех адронных систем) параметр — давление  $B$  вакуума на мешок. Полная энергия адрона, состоящего из  $N$  кварков, складывается из суммарной полной энергии отдельных свободных кварков  $\Sigma \epsilon_q$ , «зажатых» в объеме мешка, и объемной энергии  $\frac{4\pi}{3} R^3 B$ ,

связанной с работой внешнего давления  $B$ , сжимающего мешок. Первое слагаемое убывает с ростом  $R$ . Возьмем для определенности нуклон. Масса  $u$ - и  $d$ -кварков ( $\sim 1$  МэВ) пренебрежимо мала по сравнению с их полной энергией ( $\sim 300$  МэВ), т. е. кварки в мешке являются ультрарелятивистскими. Для частиц с  $m_q \ll \epsilon_q$  соотношение

между энергией и импульсом  $\epsilon_q = \sqrt{p_q^2 c^2 + m_q^2 c^4}$  переходит в  $\epsilon_q = p_q c$ . С другой стороны, в силу соотношения неопределенностей для среднего значения импульса частицы внутри мешка радиуса  $R$  имеем  $p_q \approx \hbar/R$ . Отсюда получаем, что энергия кварка в мешке радиуса  $R$  есть величина порядка  $\epsilon_q \sim \hbar c/R$ . Точное выражение для спектра энергетических уровней безмассовой частицы в яме можно получить из уравнения Дирака. В частности, для низшего уровня справедливо соотношение

$$\epsilon_q = 2,04 \frac{\hbar c}{R}. \quad (\text{A.25})$$

Итак, кварки в своем свободном движении стремятся занять как можно больший объем, но давление вакуума на мешок препятствует их разлету. Равновесные размеры мешка  $R_0$  определяются условием

$$\frac{\partial E_{tot}}{\partial R} = 0, \quad (\text{A.26})$$

где

$$E_{tot}(R) \approx 2N \frac{\hbar c}{R} + \frac{4\pi}{3} R^3 B \quad (\text{A.27})$$

полная энергия (масса) адрона, содержащего  $N$  кварков (рис. А.5) Для нуклона ( $N=3$ ) отсюда имеем

$$m_N c^2 \approx \frac{8\hbar c}{R_0}; \quad R_0 \approx \left( \frac{3\hbar c}{2\pi B} \right)^{1/4}. \quad (\text{A.28})$$

Выбрав  $B \approx 20$  МэВ·фм<sup>-3</sup>, получаем  $m_N \approx 1$  ГэВ;  $R_0 \approx 1,6$  фм,

что неплохо соответствует истинным значениям средних размеров и массы нуклона.

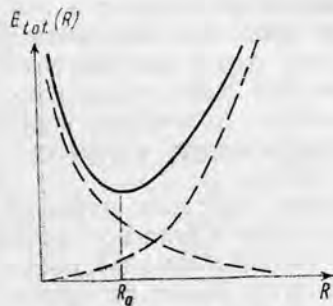


Рис. А.5. Соотношение кинетической энергии кварков и объемной энергии в кварковом мешке

## Б. Атомное ядро

Физику атомного ядра тесно связывает с физикой элементарных частиц проблема ядерных сил. Переносчиками сильного взаимодействия между нуклонами являются мезоны

$$\begin{array}{ccc} N & \longrightarrow & N \\ & | & \\ & \pi, \rho, \omega, \dots & \\ & | & \\ N & \longrightarrow & N \end{array} \quad (\text{Б.1})$$

Пион, легчайший из них, отвечает за притягивающую часть этого взаимодействия на больших (в ядерном масштабе) расстояниях  $\geq 1$  фм. По мере сближения нуклонов друг с другом все более существенным становится обмен другими, более тяжелыми мезонами и общий характер взаимодействия качественно меняется: притяжение переходит в отталкивание, которое на совсем малых расстояниях ( $\leq 0,4$  фм) приобретает вид сильной отталкивательной «сердцевины» (отталкивательного «кора»). Мезонная теория, опирающаяся на знание структуры элементарных частиц и квантовую теорию поля, является в настоящее время основным инструментом качественного и количественного описания ядерных сил. Интенсивно развивается и кварковый подход к этой проблеме.

Обратимся к простейшему варианту мезонной теории ядерных сил — классической мезодинамике. Статическое мезонное поле  $\phi(\mathbf{r})$ , создаваемое источниками, распределенными с плотностью  $\rho(\mathbf{r})$ , подчиняется уравнению

$$\left( \Delta - \left( \frac{mc}{\hbar} \right)^2 \right) \phi(\mathbf{r}) = -4\pi g \cdot \rho(\mathbf{r}), \quad (\text{Б.2})$$

где  $m$  — масса кванта рассматриваемого поля (мезона). Это уравнение является обобщением уравнения Пуассона в электродинамике  $\Delta \phi_e(\mathbf{r}) = -4\pi e \cdot \rho_e(\mathbf{r})$ ; вместо электрического заряда  $e$ , являющегося константой электромагнитного взаимодействия, в него входит константа сильного взаимодействия  $g$ . Более точный вид уравнения (Б.2) и, следовательно, свойства его решений зависят от трансформационных свойств поля  $\phi(\mathbf{r})$  по отношению к преобразованиям поворотов системы пространственных координат, инверсии (отражения) осей координат, поворотов в пространстве изоспина. В свою очередь эти трансформационные свойства мезонного поля определяются значениями спина, внутренней четности и изоспина мезона.

Пион — частица со спином  $J^P = 0^-$  и изоспином  $T=1$ . Соответствующее поле  $\phi_\pi$  является псевдоскалярным по отношению к преобразованиям в обычном пространстве и трехкомпонентным с точки зрения его изоспиновых свойств (изовекторным). Подставляя такую функцию  $\phi_\pi(\mathbf{r})$  в уравнение (Б.2), надо и в его правой

части поставить выражение, являющееся псевдоскаляром в обычном пространстве и вектором в пространстве изоспина. Сделаем это для нуклона, пренебрегая его внутренними размерами, т. е. рассматривая его как точечный источник пионного поля:

$$\left(\Delta - \left(\frac{m_\pi c}{\hbar}\right)^2\right) \varphi_\pi(\mathbf{r}) = -4\pi f \hat{\tau}(\sigma \nabla) \delta(\mathbf{r}), \quad (\text{Б.3})$$

здесь  $\sigma$  — вектор, составленный из спиновых матриц Паули  $\hat{\sigma}_x$ ,  $\hat{\sigma}_y$  и  $\hat{\sigma}_z$ , а  $\hat{\tau}$  — такой же вектор в пространстве изоспина;  $f$  — константа сильного взаимодействия. В случае, когда источник пионного поля есть частица со спином  $1/2$ , приведенное выражение — единственно возможное по своей структуре, удовлетворяющее предъявляемым ему трансформационным требованиям.

Уравнение типа (Б.2) удобно решать с помощью преобразования Фурье:

$$\varphi(\mathbf{r}) = \int \varphi_k e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} d^3k. \quad (\text{Б.4})$$

Пользуясь этим методом применительно к уравнению (Б.3), получаем для нашего пионного поля

$$\varphi_\pi(\mathbf{r}) = \frac{f}{m_\pi c / \hbar} \hat{\tau}(\sigma \nabla) \frac{1}{r} e^{-\frac{m_\pi c}{\hbar} r}. \quad (\text{Б.5})$$

Среднее расстояние  $r_0 = \frac{\hbar}{m_\pi c}$ , на которое простирается это поле, определяется массой пиона (см. общее выражение (А.7)). Энергия второго нуклона, помещенного в такое поле, дается выражением

$$V(\mathbf{r}) = f \hat{\tau}_1(\sigma_2 \nabla) \varphi_\pi^{(1)}(\mathbf{r}), \quad (\text{Б.6})$$

где индекс (1) показывает, что операторы  $\hat{\tau}$  и  $\sigma$ , входящие в  $\varphi_\pi^{(1)}(\mathbf{r})$ , соответствуют первому нуклону:  $\hat{\tau} \rightarrow \hat{\tau}_1$ ;  $\sigma \rightarrow \sigma_1$ ; константа взаимодействия  $f$  — та же, что в уравнении (Б.7) (опять-таки можно убедиться в том, что выражение (Б.6) — единственное по своей структуре, позволяющее построить из псевдоскалярной функции  $\varphi_\pi(\mathbf{r})$  и нуклонных операторов  $\hat{\tau}$  и  $\sigma$  инвариант относительно всех указанных выше преобразований системы координат). Подставив (Б.5) в (Б.6), окончательно для энергии взаимодействия двух нуклонов получаем

$$\hat{V}(r_{12}) = \frac{1}{3} \frac{f^2}{\hbar c} m_\pi c^2 (\hat{\tau}_1 \cdot \hat{\tau}_2) \left[ \sigma_1 \sigma_2 + \left(1 + \frac{3}{\mu r} + \frac{3}{(\mu r)^2}\right) \hat{S}_{12} \right] \frac{e^{-\mu r}}{\mu r}, \quad (\text{Б.7})$$

где для краткости мы ввели обозначение  $\mu = m_\pi c / \hbar$ . Здесь  $\hat{S}_{12}$  — оператор тензорного взаимодействия двух нуклонов:

$$\hat{S}_{12} = \frac{3(\sigma_1 \mathbf{r})(\sigma_2 \mathbf{r})}{r^3} - (\sigma_1 \sigma_2). \quad (\text{Б.8})$$

Собственные значения спиновых операторов  $(\sigma_1 \sigma_2)$  и  $\hat{S}_{12}$  выражаются через значения суммарного спина двух нуклонов  $S = 1/2(\sigma_1 + \sigma_2)$  и (в случае оператора  $\hat{S}_{12}$ ) его проекции  $S_z = (\mathbf{S} \mathbf{r}) / r$  на направление вектора  $\mathbf{r} = \mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1$ , идущего от одного из этих нуклонов к другому:

$$\begin{aligned} \langle \sigma_1 \sigma_2 \rangle_{SS_z} &= 2S(S+1) - 3, \\ \langle \hat{S}_{12} \rangle_{SS_z} &= 6S_z^2 - 2S(S+1). \end{aligned} \quad (\text{Б.9})$$

Аналогично этому среднее значение скалярного произведения  $(\hat{\tau}_1 \cdot \hat{\tau}_2)$  выражается через суммарный изоспин  $T$  рассматриваемой пары нуклонов:

$$\langle \hat{\tau}_1 \cdot \hat{\tau}_2 \rangle_{TT_z} = 2T(T+1) - 3. \quad (\text{Б.10})$$

При низких энергиях особенно важную роль играет взаимодействие в  $s$ -состоянии. Согласно принципу Паули при этом пара нуклонов может находиться в одном из двух спин-изоспиновых состояний:  $|S=0, T=1\rangle$  и  $|S=1, T=0\rangle$ . В первом из них потенциал (Б.7) представляет потенциал притяжения Юкавы

$$V(r_{12}) \Big|_{S=0, T=1} = -\frac{f^2}{\hbar c} m_\pi c^2 \frac{e^{-\mu r}}{\mu r}. \quad (\text{Б.11})$$

В состояниях с  $S=1$  действует дополнительное притяжение за счет тензорных сил. Таким образом, обмен псевдоскалярным изовекторным мезоном (пионом) не только объясняет сам факт сильного взаимодействия между нуклонами, но и приводит к характерной спиновой зависимости ядерных сил. Амплитуда потенциала взаимодействия определяется величиной константы связи  $f$  пиона с нуклоном. Согласно данным о пион-нуклонном рассеянии, ее значение можно найти из соотношения

$$\frac{f^2}{\hbar c} \approx 0,08. \quad (\text{Б.12})$$

Этот безразмерный параметр теории сильного взаимодействия значительно больше по величине, чем соответствующий параметр  $\frac{e^2}{\hbar c} = \frac{1}{137}$  в теории электромагнитных взаимодействий. Все же он меньше единицы. Поэтому обмен несколькими пионами в потенциале взаимодействия нуклонами (на расстояниях  $r \geq 1,5-2$  фм)

$$\begin{array}{c} \longrightarrow \\ \longrightarrow \end{array} \begin{array}{c} | \\ \pi \\ | \end{array} + \begin{array}{c} \longrightarrow \\ \longrightarrow \end{array} \begin{array}{c} | \\ \pi \\ | \\ | \\ \pi \\ | \end{array} + \dots \quad (\text{Б.13})$$

составляет эффект высшего порядка и не меняет качественно свойств этого взаимодействия, обусловленных однопионным обменом.

Идея доминирующего вклада одномезонного обмена лежит в основе так называемого ОВЕР-подхода в теории ядерных сил (one-boson-exchange-potential — потенциал однобозонного обмена). Построенные в рамках такого подхода потенциалы относятся к разряду полупеноменологических: их форма диктуется общими правилами построения диаграмм типа (Б.1), что же касается выбора оптимального числа мезонов, участвующих в обмене, численных значений констант связи, параметров отталкивания на малых расстояниях и т. п., то здесь главное слово — за подгонкой под экспериментальные данные. Общий вид потенциала  $NN$ -взаимодействия показан схематически на рис. Б.1.

Основные особенности нуклон-нуклонного взаимодействия отчетливо проявляются в свойствах простейшего ядра — дейтрона. У дейтрона существует единственное связанное состояние с квантовыми числами  $J^\pi = 1^+$ ,  $T=0$  (энергия связи  $\epsilon_D = 2,23$  МэВ). Это состояние, триплетное по спину ( $S=1$ ), не является чистым по орбитальному моменту пары  $L$ : тензорное взаимодействие между протоном и нейтроном примешивает к основной,  $S$ -компоненте волновой функции дейтрона небольшую долю  $D$ -волны:

$$\psi_d = \sqrt{1 - |\alpha_D|^2} |np; {}^3S_1\rangle + \alpha_D |np; {}^3D_1\rangle. \quad (\text{Б.14})$$

Примесь  $D$ -волны обуславливает наличие у дейтрона электрического квадрупольного момента ( $Q_d = 2,7 \cdot 10^{-27}$  см<sup>2</sup>) — верный

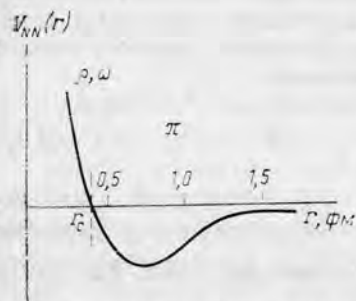


Рис. Б.1. Схематическое изображение потенциала  $NN$ -взаимодействия (символы в верхней части рисунка показывают области доминирующего вклада однопионного обмена и обмена векторными  $\rho$ - и  $\omega$ -мезонами;  $r_c$  — радиус отталкивательной сердцевины)

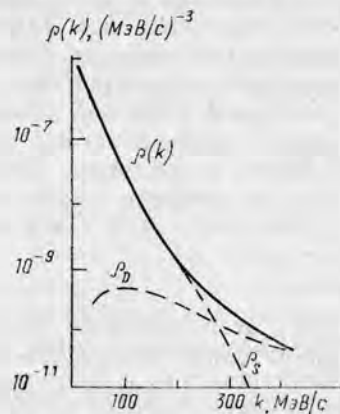


Рис. Б.2. Импульсное распределение нуклонов в дейтроне  $\rho(k) = \rho_S(k) + \rho_D(k)$  и вклады в него  $S$ -волны и  $D$ -волны

признак отклонения от сферической симметрии в структуре ядра; сказывается примесь  $D$ -волны и на величине магнитного момента дейтрона. По разным оценкам вес  $D$ -волны в дейтроне составляет 5—8%. Несмотря на, казалось бы, небольшую величину, эта примесь играет очень важную роль во многих процессах с участием дейтрона (рис. Б.2).

Взаимодействие между протоном и нейтроном в синглетном состоянии ( $S=0$ ) не является достаточно сильным для существования соответствующего связанного состояния дейтрона. Вместе с тем не существует связанного состояния и в системах нейтрон — нейтрон и протон — протон, которые вместе с системой нейтрон — протон при  $S=0$  образуют изотопический триплет ( $T=1$ ). Имеющиеся данные относительно параметров рассеяния в системах  $np$ ,  $nn$  и  $pp$  позволяют судить о точности, с которой осуществляется зарядовая независимость ядерных сил. Ниже приведены значения длин рассеяния  $a_{NN}$  и эффективных радиусов  $r_{NN}$  (все — в единицах  $10^{-13}$  см) для этих систем. Для состояния  ${}^1S_0$

$$a_{np} = -23,75; a_{nn} = -18,45; a_{pp} = -17,9;$$

$$r_{np} = 2,75; r_{nn} = 2,83; r_{pp} = 2,82$$

(значения  $a_{pp}$  и  $r_{pp}$  даны за вычетом эффектов электромагнитного взаимодействия между протонами), для состояния  ${}^3S_1$

$$a_{np} = 5,424 \pm 0,004;$$

$$r_{np} = 1,76 \pm 0,005.$$

Перейдем к вопросам структуры сложных ядер. Объяснить особенности этой структуры, отправляясь от свойств ядерных сил, выразить все характеристики ядер через параметры  $NN$ -взаимодействия — так формулировалась главнейшая цель протон-нейтронной теории атомного ядра с самого момента ее возникновения в 30-х гг. Сейчас такая постановка вопроса представляется сильно упрощенной. Во-первых, даже если считать, что мы знаем  $NN$ -взаимодействие достаточно хорошо, современная квантовая теория многих тел не в состоянии рассчитать на этой основе даже простейшие характеристики сложных ядер (помимо дейтрона лишь трехчастичные ядра  ${}^3\text{H}$  и  ${}^3\text{He}$  допускают такой последовательный подход). С другой стороны, современные исследования по физике ядра все ярвственнее подчеркивают существенные отличия  $NN$ -взаимодействия в ядерном веществе от взаимодействия двух свободных нуклонов. Поэтому в сегодняшней ядерной физике по-прежнему, как и на ранних этапах ее развития, большую роль играют модели ядер.

Неспециалиста всегда поражает огромное количество этих моделей, некоторые из которых, на беглый взгляд, чуть ли не противоречат друг другу: капельная модель, модель вращающегося эллипсоида, модель оболочек, кластерная, сверхтекучая, оптическая модель и т. д. В действительности между ними вовсе нет про-

тиворечия, каждая из них позволяет подойти к рассмотрению ядер со своей стороны.

В оптической модели рассеяние протона или нейтрона ядром описывается с помощью комплексного оптического потенциала

$$V_{opt}(r) = U_0(r) + iW_0(r) + [U_{sl}(r) + iW_{sl}(r)](\sigma l), \quad (Б.15)$$

мнимая часть которого соответствует поглощению нуклона в ядерном веществе. Благодаря спин-орбитальному взаимодействию величина оптического потенциала зависит от того, как складываются спин и орбитальный момент нуклона в полный момент

$$\langle \sigma l \rangle_j = \begin{cases} -(l+1); & j = l + 1/2; \\ l & j = l - 1/2. \end{cases} \quad (Б.16)$$

Радиальная зависимость вещественной части центрального потенциала  $U_0(r)$  обычно задается распределением Вудса — Саксона

$$U_0(r) = -V_0 \frac{1}{1 + \exp \frac{r-R}{a}}, \quad (Б.17)$$

где  $R = r_0 A^{1/3}$  — радиус ядра,  $a$  — толщина его поверхностного слоя, в котором происходит наиболее резкое изменение потенциала (рис. Б.3). Мнимая часть потенциала существенно меняет свою форму в зависимости от энергии налетающего нуклона: при малых энергиях поглощение происходит в основном вблизи поверхности ядра, с ростом энергии нуклона оно приобретает все более явно выраженный объемный характер (рис. Б.4).

Вещественная часть оптического потенциала (Б.15) неплохо аппроксимирует потенциал среднего поля, которое «чувствует» не только налетающий на ядро нуклон, но и каждый из нуклонов, находящихся внутри ядра. Приближение среднего поля лежит в основе целого ряда моделей, используемых для описания структуры ядер. Простейшая из них — одночастичная оболочечная мо-

дель, в ней полностью пренебрегается всеми корреляциями (остаточными парными взаимодействиями) между нуклонами ядра. Главное достижение этой модели — объяснение «магических» чисел  $Z, N = 2, 8, 20, (28), 50, 82, 126$ , соответствующих наиболее устойчивым ядрам, в которых происходит заполнение протонных и нейтронных оболочек (рис. Б.5). Долгое время представление об оболочечной структуре ядер опиралось хотя и на разнообразные, но косвенные экспериментальные факты. Решающие прямые аргументы получены в конце 50-х гг., когда были выполнены первые эксперименты по квазиупругому выбиванию протонов из ядер быстрыми протонами в реакции  $(p, 2p)$ . Метод совпадений, используемый при изучении реакций  $(p, 2p)$ ,  $(p, np)$ ,  $(e, e'p)$ , позволил не только непосредственно «видеть», из какой оболочки ядра выбит тот или иной нуклон, но и почувствовать его волновую функцию на той или иной оболочке в ядре, найти форму его импульсного распределения внутри ядра (рис. Б.6). Вместе с тем в реакциях квазиупругого выбивания отчетливо проявляются эффекты остаточных взаимодействий между нуклонами в ядре. При квазиупругом выбивании нуклона из какой-то оболочки образующаяся «дырка», взаимодействуя со своим нуклонным окружением, «разбрасыва-

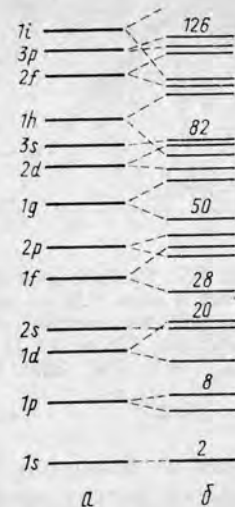


Рис. Б.5. Схема одночастичных уровней нуклонов в ядрах: а — без учета, б — с учетом спин-орбитального расщепления

эффекты остаточных взаимодействий между нуклонами в ядре. При квазиупругом выбивании нуклона из какой-то оболочки образующаяся «дырка», взаимодействуя со своим нуклонным окружением, «разбрасыва-

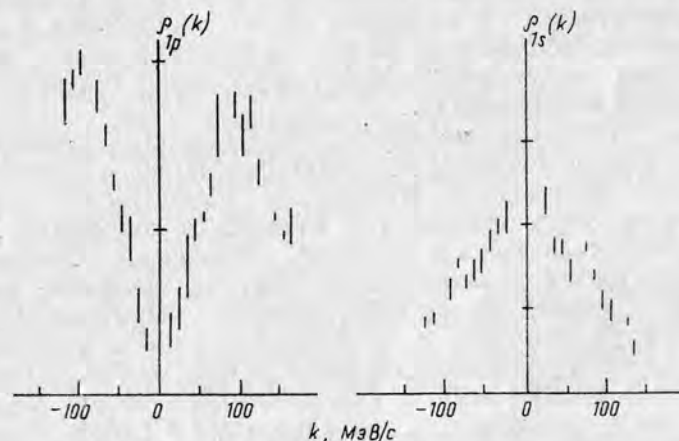


Рис. Б.6. Импульсное распределение протонов на оболочках  $1p$  и  $1s$  в ядре  $^{12}\text{C}$  — результаты измерений квазиупругого выбивания протонов электронами по методу  $(e, e'p)$  [по: Mougey J. et al. // Nucl. Phys. 1976. Vol. A262. P. 61]

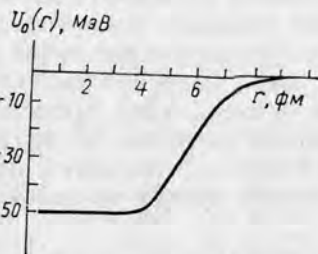


Рис. Б.3. Распределение Вудса—Саксона (Б.17) для вещественной части оптического потенциала взаимодействия нуклонов с ядром ( $A=100$ )

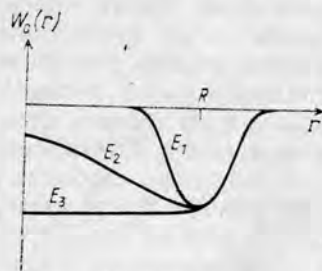


Рис. Б.4. Форма мнимой части  $W_0(r)$  оптического потенциала в зависимости от энергии нуклона:  $E_1 < E_2 < E_3$

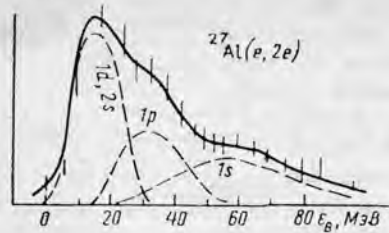


Рис. Б.7. Разброс дырочных возбуждений в ядре  $^{27}\text{Al}$  — результаты измерений по методу  $(\alpha, e^+e^-)$  [по Nakamura K. et al. // Nucl. Phys. 1976. Vol. A271. P. 221]

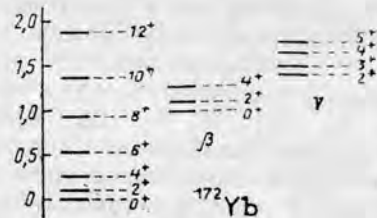


Рис. Б.8. Основная ротационная,  $\beta$ -вибрационная и  $\gamma$ -вибрационная полосы уровней ядра  $^{172}\text{Yb}$  (пунктир — результаты расчетов в рамках IBM-модели) [по: Джолос Р. В. и др. // ЯФ. 1975]

ется» по большому числу состояний дочернего ядра, причем этот разброс может приближаться к величине порядка расстояния между самими оболочками (рис. Б.7).

Учет остаточного взаимодействия между нуклонами совершенно необходим при объяснении спектра возбужденных состояний ядер. Такие расчеты проводятся, например, в различных вариантах многочастичной оболочечной модели. Одночастичные волновые функции нуклонов, вид которых определяется характером среднего поля, выполняют в таких расчетах роль базиса для построения многочастичных волновых функций ядра. При должном выборе остаточного взаимодействия (так, чтобы в него входили и силы спаривания, и дальнедействующие корреляции между нуклонами) такой подход позволяет приучить на единой основе возбужденные состояния различной природы — и одночастичные и коллективные. В последнем случае построенная в рамках многочастичной оболочечной модели волновая функция возбужденного ядра представляет собой суперпозицию большого числа элементарных возбуждений.

На рис. Б.8 приведена схема энергетических уровней ядра  $^{172}\text{Yb}$ . Пунктиром показаны результаты расчетов в рамках так называемой IBM-модели (Interacting Boson Model — модель взаимодействующих бозонов). Не вдаваясь в подробности, отметим ее «микроскопический» характер; исходными для описания ядерных состояний являются одночастичные волновые функции отдельных нуклонов, на их базе строятся «элементарные» возбуждения ядра (бозоны), не являющиеся, однако, независимыми друг от друга, а взаимодействующие между собой. Предположения о деформации ядра, о нарушении сферической симметрии среднего поля изначально не закладываются в расчет. И несмотря на это конечные результаты расчета четко обнаруживают наличие большой статической и динамической деформации ядра. Прежде всего — это ярко выраженная ротационная полоса уровней  $2^+$ ,  $4^+$ , ...,  $12^+$ , построенная на основном состоянии  $0^+$ ; поло-

жение ее уровней соответствует закону вращения сильно деформированного ядра

$$E_J = \frac{\hbar^2}{2I} J(J+1), \quad (\text{Б.18})$$

где  $I$  — ядерный момент инерции. Кроме того, расчеты позволяют выделить в спектре возбуждения рассматриваемого ядра вибрационные полосы уровней. Одна из них ( $0^+$ ,  $2^+$ ,  $4^+$ ) соответствует так называемым  $\beta$ -колебаниям а другая ( $2^+$ ,  $3^+$ ,  $4^+$ ) —  $\gamma$ -колебаниям сфероидального ядра. В первом случае ядро сохраняет форму эллипсоида вращения, во втором аксиальная симметрия ядра нарушается (рис. Б.9). Зная волновые функции ядерных состояний, можно рассчитать вероятности электромагнитных переходов между ними. И расчет, и экспериментальные данные показывают, что переходы между уровнями одной полосы особенно сильны — в этом проявляется коллективный характер соответствующих возбуждений ядра.

В рассматриваемом нами примере вращательная полоса относительно невелика; как видно из рис. Б.8, она оканчивается уровнем  $12^+$ . Более поздние эксперименты дают примеры очень длинных вращательных полос, когда вращательный момент ядра в высоко возбужденных состояниях может превышать несколько десятков единиц. Изучение ядерных состояний с большим моментом составляет в настоящее время одно из развивающихся направлений физики ядра.

Оценивая в целом достижения и общие возможности «микроскопического» (т. е. отрывающегося от нуклонных степеней свободы) описания свойств ядра, сформулируем главное: современные «микроскопические» модели успешно справляются с трактовкой на единой основе разного рода коллективных и одночастичных ядерных возбуждений; на ранних этапах развития теории ядра для их объяснения использовались и строились разные модели (для колебательных возбуждений модель жидкой капли, для вращательных — модель симметричного или асимметричного эллипсоида и т. д.). Сказанное в полной мере относится и к особому классу коллективных возбуждений в ядрах — гигантским резонансам (рис. Б.10).

Свойства ядер выражаются в их спектроскопических характеристиках, таких, как энергия возбуждения спина и четность ядерных состояний, вероятности  $\beta$ - и  $\gamma$ -переходов, вероятность распада с испусканием  $\alpha$ -частиц, других легких фрагментов (а

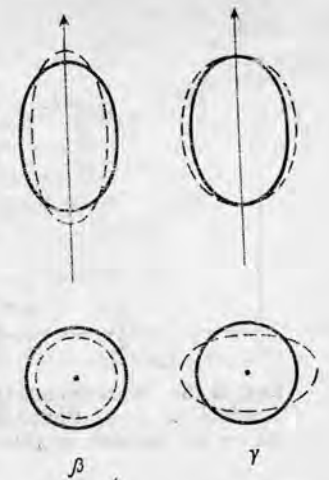


Рис. Б.9. Характер  $\beta$ - и  $\gamma$ -колебаний сфероидального ядра. В обоих случаях сверху показана проекция формы ядра на плоскость, параллельную оси симметрии, внизу — на плоскость, перпендикулярную оси симметрии ядра



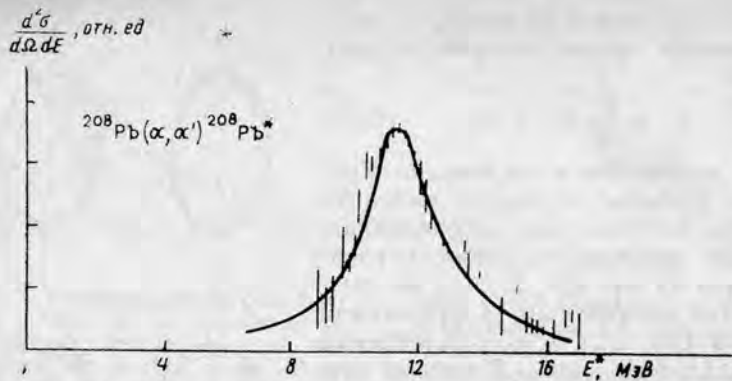


Рис. Б.10. Мультипольный гигантский резонанс в ядре  $^{208}\text{Pb}$  [по Speth J. et al. // Phys. Rep. 1977. Vol. 33 С. Р. 127]; гистограмма — по данным из реакции  $(\alpha, \alpha')$ ; сплошная линия — теоретический расчет

в последние годы — и сложных «кластеров»), соотношения ветвей распада, параметры деления и др. «Визитной карточкой» каждого отдельного ядра может служить схема его уровней с указанием на ней соответствующих спектроскопических характеристик. Такого рода информация с учетом поступающих из эксперимента и теоретических работ новых данных регулярно публикуется в научной литературе. Рассмотрим в качестве примера схему уровней ядра  $^{10}\text{B}$ , показанную на рис. Б.11. Цифры справа ( $3^+, 0; 1^+, 0; 0^+, 1$  и т. д.) — это значения спина, четности и изоспина состояния  $J^\pi, T$ ; слева (0,718; 1,740 и т. д.) — энергия возбуждения в МэВ. Состояние ядра тем более выгодно энергетически, чем меньше его изоспин, — это общее правило для всех ядер. В рассматриваемом ядре «щель» между низшим состоянием с  $T=0$  (основным состоянием ядра) и низшим состоянием с  $T=1$  невелика — всего около полутора МэВ; это связано с тем, что ядро  $^{10}\text{B}$  является одним из редких стабильных нечетно-четных ядер: свойства низших уровней таких ядер определяются в основном парным взаимодействием между нечетным протоном и нечетным нейтроном (как и в дейтроне, *np*-взаимодействие в сложном ядре сильнее при  $T=0$ , чем при  $T=1$ ), и в свойствах этих уровней слабо отражается динамика взаимодействия между нуклонами, входящими в четно-четный «остов» ядра. В четно-четных ядрах картина другая; например, в ядрах  $^{12}\text{C}, ^{24}\text{Mg}, ^{40}\text{Ca}$  энергия возбуждения низшего уровня с  $T=1$  составляет соответственно 12,00; 9,515 и 7,66 МэВ.

На рис. Б.11 указаны пороги расщепления ядра по различным каналам: 4,460 МэВ — для канала  $^{10}\text{B} \rightarrow ^6\text{Li} + \alpha$ , 6,026 МэВ — для канала  $^{10}\text{B} \rightarrow ^8\text{Be} + d$ , 6,585 МэВ — для канала  $^{10}\text{B} \rightarrow ^9\text{Be} + p$  и т. д. (заметим, что протонный и нейтронный каналы не являются энергетически самыми выгодными). Справа и слева от схе-

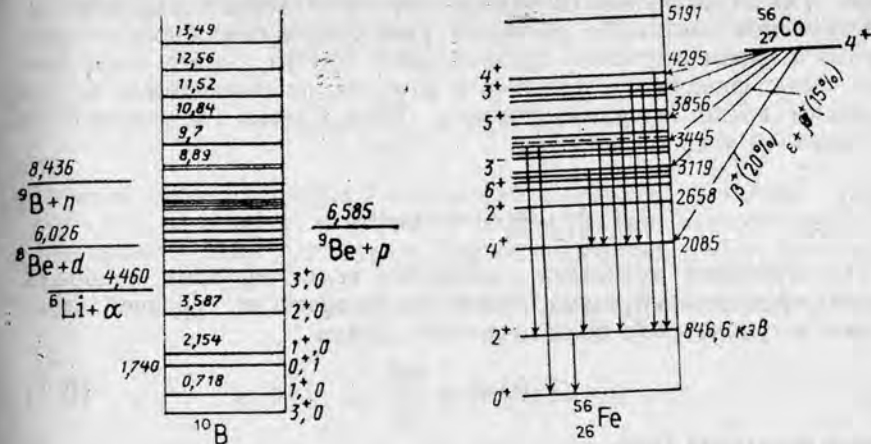


Рис. Б.11. Схема уровней ядра  $^{10}\text{B}$

Рис. Б.12. Схема уровней ядра  $^{56}\text{Fe}$

мы уровней иногда, кроме того, приводятся данные о сечениях реакций, в которых это ядро образуется как промежуточная компонента-система; резонансы в сечениях дают информацию об энергетическом положении и квантовых числах уровней рассматриваемого ядра. Например, резонансы в реакции  $^6\text{Li} + \alpha \rightarrow ^{10}\text{B} + \gamma$  соответствуют уровням ядра  $^{10}\text{B}$  с  $T=0$ , в реакции  $^7\text{Li} + ^3\text{He} \rightarrow ^{10}\text{B} + \gamma$  — с  $T=0$  и  $T=1$ .

$^{10}\text{B}$  — легкое ядро. На рис. Б.12 приведена схема уровней среднетяжелого ядра  $^{56}\text{Fe}$ , дающая представление о характере имеющейся спектроскопической информации относительно таких ядер. В тяжелых ядрах расстояния между уровнями еще больше сокращаются, плотность уровней растет и даже число дискретных уровней, которые лежат ниже порога отщепления нуклона, оказывается огромным. Здесь не обойтись без статистического подхода с его специфическими понятиями ядерной температуры, корреляции между различными свойствами уровней, без понятия испарения как механизма распада ядра.

Мы обсудили некоторые свойства ядра с традиционной точки зрения — как системы, состоящей из протонов и нейтронов. Современные исследования по физике ядра идут гораздо дальше — к единой картине нуклонных и субнуклонных степеней свободы ядер. Большой экспериментальный материал накоплен по свойствам «экзотических» ядер. Среди них — гиперядра, в состав которых наряду с протонами и нейтронами входит  $\Lambda$ - или  $\Sigma$ -гиперон, и  $\Delta$ -ядра, один из нуклонов которых находится в возбужденном состоянии  $\Delta$  (1232). Такие «экзотические» системы представляют огромный интерес как для изучения барион-барионного взаимодействия (в частности, тех его аспектов, которые вообще недоступны изучению, если ограничиваться обычными ядрами),

так и для исследования фундаментальных свойств ядерного вещества. Так,  $\Lambda$ -гиперон в гиперядре, хотя и является сильно взаимодействующей частицей, обладает уникальной способностью проникать в самые глубокие слои ядерного остова, в его центральную часть, физические условия в которой, по имеющимся теоретическим представлениям, должны быть близки к условиям в бесконечной ядерной материи.

### В. Атомы и молекулы

Простейшими атомными системами являются атом водорода и водородоподобные ионы. Спектр энергетических уровней электронов в кулоновском поле точечного заряда

$$V_c(r) = -\frac{Ze^2}{r} \quad (\text{B.1})$$

дается формулой Бора

$$E_n = -\frac{e_0 Z^2}{2n^2}; \quad n = 1, 2, \dots \quad (\text{B.2})$$

где

$$e_0 = \frac{m_e e^4}{\hbar^2} = 27,21 \text{ эВ} \quad (\text{B.3})$$

атомная единица энергии. Спектр уровней (B.2) изображен на рис. В.1. Каждому уровню  $E_n$  соответствует  $n^2$  состояний  $|nlm\rangle$  («квантовых орбит» электрона) с волновыми функциями

$$\begin{aligned} \psi_{nlm}(r, \vartheta, \varphi) &= R_{nl}(r) Y_{lm}(\vartheta, \varphi); \\ l &= 0, 1, \dots, n-1; \\ m &= -l, \dots, l. \end{aligned} \quad (\text{B.4})$$

Приведем явный вид нормированных радиальных волновых функций низших состояний атома водорода и водородоподобных ионов:

$$\begin{aligned} R_{1s}(r) &= \left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2} 2e^{-\frac{Z}{a_0}r}; \\ R_{2s}(r) &= \left(\frac{Z}{2a_0}\right)^{3/2} \times \\ &\times \left(2 - \frac{Z}{a_0}r\right) e^{-\frac{Z}{2a_0}r}; \end{aligned} \quad (\text{B.5})$$

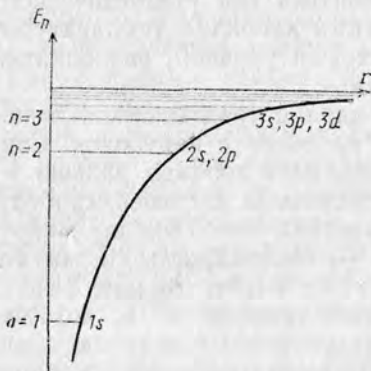


Рис. В.1. Схема уровней атома водорода и водородоподобных ионов

$$R_{1p}(r) = \left(\frac{Z}{2a_0}\right)^{3/2} \frac{Zr}{\sqrt{3}a_0} e^{-\frac{Z}{2a_0}r},$$

где

$$a_0 = \frac{\hbar^2}{m_e e^2} = 0,53 \cdot 10^{-8} \text{ см} \quad (\text{B.6})$$

атомная единица длины («боровский радиус»). Полезны также формулы для средних значений ряда величин, характеризующих пространственные размеры и форму квантовых орбит электрона:

$$\langle r \rangle_{nl} = \frac{a_0}{2Z} [3n^2 - l(l+1)];$$

$$\langle r^2 \rangle_{nl} = \frac{a_0^2 n^2}{2Z^2} [5n^2 + 1 - 3l(l+1)]; \quad (\text{B.7})$$

$$\langle (r-\bar{r})^2 \rangle = \frac{1}{4} \left(\frac{a_0}{Z}\right)^2 [n^2(n^2+2) - l^2(l+1)^2].$$

Последняя формула, в частности, показывает, что при данном  $n$  отклонение радиуса орбит от его среднего значения минимально, если  $l$  максимально, т. е. при  $l=n-1$ , такие орбиты называются «круговыми».

Приведем соотношения, связывающие атомные единицы  $e_0$  и  $a_0$  с другими физическими постоянными:

$$e_0 = \frac{e^4}{a_0}, \quad (\text{B.8})$$

$$e_0 = m_e c^2 \left(\frac{e^2}{\hbar c}\right)^2 = \alpha^2 \cdot m_e c^2, \quad (\text{B.9})$$

где  $\alpha = e^2/\hbar c = \frac{1}{137}$  — постоянная такой структуры:

$$a_0 = \frac{\hbar}{m_e c} \cdot \frac{\hbar c}{e^2} = \frac{\lambda_e}{\alpha}, \quad (\text{B.10})$$

где  $\lambda_e = \frac{\hbar}{m_e c} = 3,85 \cdot 10^{-11} \text{ см}$  — комptonовская длина волны электрона;

$$v_B = \frac{e^2}{\hbar} = \alpha c = 2,19 \cdot 10^8 \text{ см/с} \quad (\text{B.11})$$

боровская скорость электрона.

Как видно из соотношений (B.2) — (B.7), состояния электрона в водородоподобных ионах повторяют во всех своих характеристиках состояния электрона в атоме водорода. Меняются лишь масштабы измерения соответствующих физических величин: энер-

гетический масштаб «растягивается» пропорционально  $Z^2$ , масштаб линейных размеров «сжимается» по закону  $1/Z$ . Правда, так происходит при относительно небольших  $Z$ , когда можно считать, что кулоновский потенциал (В.1) исчерпывает все взаимодействие электрона с ядром. В действительности чем больше  $Z$ , тем сильнее проявляет себя спин-орбитальное взаимодействие

$$\hat{V}_{st} = \frac{\hbar^2}{2m_e^2 c^2} \frac{1}{r} \frac{\partial V_c}{\partial r}(sl), \quad (B.12)$$

приводящее к «тонкой структуре», т. е. к расщеплению энергетических уровней электрона по полному моменту количества движения  $j = l \pm 1/2$ :

$$\Delta E_{nlj} = -\frac{\alpha^2 Z^4}{2n^3} e_0 \left( \frac{1}{j+1/2} - \frac{3}{4n} \right). \quad (B.13)$$

Зависимость спин-орбитального расщепления от  $Z$  иная (более сильная), чем для расстояния между уровнями с разными  $n$ ; поэтому при больших  $Z$  подобие спектров уровней в водородоподобных ионах спектру атома водорода заметно нарушается. На рис. В.2 показана тонкая структура уровня  $n=2$  атома водорода. Расстояние между компонентами дублета приведено здесь в обратных сантиметрах. Для пересчета в обычные единицы удобны формулы

$$1 \text{ см}^{-1} \rightarrow 1,24 \cdot 10^{-4} \text{ эВ}, \quad (B.14)$$

$$1 \text{ эВ} \rightarrow 8,065 \cdot 10^8 \text{ см}^{-1}.$$

Потенциал спин-орбитального взаимодействия электрона (В.12) «содержится» в релятивистском волновом уравнении (уравнении Дирака) для электрона, движущегося в центрально-симметричном кулоновском поле ядра  $V(r)$ , и с точки зрения нерелятивистской квантовой теории (уравнения Шредингера) представляет собой релятивистскую поправку к потенциалу (В.1). Еще более тонкие эффекты позволяют учесть квантовая электродинамика. Ее огромным успехом было объяснение лэмбовского сдвига (рис. В.2). В водородоподобных ионах с большим  $Z$  оказывается существенным сдвиг уровней за счет конечных результатов ядра, т. е. за счет отклонения на малых расстояниях потенциала взаимодействия электрона с ядром от кулоновского зако-

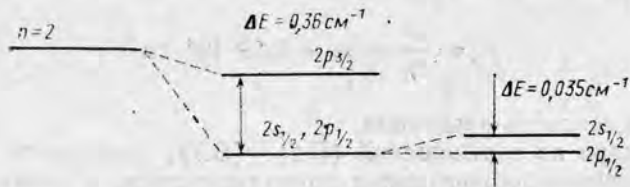


Рис. В.2. Тонкая структура уровня  $n=2$  и лэмбовский сдвиг уровня  $2s_{1/2}$  атома водорода

Таблица В.1

Периодическая система элементов Д. И. Менделеева; для каждого элемента приведены: атомный номер  $Z$ , конфигурация валентной оболочки и потенциал ионизации (в эВ) [Раутиг А. А., Смирнов Б. М. Параметры атомов и атомных ионов. М.: Энергоатомиздат, 1986]

1	1 H 1s 13,59	2	2 He 1s <sup>2</sup> 24,59	3	3 Li 2s 5,39	4	4 Be 2s <sup>2</sup> 9,32	5	5 B 2s <sup>2</sup> 2p 8,30	6	6 C 2s <sup>2</sup> 2p <sup>2</sup> 11,26	7	7 N 2s <sup>2</sup> 2p <sup>3</sup> 14,53	8	8 O 2s <sup>2</sup> 2p <sup>4</sup> 13,62	9	9 F 2s <sup>2</sup> 2p <sup>5</sup> 17,42	10	10 Ne 2s <sup>2</sup> 2p <sup>6</sup> 21,56	11	11 Na 3s 5,14	12	12 Mg 3s <sup>2</sup> 7,65	13	13 Al 3s <sup>2</sup> 3p 5,99	14	14 Si 3s <sup>2</sup> 3p <sup>2</sup> 8,15	15	15 P 3s <sup>2</sup> 3p <sup>3</sup> 10,49	16	16 S 3s <sup>2</sup> 3p <sup>4</sup> 10,36	17	17 Cl 3s <sup>2</sup> 3p <sup>5</sup> 12,97	18	18 Ar 3s <sup>2</sup> 3p <sup>6</sup> 15,76	19	19 K 4s 4,34	20	20 Ca 4s <sup>2</sup> 6,11	21	21 Sc 3d 4s 6,56	22	22 Ti 3d <sup>2</sup> 4s 6,82	23	23 V 3d <sup>3</sup> 4s 6,74	24	24 Cr 3d <sup>5</sup> 4s 6,77	25	25 Mn 3d <sup>5</sup> 4s 7,43	26	26 Fe 3d <sup>6</sup> 4s 7,90	27	27 Co 3d <sup>7</sup> 4s 7,86	28	28 Ni 3d <sup>8</sup> 4s 7,63	29	29 Cu 3d <sup>10</sup> 4s 7,72	30	30 Zn 3d <sup>10</sup> 4s 9,39	31	31 Ga 4s <sup>2</sup> 4p 6,00	32	32 Ge 4s <sup>2</sup> 4p <sup>2</sup> 7,90	33	33 As 4s <sup>2</sup> 4p <sup>3</sup> 9,79	34	34 Se 4s <sup>2</sup> 4p <sup>4</sup> 9,75	35	35 Br 4s <sup>2</sup> 4p <sup>5</sup> 11,81	36	36 Kr 4s <sup>2</sup> 4p <sup>6</sup> 14,00	37	37 Rb 5s 4,19	38	38 Sr 5s <sup>2</sup> 5,69	39	39 Y 4d 5s 6,22	40	40 Zr 4d <sup>2</sup> 5s 6,84	41	41 Nb 4d <sup>4</sup> 5s 6,88	42	42 Mo 4d <sup>5</sup> 5s 7,10	43	43 Tc 4d <sup>5</sup> 5s 7,28	44	44 Ru 4d <sup>7</sup> 5s 7,37	45	45 Rh 4d <sup>8</sup> 5s 7,47	46	46 Pd 4d <sup>10</sup> 8,34	47	47 Ag 4d <sup>10</sup> 5s 7,57	48	48 Cd 4d <sup>10</sup> 5s 8,99	49	49 In 5s <sup>2</sup> 5p 5,79	50	50 Sn 5s <sup>2</sup> 5p <sup>2</sup> 7,34	51	51 Sb 5s <sup>2</sup> 5p <sup>3</sup> 8,61	52	52 Te 5s <sup>2</sup> 5p <sup>4</sup> 9,01	53	53 I 5s <sup>2</sup> 5p <sup>5</sup> 10,45	54	54 Xe 5s <sup>2</sup> 5p <sup>6</sup> 12,13	55	55 Cs 6s 3,89	56	56 Ba 6s <sup>2</sup> 5,21	57-71	57-71 Lanthanides	72	72 Hf 5d <sup>2</sup> 6s 6,80	73	73 Ta 5d <sup>3</sup> 6s 7,89	74	74 W 5d <sup>4</sup> 6s 7,98	75	75 Re 5d <sup>5</sup> 6s 7,88	76	76 Os 5d <sup>6</sup> 6s 8,73	77	77 Ir 5d <sup>7</sup> 6s 9,05	78	78 Pt 5d <sup>9</sup> 6s 8,96	79	79 Au 5d <sup>10</sup> 6s 9,23	80	80 Hg 5d <sup>10</sup> 6s 10,44	81	81 Tl 6s <sup>2</sup> 6p 6,11	82	82 Pb 6s <sup>2</sup> 6p <sup>2</sup> 7,42	83	83 Bi 6s <sup>2</sup> 6p <sup>3</sup> 7,29	84	84 Po 6s <sup>2</sup> 6p <sup>4</sup> 8,42	85	85 At 6s <sup>2</sup> 6p <sup>5</sup> 9,0	86	86 Rn 6s <sup>2</sup> 6p <sup>6</sup> 10,75	87	87 Fr 7s 4,0	88	88 Ra 7s <sup>2</sup> 5,28	89-103	89-103 Actinides	90	90 Th 6d <sup>2</sup> 7s <sup>2</sup> 6,1	91	91 Pa 5f <sup>2</sup> 6d <sup>1</sup> 7s <sup>2</sup> 6,0	92	92 U 5f <sup>3</sup> 6d <sup>1</sup> 7s <sup>2</sup> 6,19	93	93 Np 5f <sup>4</sup> 6d <sup>1</sup> 7s <sup>2</sup> 6,27	94	94 Pu 5f <sup>6</sup> 7s <sup>2</sup> 6,06	95	95 Am 5f <sup>7</sup> 7s <sup>2</sup> 6,0	96	96 Cm 5f <sup>7</sup> 6d <sup>1</sup> 7s <sup>2</sup> 6,02	97	97 Bk 5f <sup>9</sup> 7s <sup>2</sup> 6,23	98	98 Cf 5f <sup>10</sup> 7s <sup>2</sup> 6,30	99	99 Es 5f <sup>11</sup> 7s <sup>2</sup> 6,42	100	100 Fm 5f <sup>14</sup> 7s <sup>2</sup> 6,5	101	101 Md 5f <sup>13</sup> 7s <sup>2</sup> 6,6	102	102 No 5f <sup>14</sup> 7s <sup>2</sup> 6,6	103	103 Lr 5f <sup>14</sup> 6d <sup>1</sup> 7s <sup>2</sup> 6,6
---	--------------------	---	----------------------------------	---	--------------------	---	---------------------------------	---	-----------------------------------	---	-------------------------------------------------	---	-------------------------------------------------	---	-------------------------------------------------	---	-------------------------------------------------	----	---------------------------------------------------	----	---------------------	----	----------------------------------	----	-------------------------------------	----	--------------------------------------------------	----	--------------------------------------------------	----	--------------------------------------------------	----	---------------------------------------------------	----	---------------------------------------------------	----	--------------------	----	----------------------------------	----	------------------------	----	-------------------------------------	----	------------------------------------	----	-------------------------------------	----	-------------------------------------	----	-------------------------------------	----	-------------------------------------	----	-------------------------------------	----	--------------------------------------	----	--------------------------------------	----	-------------------------------------	----	--------------------------------------------------	----	--------------------------------------------------	----	--------------------------------------------------	----	---------------------------------------------------	----	---------------------------------------------------	----	---------------------	----	----------------------------------	----	-----------------------	----	-------------------------------------	----	-------------------------------------	----	-------------------------------------	----	-------------------------------------	----	-------------------------------------	----	-------------------------------------	----	-----------------------------------	----	--------------------------------------	----	--------------------------------------	----	-------------------------------------	----	--------------------------------------------------	----	--------------------------------------------------	----	--------------------------------------------------	----	--------------------------------------------------	----	---------------------------------------------------	----	---------------------	----	----------------------------------	-------	-------------------	----	-------------------------------------	----	-------------------------------------	----	------------------------------------	----	-------------------------------------	----	-------------------------------------	----	-------------------------------------	----	-------------------------------------	----	--------------------------------------	----	---------------------------------------	----	-------------------------------------	----	--------------------------------------------------	----	--------------------------------------------------	----	--------------------------------------------------	----	-------------------------------------------------	----	---------------------------------------------------	----	--------------------	----	----------------------------------	--------	------------------	----	-------------------------------------------------	----	-----------------------------------------------------------------	----	-----------------------------------------------------------------	----	------------------------------------------------------------------	----	--------------------------------------------------	----	-------------------------------------------------	----	------------------------------------------------------------------	----	--------------------------------------------------	----	---------------------------------------------------	----	---------------------------------------------------	-----	---------------------------------------------------	-----	---------------------------------------------------	-----	---------------------------------------------------	-----	-------------------------------------------------------------------

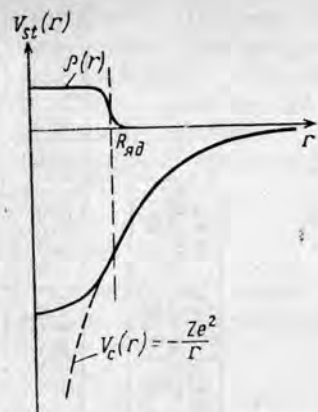


Рис. В.3. Электростатический потенциал взаимодействия электрона с ядром  $V_{st}(r)$  с учетом конечных размеров ядра ( $\rho(r)$  — плотность распределения заряда в ядре)

на (рис. В.3). Названные выше отклонения от боровской картины атома оказываются гораздо существеннее в так называемых «экзотических» атомах, где в роли атомного электрона выступают отрицательные мюон, пион, каон ( $\mu^-$ ,  $\pi^-$ ,  $K^-$ ) или антипротон  $\bar{p}$  — вообще, отрицательно заряженная тяжелая частица. Это связано с тем, что размеры экзотического атома уменьшены (обратно пропорционально массе такой частицы  $m_x$ ) в сравнении с размерами обычного атома.

Перейдем к описанию многоэлектронных атомов. Их оболочечную структуру отражает таблица Менделеева. Здесь мы приводим ее в расширенном виде — с указанием конфигурации валентной оболочки и потенциала ионизации атома. В дальнейшем нам придется пользоваться различными наборами символов, которые используются для обозначения электронных подоболочек атомов; в табл. В.2 объясняется смысл символов одного такого набора. На рис. В.4 показан ход энергии связи электронов на внутренних оболочках нейтральных атомов с изменением атомного номера  $Z$ . Как видно из сопоставления двух нижних (сплошной и пунктирной) линий, экранировка кулоновского поля ядра атомными электронами сильна даже для самой глубокой,  $K$ -оболочки. Конечно, эффект экранировки еще сильнее для внешних электронов. В табл. В.3 приведены значения эффективного заряда  $Z_{эфф}$ , который чувствует со стороны ионного остова валентный  $ns$ -электрон в атомах щелочных металлов. Как видим, значения  $Z_{эфф}$  значительно меньше, чем заряд ядра  $Z$ , хотя с другой стороны, и весьма далеки от единицы, чего можно было бы

Таблица В.2

Символы электронных оболочек атомов

Главное квантовое число, $n$	Орбитальный и полный угловой моменты электрона, $l_j$						
	$s_{1/2}$	$p_{1/2}$	$p_{3/2}$	$d_{3/2}$	$d_{5/2}$	$f_{5/2}$	$f_{7/2}$
1	$K$						
2	$L_I$	$L_{II}$	$L_{III}$				
3	$M_I$	$M_{II}$	$M_{III}$	$M_{IV}$	$M_V$		
4	$N_I$	$N_{II}$	$N_{III}$	$N_{IV}$	$N_V$	$N_{VI}$	$N_{VII}$
5	$O_I$	$O_{II}$	$O_{III}$	$O_{VI}$	$O_V$	$O_{VI}$	$O_{VII}$

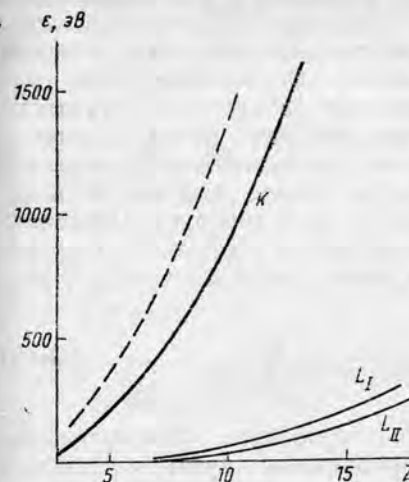


Рис. В.4. Энергия связи электронов внутренних оболочек  $K$ ,  $L_I$ ,  $L_{II}$ , в зависимости от атомного номера  $Z$ . Пунктирная линия — энергия связи неэкранированного  $K$ -электрона (формула (В.2))

Таблица В.3

Эффективный заряд валентного  $ns$ -электрона в атомах

Атом	${}_3\text{Li}$	$_{11}\text{Na}$	$_{19}\text{K}$	$_{37}\text{Rb}$	$_{55}\text{Cs}$
$Z_{эфф}$	1,26	1,84	2,26	2,77	3,21

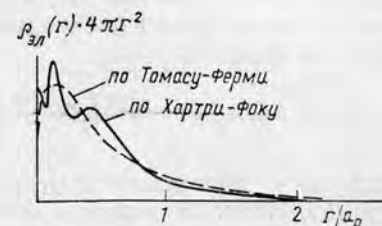


Рис. В.5. Распределение радиальной электронной плотности  $\rho_{эл}(r) \cdot 4\pi r^2$  в атоме аргона

ожидать в случае предельно сильной экранировки. Такая предельно сильная экранировка наблюдается лишь у очень высоко возбужденных, так называемых *гидберговских уровней* валентного электрона (исследованный диапазон главных квантовых чисел ридберговских состояний доходит сейчас до  $n=100$  и выше).

Методы теоретического описания структуры многоэлектронных атомов и ионов разнообразны. Широко используются вариационный метод, разные варианты метода Хартри—Фока, метод Томаса—Ферми.

*Метод Хартри—Фока* наиболее универсален. Он последовательно учитывает оболочечную структуру атома, хорошо передает индивидуальные особенности различных атомов, успешно применяется не только для нахождения параметров атомов в основном состоянии, но и для расчетов спектров уровней и вероятностей переходов между ними. Реализация этого метода требует численного решения систем связанных интегродифференциальных уравнений, и это обстоятельство длительное время ограничивало возможность его практического использования. Сейчас положение в этом отношении существенно изменилось: метод Хартри—Фока входит во многие библиотеки стандартных программ для ЭВМ и широко используется в различных атомных расчетах как теоретиками, так и экспериментаторами. На рис. В.5 показано для примера распределение электронной плотности  $\rho_{эл}(r)$  в атоме аргона, рассчитанное по методу Хартри—Фока; хорошо вид-

ны осцилляции плотности, связанные с вкладами отдельных электронных оболочек.

На том же рисунке приведена электронная плотность в атоме аргона, рассчитанная по методу Томаса — Ферми. Это более грубый метод. Даваемое им распределение электронной плотности лишь приблизительно следует за тем, что дает метод Хартри — Фока: не видны оболочечные эффекты, неправильно описывается ход плотности в периферийной области атома. Однако большое достоинство метода Томаса — Ферми — его простота. Основанный на статистическом подходе, этот метод позволяет получить единую формулу для распределения электронной плотности в различных атомах:

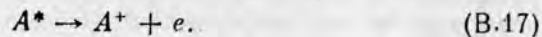
$$\rho_{эл}(r) = Z^2 f\left(\frac{r}{0,885 a_0 Z^{-1/3}}\right). \quad (B.15)$$

Здесь  $a_0$  — боровский радиус,  $f(x)$  — некоторая универсальная функция, которая найдена и затабулирована путем численного решения уравнения Томаса — Ферми. Как видно из (B.15), распределение электронной плотности в различных атомах, по Томасу — Ферми, подобны, а линейный масштаб распределения «сжимается» с ростом атомного номера  $Z$  по закону  $Z^{-1/3}$ . Для дальнейшего приведем также выражение средней скорости электрона в атоме Томаса — Ферми

$$\langle v_e \rangle \approx 0,7 \cdot Z^{2/3} v_B, \quad (B.16)$$

где  $v_B$  — боровская скорость.

Обсуждение спектров атомных уровней мы начнем с простейшего случая атомов щелочных металлов. Низшие возбужденные состояния таких атомов соответствуют переходу валентного электрона из основного состояния  $ns$  в состояния  $n'l$  с  $l \geq 0$ ; при этом ионный состав (в нем все оболочки заполнены) очень слабо чувствует такой переход. Потенциал взаимодействия валентного электрона с ионным остовом не совпадает с кулоновским, поэтому характерное для атома водорода вырождение уровней по  $l$  здесь не имеет места (рис. В.6). Уровни сгущаются к порогу ионизации валентного электрона; выше этого порога располагаются уровни, соответствующие возбуждению электронов остова (рис. В.7). Это так называемые автоионизационные уровни, или автоионизационные состояния атома: запасенной в таких состояниях энергии возбуждения атома достаточно для его самопроизвольной ионизации:



Собственные ширины  $\Gamma$  автоионизационных уровней атомов достигают величины в десятые доли эВ; это соответствует среднему времени жизни автоионизационного состояния порядка  $10^{-14}$  с. При автоионизации всегда меняется состояние по крайней мере двух электронов: один из них переходит из связанного состояния

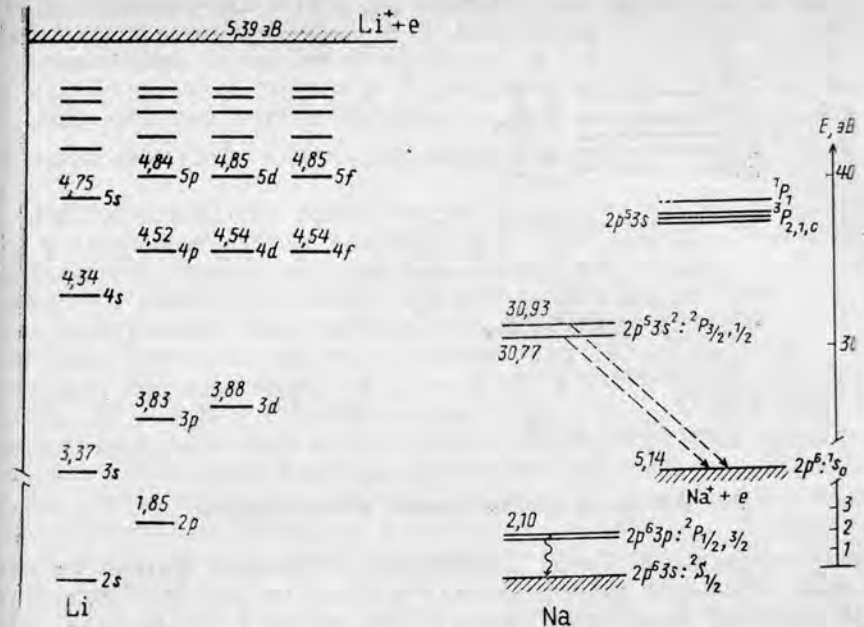


Рис. В. 6. Спектр уровней валентного электрона в атоме Li

Рис. В.7. Положение и схема распределения низших автоионизационных состояний атома Na

в непрерывный спектр, другой, переходя с более высокой на более низкую орбиту, поставляет ему необходимую для этого энергию. Таким образом, процесс автоионизации родственен процессу Оже, происходящему при заполнении вакансий во внутренних оболочках атома. Оба они обусловлены наличием парных корреляций между электронами в атомах.

Эффект парных корреляций отчетливо виден в спектрах уровней атомов щелочноземельных элементов: Be, Mg, Ca и т. д. Основная конфигурация таких атомов —  $(ns)^2$ , а конфигурация низших возбужденных состояний —  $(ns, np)$  или  $(np)^2$ . Рассмотрим положение уровней  $2s2p:1P$  и  $2s2p:3P$  в атоме Be (рис. В.8). В синглетном состоянии  $1P$  волновая функция двух внешних электронов  $\Psi_{2s2p}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$  симметрична относительно перестановки их пространственных координат, в триплетных состояниях  $3P$  она антисимметрична. Поэтому взаимное отталкивание этих электронов в первом случае действует сильнее, чем во втором, и уровень  $2s2p:1P_1$  оказывается значительно выше по энергии возбуждения атома, чем уровни той же конфигурации  $2s2p:3P_{0,1,2}$ .

Обратимся к вопросу об электромагнитных переходах в атомах. В отличие от ядерного случая здесь длина волны фотона всегда много больше, чем размеры системы, и, следовательно, электрические дипольные переходы заведомо доминируют над

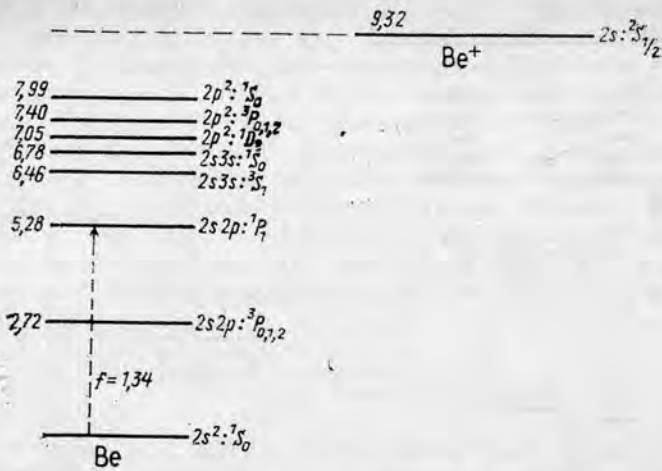


Рис. В.8. Схема низших уровней атома бериллия

всеми остальными. Такой  $E1$ -переход (в атомной физике их называют *оптически разрешенными*) показан на рис. В.8 пунктирной стрелкой. Указанный рядом с ней символ  $f$  — это сила осцилляторов перехода. В общем случае сила осцилляторов перехода  $|a\rangle \rightarrow |b\rangle$  выражается через матричный элемент оператора дипольного электрического момента атома  $D = \sum_{j=1}^Z e z_j$ ; и энергию

$$\omega_{ba} = \frac{1}{\hbar} (\epsilon_b - \epsilon_a);$$

$$f_{ba} = \frac{2 m_e \omega_{ba}}{\hbar e^2} |\langle b | \hat{D} | a \rangle|^2. \quad (\text{В.18})$$

Те же две величины  $|\langle b | \hat{D} | a \rangle|$  и  $\omega_{ba}$ , но в иной комбинации дают вероятность спонтанного электромагнитного перехода между рассматриваемыми уровнями (парциальную составляющую радиационной ширины  $\Gamma_{b \rightarrow a}$  верхнего из этих уровней):

$$\omega_{b \rightarrow a} = \frac{\Gamma_{b \rightarrow a}}{\hbar} = \frac{4}{3} \frac{\omega_{ba}^3}{\hbar c^3} |\langle b | \hat{D} | a \rangle|^2. \quad (\text{В.19})$$

Преимущество комбинации (В.18) перед (В.19) состоит в том, что сумма сил осцилляторов для переходов из данного состояния  $|a\rangle$  во все возможные состояния  $|b\rangle$  подчиняется строгому и в то же время очень простому соотношению — *правилу сумм*:

$$\sum_b f_{ba} = Z, \quad (\text{В.20})$$

где  $Z$  — число электронов в атоме. Таким образом, сила осцилля-

торов перехода  $|a\rangle \rightarrow |b\rangle$  показывает относительную интенсивность этого перехода среди всех возможных переходов из рассматриваемого начального состояния  $|a\rangle$ . Переход  $(2s)^2: S_0 \rightarrow 2s2p: ^1P_1$  в атоме бериллия, выделенный на рис. В.8, относится к числу сильных оптически разрешенных переходов; здесь сила осцилляторов равна 1,34 при полной сумме  $\sum_b f_{ba}(\text{Be}) = 4$ .

Распределение сил осцилляторов по спектру возбуждения атома в различных атомах различно. В атомах щелочных металлов выделяются сильные переходы  $ns_{1/2} \rightarrow np_{1/2}$ ;  $ns_{1/2} \rightarrow np_{3/2}$ ; приближенно их можно трактовать как одночастичные, не затрагивающие электронов в заполненных оболочках ионного остова. Действительно, значения сил осцилляторов для таких переходов составляют соответственно: в Li — 0,247 и 0,494; Na — 0,318 и 0,637; K — 0,35 и 0,70; Rb — 0,32 и 0,67; Cs — 0,39 и 0,81; в сумме каждая из пар чисел близка к единице. Мы могли бы поставить в этот ряд и водород, но заметим, что здесь сила осцилляторов соответствующего перехода значительно меньше единицы:  $f(1s \rightarrow 2p) = 0,416$ . Переходы в состояния  $3p$ ,  $4p$  и т. д. более слабы и лишь незначительно дополняют переход  $1s \rightarrow 2p$ , так что на весь дискретный спектр приходится лишь половина всей суммы сил осцилляторов, другая половина приходится на переходы в непрерывный спектр, т.е. на ионизацию.

В заключение вводного раздела рассмотрим некоторые вопросы строения молекул. Простейшая из них — это молекулярный ион водорода  $\text{H}_2^+$ , трехчастичная система, состоящая из двух протонов и электрона. На ее примере удобно разобрать ряд принципиальных моментов, касающихся природы химической связи и характера возбуждений молекул.

Классическая физика не может объяснить, почему при взаимодействии атома водорода со вторым протоном возможно образование связанного состояния трех частиц, входящих в  $\text{H}_2^+$ . Квантовая теория решает этот вопрос. Примем адиабатическое приближение: поскольку ядра молекулы, как тяжелые частицы, движутся много медленнее электрона, можно ввести понятие уровней энергии электрона  $\epsilon_n(R)$  при фиксированном положении ядер и найти их, задав гамильтониан

$$\hat{H}_{\text{эл}} = -\frac{\hbar^2}{2m_e} \nabla^2 - \frac{e^2}{r_A} - \frac{e^2}{r_B} \quad (\text{В.21})$$

(смысл обозначений виден из рис. В.9). В основном состоянии молекулярного иона  $\text{H}_2^+$  волновая функция электрона аппроксимируется симметричной суперпозицией двух невозмущенных волно-

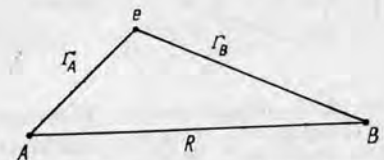


Рис. В.9. Схема координат частиц в молекулярном ионе водорода

вых функций изолированного атома  $\psi_{1s}(r) = \frac{1}{\sqrt{\pi a^3}} e^{-r/a}$ ,

$$\psi_{эл}(R, r) \sim \psi_{1s}(r_A) + \psi_{1s}(r_B), \quad (B.22)$$

а энергия электрона в зависимости от расстояния между ядрами дается выражением

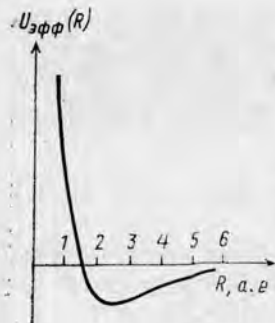
$$\epsilon(R) = \frac{\langle \psi_{1s}(r_A) | -\frac{e^2}{r_B} | \psi_{1s}(r_A) \rangle + \langle \psi_{1s}(r_A) | -\frac{e^2}{r_B} | \psi_{1s}(r_B) \rangle}{1 + \langle \psi_{1s}(r_A) | \psi_{1s}(r_B) \rangle}. \quad (B.23)$$

Первое слагаемое в числителе имеет простой физический смысл: это средняя энергия взаимодействия электрона, находящегося в состоянии  $1s$  в поле протона  $A$ , с «чужим» протоном  $B$ , отстоящем от  $A$  на расстоянии  $R$ . Второе слагаемое в этом числителе нельзя понять в рамках классической физики: оно передает квантовый эффект интерференции между амплитудами вероятностей найти электрон вблизи протона  $A$  и вблизи протона  $B$ . Без учета этого слагаемого невозможно получить устойчивую систему  $H_2^+$ .

Энергия электрона  $\epsilon(R)$  вместе с энергией кулоновского отталкивания ядер  $e^2/R$  определяет в адиабатическом приближении эффективную потенциальную энергию взаимодействия между ядрами:

$$U_{эфф}(R) = \frac{e^2}{R} + \epsilon(R). \quad (B.24)$$

Ее ход в зависимости от расстояния между ядрами показан на рис. В.10. Минимум потенциальной энергии (B.24) приходится на значение  $R \approx 2,5a = 1,32 \cdot 10^{-8}$  см, что несколько превышает экспериментальное значение равновесного расстояния между ядрами в молекулярном ионе  $H_2^+$ , которое составляет  $1,06 \cdot 10^{-8}$  см.



За движением ядер проследим с помощью стационарного уравнения Шредингера для их волновой функции  $\Psi(R, \theta, \varphi)$ , где углы  $\theta$  и  $\varphi$  показывают ориентацию межъядерной оси молекулы; при этом будем использовать приведенную массу системы

$$\mu = \frac{m_A m_B}{m_A + m_B}. \quad (B.25)$$

Рис. В.10. Эффективная потенциальная энергия взаимодействия между протонами в молекулярном ионе водорода

Поскольку эффективная потенциальная энергия зависит только от  $R$ , задача сводится к радиальному уравнению Шредингера

$$\frac{d^2}{dR^2} (RR_J(R)) + \frac{2\mu}{\hbar^2} \left[ E - U_{эфф}(R) - \frac{\hbar^2 J(J+1)}{2\mu R^2} \right] RR_J(R) = 0, \quad (B.26)$$

откуда и находим набор собственных значений  $E_{vJ}$  для каждого значения  $J$  вращательного момента молекулы. При этом полная волновая функция, описывающая движение ядер, есть произведение множителей, один из которых связан с вращением молекулы, а другой — с колебаниями ядер вдоль ее оси:

$$\psi_{vJM}(R, \theta, \varphi) = R_{vJ}(R) Y_{JM}(\theta, \varphi), \quad (B.27)$$

а сама она, согласно адиабатическому приближению, входит множителем в полную волновую функцию молекулы:

$$\Psi(r, R, \theta, \varphi) = \psi_{эл}(r, R) R_{vJ}(R) Y_{JM}(\theta, \varphi). \quad (B.28)$$

Наличие в уравнении (B.26) слагаемого  $\frac{\hbar^2 J(J+1)}{2\mu R^2}$  приводит к тому, что равновесное расстояние между ядрами зависит от состояния их вращательного движения, при этом средние линейные размеры молекулы растут с ростом вращательного момента  $J$ . Разложим входящую в (B.26) сумму операторов потенциальной энергии и центробежной энергии в ряд по степеням отклонения от равновесного значения  $R_J$ :

$$U_{эфф}(R) + \frac{\hbar^2 J(J+1)}{2\mu R^2} = \left[ U_{эфф}(R) + \frac{\hbar^2 J(J+1)}{2\mu R^2} \right]_{R=R_J} + \frac{1}{2} \left[ U_{эфф}(R) + \frac{\hbar^2 J(J+1)}{2\mu R^2} \right]''_{R=R_J} (R - R_J)^2 + \dots \quad (B.29)$$

Если отбросить высшие члены в этом разложении, то мы приходим к характерному для гармонического осциллятора эквидистантному спектру колебательных возбуждений молекулы:

$$E_{Jv} = \text{const} + \frac{\hbar^2 J(J+1)}{2\mu R_0^2} + \hbar \omega_0 (v + 1/2) + \Delta E_{Jv}, \quad (B.30)$$

где  $\omega_0$  — частота колебаний, а  $v=0, 1, 2, \dots$  — колебательное квантовое число. Между вращением и колебанием ядер в молекуле существует определенная связь. В формуле (B.30) ее учет служит последнему слагаемому  $\Delta E_{Jv}$ , в котором «перепутаны» квантовые числа  $J$  и  $v$ :

$$\Delta E_{Jv} \sim \frac{\hbar^4 J(J+1)}{\mu^2 R_0^4 \hbar \omega_0} (v + 1/2). \quad (B.31)$$

Задача о молекулярном ионе водорода имеет большое практическое значение, в частности при рассмотрении ряда мезомолекулярных явлений (см. лекцию 14). С другой стороны, на этом примере простейшего молекулярного образования прослеживаются

ся общие принципы теоретического описания молекул, в том числе и многоатомных. Если в частном случае двухатомной молекулы энергия электронов  $\epsilon_n(R)$  в адиабатическом приближении зависит от единственного параметра  $R$ , то в молекуле, содержащей  $N$  ядер ( $N > 2$ ), она зависит уже от  $3N - 6$  независимых переменных, характеризующих взаимное расположение ядер в молекуле.

Симметрия молекулы определяет симметрию среднего поля, в котором движутся ее электроны, а следовательно, и характер спектра ее электронных возбуждений. Вместе с тем симметрия молекулы задает и возможные типы ее колебаний (эффективные методы классификации колебательных возбуждений молекул на основе свойств их симметрии дает теория групп). Взаимное расположение ядер в молекуле определяет также ее моменты инерции относительно разных осей, являющиеся основными параметрами, характеризующими вращательное возбуждение молекулы.

Выше на примере молекулярного иона водорода было продемонстрировано существование связи между колебательными и вращательными возбуждениями молекул. Такая связь существует и в общем случае: малые вращательные возбуждения накладываются на более энергичные колебания молекулы, что приводит к линейчато-полосчатой картине инфракрасных спектров молекул. Между электронными возбуждениями и колебаниями молекул также существует характерная связь. Выражением этой связи является, в частности, принцип Франка — Кондона. Речь идет об электронных переходах в молекулах. На рис. В.11 схематически изображены два электронных терма двухатомной молекулы:  $\epsilon_0(R)$  и  $\epsilon_1(R)$ . Средние расстояния между ядрами в состояниях  $|1\rangle$  и  $|2\rangle$  сдвинуты относительно друг друга. Допустим, что молекула находится в нижнем колебательном состоянии основного терма  $\epsilon_0(R)$ . Под влиянием какого-то внешнего возмущения электроны молекулы меняют свое состояние и она переходит на терм  $\epsilon_1(R)$ . При этом ядра молекулы не успевают заметно изменить свое начальное положение и, следовательно, возбуждение электронного состояния молекулы сопровождается возбуждением ее колебаний. Как видно из представленного выше схематического рисунка, если ширина разброса  $(\Delta R)_0$ , связанного с «нулевыми» колебаниями ядер в основном состоянии, достаточно велика, то при электронном возбуждении с заметной вероятностью может возбуждаться не один, а несколько колебательных уровней; возникает полоса электронно-вибрационных переходов в молекуле.

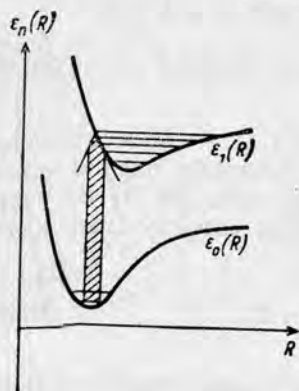


Рис. В.11. Схема возникновения полосы электронно-вибрационных переходов в молекуле

В табл. В.4 собраны значения основных параметров для двухатомных

Таблица В.4

Основные параметры некоторых двухатомных молекул

Молекула	$I$ , эВ	$D$ , эВ	$R_0$ , Å	$\omega_0$ , $\text{см}^{-1} / \hbar\omega_0$ , эВ
H <sub>2</sub>	15,42	4,48	0,74	4400/0,55
N <sub>2</sub>	15,58	9,76	1,12	2200/0,28
NaCl	7,64	4,3	2,36	365/0,045

молекул H<sub>2</sub>, N<sub>2</sub> и NaCl: потенциал ионизации  $I$ , энергия диссоциации  $D$ , равновесное расстояние  $R_0$  и частота (энергия) колебаний для основного терма  $\omega_0$ . К этим данным интересно добавить, что энергия диссоциации молекулы тяжелого водорода D<sub>2</sub> не совпадает, как показывает эксперимент, с соответствующим значением для молекулы H<sub>2</sub>:

$$D(\text{H}_2) = 4,48 \text{ эВ}; \quad D(\text{D}_2) = 4,56 \text{ эВ}.$$

В этом проявляется эффект нулевых колебаний молекул. Энергия диссоциации молекулы  $D$  есть глубина потенциальной ямы для основного терма минус энергия нулевых колебаний:

$$D = |U_{\text{эфф}}(R_0)| - \frac{1}{2}\hbar\omega_0. \quad (\text{В.32})$$

Частота колебаний  $\omega_0$  выражается через коэффициент жесткости  $k$ , определяющий ход терма (В.29) вблизи точки равновесия:

$$U_{\text{эфф}}(R) \approx U_{\text{эфф}}(R_0) + \frac{1}{2}k(R - R_0)^2 + \dots, \quad (\text{В.33})$$

и приведенную массу молекулы  $\mu$ :

$$\omega_0 = \sqrt{\frac{k}{\mu}}. \quad (\text{В.34})$$

Отсюда видно, что частота колебаний  $\omega_0$ , а вместе с ней и энергия нулевых колебаний  $\frac{1}{2}\hbar\omega_0$  молекулы D<sub>2</sub> в  $\sqrt{2}$  раз меньше, чем молекулы H<sub>2</sub>. Таким образом,

$$\begin{aligned} D(\text{D}_2) - D(\text{H}_2) &= -[\frac{1}{2}\hbar\omega_0(\text{D}_2) - \frac{1}{2}\hbar\omega_0(\text{H}_2)] = \\ &= \frac{1}{2}(1 - 1/\sqrt{2})\hbar\omega_0(\text{H}_2). \end{aligned} \quad (\text{В.35})$$

Подставляя сюда значение  $\hbar\omega_0(\text{H}_2) = 0,55$  эВ, получаем  $D(\text{D}_2) - D(\text{H}_2) = 0,078$  эВ, в полном соответствии с приведенными выше экспериментальными данными.



**РАЗДЕЛ I**  
**ПРОХОЖДЕНИЕ ЗАРЯЖЕННЫХ**  
**ЧАСТИЦ ЧЕРЕЗ ВЕЩЕСТВО**

*Лекция 1*

**§ 1.1. ИОНИЗАЦИОННОЕ ТОРМОЖЕНИЕ И МНОГОКРАТНОЕ РАССЕЯНИЕ БЫСТРЫХ ТЯЖЕЛЫХ ЧАСТИЦ В НЕУПОРЯДОЧЕННЫХ СРЕДАХ; СВЯЗЬ ХАРАКТЕРИСТИК ПРОХОЖДЕНИЯ ЧАСТИЦ ЧЕРЕЗ ВЕЩЕСТВО С ХАРАКТЕРИСТИКАМИ ЭЛЕМЕНТАРНЫХ ПРОЦЕССОВ**

Быстрая заряженная частица, проходя через вещество (газ, жидкость, твердое тело, плазму), испытывает многочисленные упругие и неупругие столкновения с атомами (молекулами) этого вещества. Вначале мы оставим в стороне все последствия таких столкновений для той среды, через которую проходит частица, а проследим только за самой частицей. Наше описание будет носить вероятностный характер.

Пусть  $\langle \Delta E \rangle$  — средняя энергия, потерянная частицей при прохождении участка пути  $\Delta x$ . При малых  $\Delta x$  величина  $\langle \Delta E \rangle$  пропорциональна  $\Delta x$ . Поэтому скорость потери энергии частицей удобно характеризовать отношением  $\langle \Delta E \rangle / \Delta x$ , которое в пределе  $\Delta x \rightarrow 0$  зависит от массы, заряда, скорости частицы и свойств вещества в окрестности той точки, где находится частица. Это предельное отношение принято называть *тормозной способностью вещества* (в английской литературе *stopping power*) и обозначать единым символом  $\left( -\frac{dE}{dx} \right)$ ; в этом обозначении учитывается,

что изменение энергии частицы при прохождении через вещество есть всегда величина отрицательная (так что  $\left( -\frac{dE}{dx} \right)$  —

положительная величина). Введенная нами тормозная способность вещества имеет размерность энергия/длина, т. е., например, МэВ/см. Конечно, путь, проходимый частицей в веществе, можно измерять не только в сантиметрах или микронах, но и массой пройденного слоя, например в единицах г/см<sup>2</sup>:

$$X = \rho x, \quad (1.1)$$

где  $\rho$  — плотность вещества. В связи с этим дадим еще одно, эквивалентное первому определение тормозной способности:

$$\left( -\frac{dE}{dX} \right) = \frac{1}{\rho} \left( -\frac{dE}{dx} \right). \quad (1.2)$$

Эту величину называют *массовой тормозной способностью*; ее размерность, например, МэВ/(г/см<sup>2</sup>). Определяющий вклад в тормозную способность вещества дают неупругие столкновения

частицы с атомами среды, когда энергия частицы расходуется на возбуждение или ионизацию атомов. В дальнейшем мы увидим, что процессы ионизации при этом более существенны, чем процессы возбуждения, не сопровождающиеся потерей атомами своих электронов. В связи с этим торможение заряженных частиц при прохождении через вещество называют обычно *ионизационным торможением*, а потери энергии в процессе торможения — ионизационными потерями. Потери энергии на единицу пути, т. е. тормозную способность вещества  $\left( -\frac{dE}{dx} \right)$ , называют *удельными ионизационными потерями*.

Наша задача заключается в том, чтобы выразить тормозную способность вещества через характеристики элементарных процессов столкновения частицы с отдельными атомами вещества. Примем гипотезу *независимых последовательных парных столкновений* частицы с атомами среды. В случае когда наша среда — газ, такая гипотеза представляется вполне правомерной, однако дело обстоит гораздо сложнее, если частица проходит через конденсированную среду. Ограниченность этой гипотезы проявляется особенно ярко, когда мы рассматриваем прохождение заряженных частиц через кристаллы (см. лекцию 5). Итак, примем гипотезу независимых парных столкновений как первое приближение и вместе с тем будем считать, что среда, через которую проходит частица, однородна и совершенно неупорядочена.

Чтобы разобраться в элементарных процессах взаимодействия частицы с атомом вещества, нужно знать структуру атома, и в частности, спектр его энергетических уровней. На рис. 1.1 дано схематическое изображение такого спектра. Пока энергия возбуждения атома меньше его потенциала ионизации  $I$ , спектр уровней атома является дискретным. Далее начинается область непрерывного спектра, на фоне которого располагаются отдельные, спонтанно распадающиеся (автоионизационные) состояния. Состояния дискретного спектра атома мы будем обозначать символом  $|n\rangle$ , а соответствующие им волновые функции записывать в виде  $\varphi_n(\xi) = \varphi_n(r_1\sigma_1, r_2\sigma_2, \dots, r_z\sigma_z)$ , где  $\xi$  — совокупность про-

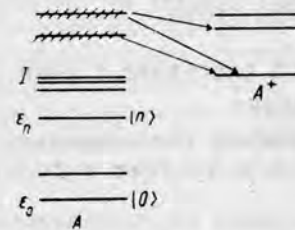


Рис. 1.1. Схема расположения дискретных и автоионизационных уровней атома ( $I$  — потенциал ионизации)

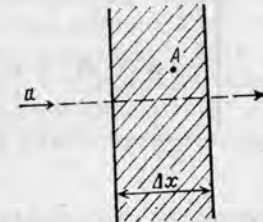


Рис. 1.2. Прохождение быстрой заряженной частицей слоя вещества  $\Delta x$

странственных и спиновых переменных всех  $Z$  электронов атома. Векторы состояний  $|n\rangle$  ортонормированы:

$$\langle n|n'\rangle = \delta_{nn'} \quad (1.3)$$

и вместе с состояниями непрерывного спектра образуют полный набор:

$$\sum_n \varphi_n(\xi) \varphi_n^*(\xi') + \dots = \delta(\xi - \xi') \quad (1.4)$$

(здесь многоточие обозначает интеграл по непрерывному спектру). Условие полноты (1.4) мы будем также записывать в символической форме:

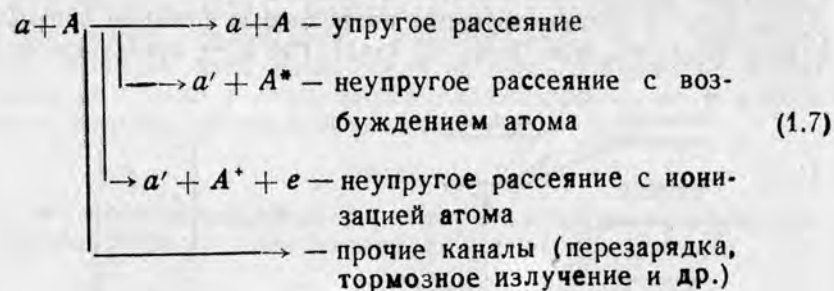
$$\sum_n |n\rangle \langle n| + \dots = \hat{I}, \quad (1.5)$$

где  $\hat{I}$  — единичный оператор в гильбертовом пространстве состояний атома.

Рассмотрим прохождение через вещество заряженной частицы  $a$ , масса которой много больше массы электрона:

$$m_a \gg m_e \quad (1.6)$$

(прохождение электронов через вещество рассматривается в лекции 4). Формально наше рассмотрение может быть отнесено к частицам любого заряда  $Z_a$ , однако в действительности в случае многозарядных ионов ( $Z_a \gg 1$ ) надо учитывать ряд особых физических процессов, от которых мы пока отвлечемся (см. § 4.5). Таким образом, будем подразумевать под  $a$  протон  $p$ ,  $\alpha$ -частицу, ядра других легчайших элементов, а также мюоны ( $\mu^\pm$ ), заряженные мезоны ( $\pi^\pm, K^\pm$ ) и барионы (например,  $\Sigma^-$ - и  $\Sigma^+$ -гипероны и антипротон  $\bar{p}$ ). В общем случае при столкновении частицы  $a$  с атомом  $A$  оказываются возможными различные каналы реакции:



Вероятность столкновения  $a+A$  будем характеризовать полным эффективным сечением взаимодействия  $\sigma$ ; оно складывается из полного сечения упругого рассеяния и полного сечения неупругих процессов:

$$\sigma = \sigma_{упр} + \sigma_{неупр} \quad (1.8)$$

Эффективные сечения  $\sigma_n$  процесса  $a+A \rightarrow a'+A_n^*$ , соответствующего возбуждению какого-то определенного уровня атома, будем называть *парциальными сечениями* неупругого рассеяния. Если не учитывать каналов перезарядки, тормозного излучения и других «прочих» каналов, то полное сечение неупругих процессов можно записать в виде

$$\sigma_{неупр} = \sum_{n \neq 0} \sigma_n + \dots, \quad (1.9)$$

где сумма по  $n$  охватывает все возбужденные дискретные уровни атома, а многоточие подразумевает интеграл по всем состояниям его непрерывного спектра. Условимся в дальнейшем записывать соотношение (1.9) (а также подобные ему соотношения, например (1.4) или (1.5)) просто в виде

$$\sigma_{неупр} = \sum_{n \neq 0} \sigma_n, \quad (1.10)$$

подразумевая, что суммирование по  $n$  включает в себя и интегрирование по непрерывному спектру. При необходимости же различать процессы возбуждения дискретных уровней и ионизации атома будем явно разбивать сечение неупругого рассеяния на соответствующие слагаемые:

$$\sigma_{неупр} = \sigma_{возб} + \sigma_{иониз}. \quad (1.11)$$

Введя характеристики элементарного процесса столкновения  $a+A$ , вернемся к нашей задаче — выразить через эти характеристики тормозную способность вещества.

Рассмотрим прохождение частицей  $a$  тонкого слоя вещества, состоящего из атомов сорта  $A$  (рис. 1.2). Согласно принятой нами гипотезе независимых последовательных соударений ионизационные потери частицы складываются аддитивно из потерь, связанных с возбуждением (ионизацией) отдельных атомов. Если какое-то соударение вызывает в атоме переход  $|0\rangle \rightarrow |n\rangle$ , то в каждом из таких соударений потеря энергии частицы составляет величину  $\varepsilon_n - \varepsilon_0$  (строго говоря, еще меньшая часть энергии частицы идет на отдачу атома как целого, однако этой энергией, как правило, можно пренебречь). Следовательно, если  $\Delta N_n$  — это среднее число столкновений частицы  $a$  с атомами вещества в слое  $\Delta x$ , в результате которых совершается переход  $|0\rangle \rightarrow |n\rangle$ , то среднее изменение энергии частицы при прохождении слоя  $\Delta x$  есть

$$\Delta E = - \sum_n (\varepsilon_n - \varepsilon_0) \Delta N_n. \quad (1.12)$$

Теперь остается выразить  $\Delta N_n$  через парциальные сечения  $\sigma_n$ :

$$\Delta N_n = n_0 \sigma_n \Delta x, \quad (1.13)$$

здесь  $n_0$  — число атомов  $A$  в единице объема вещества\*. Подставляя (1.13) в (1.12) и переходя к пределу  $\Delta x \rightarrow 0$ , получаем

$$\left(-\frac{dE}{dx}\right) = n_0 \sum_n (\varepsilon_n - \varepsilon_0) \sigma_n. \quad (1.14)$$

Таким образом, тормозная способность  $\left(-\frac{dE}{dx}\right)$  есть произведение двух сомножителей. Один из них — плотность числа атомов  $A$  в веществе  $n_0$  — никак не связан со свойствами и параметрами интересующей нас частицы. Другой, наоборот, не зависит от плотности вещества, но содержит в себе всю информацию о взаимодействии частиц  $a$  и  $A$ . Его стандартное обозначение

$$S(E) \equiv \sum_n (\varepsilon_n - \varepsilon_0) \sigma_n. \quad (1.15)$$

Это так называемое *эффективное торможение* (effective stopping). Согласно (1.14) эффективное торможение  $S(E)$  есть тормозная способность вещества, отнесенная к единичной плотности числа атомов в веществе:

$$\left(-\frac{dE}{dx}\right) = n_0 S(E). \quad (1.16)$$

Торможение — это лишь одна сторона процесса прохождения частицы через вещество. Вместе с ним в каждом акте столкновения как-то меняется и направление движения частицы. Рассмотрим, как пучок частиц, имеющий первоначально определенное направление, «размывается» по направлениям в результате многократных столкновений каждой из частиц пучка с атомами вещества.

Введем два понятия и, соответственно, два разных обозначения:  $\Theta_i$  — угол отклонения частицы от первоначального направления после  $i$ -го столкновения;  $\vartheta_i$  — угол рассеяния в  $i$ -м столкновении. Пусть  $\mathbf{v}_i$  — вектор скорости частицы после  $i$ -го столкновения (соответственно  $\mathbf{v}_{i-1}$  — вектор скорости перед  $i$ -м, т. е. после  $(i-1)$ -го столкновения). Все эти величины показаны на



Рис. 1.3. Направление движения частицы после  $(i-1)$ -го и  $i$ -го столкновений

рис. 1.3. Пусть вектор  $\mathbf{v}_{i-1}$  лежит в плоскости рисунка, тогда вектор  $\mathbf{v}_i$ , вообще говоря, лежит вне этой плоскости и, следовательно, его положение характеризуется не только углом рассеяния  $\vartheta_i$ , но и азимутальным углом  $\varphi_i$ .

\* Эффективное сечение  $\sigma$  процесса столкновения двух частиц  $a+A \rightarrow f$  определяется как среднее число событий  $f$  в единицу времени, отнесенное к одной частице мишени  $A$  и к единичному потоку  $j_a$  падающих частиц. Легко видеть, что соотношение (1.13) отвечает этому определению.

Из геометрии следует

$$\cos \Theta_i = \cos \Theta_{i-1} \cdot \cos \vartheta_i + \sin \Theta_{i-1} \cdot \sin \vartheta_i \cdot \cos \varphi_i. \quad (1.17)$$

Тем самым мы выразили угол отклонения частицы от первоначального направления после  $i$ -го столкновения через угол отклонения  $\Theta_{i-1}$  после предыдущего столкновения, угол рассеяния  $\vartheta_i$  в  $i$ -м столкновении и соответствующий ему азимутальный угол  $\varphi_i$ .

Теперь вычислим значение величины  $\cos \Theta_i$  по большому числу частиц, проходящих через вещество:

$$\langle \cos \Theta_i \rangle = \langle \cos \Theta_{i-1} \cdot \cos \vartheta_i \rangle + \langle \sin \Theta_{i-1} \cdot \sin \vartheta_i \cdot \cos \varphi_i \rangle. \quad (1.18)$$

Поскольку согласно принятой нами гипотезе независимых последовательных соударений каждое столкновение происходит независимо от предыдущего, а среда, через которую проходит частица, не упорядочена (т. е. в ней нет никаких выделенных направлений), значит, распределение столкновений по азимутальному углу  $\varphi_i$  равномерно. Это значит  $\langle \cos \varphi_i \rangle = 0$ , т. е. второе слагаемое в (1.18) в результате усреднения по большому числу событий обращается в нуль. Следствием той же гипотезы о независимости последовательных парных столкновений является то, что среднее от произведения косинусов в (1.18) можно заменить произведением соответствующих средних. В итоге после усреднения имеем

$$\langle \cos \Theta_i \rangle = \langle \cos \Theta_{i-1} \rangle \langle \cos \vartheta_i \rangle. \quad (1.19)$$

Далее мы ограничимся случаем быстрых тяжелых частиц, когда в результате многократных столкновений частицы с атомами среды средний угол отклонения оказывается все же небольшим. Тогда, используя известное разложение  $\cos x \approx 1 - 1/2 x^2 + \dots$ , вместо (1.19) получаем

$$\langle \Theta_i^2 \rangle = \langle \Theta_{i-1}^2 \rangle + \langle \vartheta_i^2 \rangle. \quad (1.20)$$

Это рекуррентное соотношение показывает, что средний квадрат угла отклонения частицы линейно растет со средним числом столкновений:

$$\langle \Theta^2 \rangle = N \langle \vartheta^2 \rangle. \quad (1.21)$$

Обратимся теперь снова к рис. 1.2 и формуле (1.13). Среднее число всех столкновений, которое испытывает частица, проходя тонкий слой вещества  $x$ , есть

$$N = n_0 \sigma x, \quad (1.22)$$

где  $\sigma$  — полное эффективное сечение ее взаимодействия с атомом вещества. Прежде чем подставить это выражение в  $\langle \Theta^2 \rangle$ , рассмотрим второй множитель в (1.21) и выразим средний квадрат

угла рассеяния частицы  $\langle \theta^2 \rangle$  на атоме  $A$  через дифференциальное сечение  $\frac{d\sigma}{d\Omega}$ , дающее угловое распределение частиц  $a$  в процессе рассеяния:

$$\langle \theta^2 \rangle = \int \vartheta^2 \frac{d\sigma}{d\Omega} d\Omega / \int \frac{d\sigma}{d\Omega} d\Omega. \quad (1.23)$$

Входящая сюда величина  $\frac{d\sigma}{d\Omega}$  дает вероятность рассеяния частицы  $a$  на угол  $\vartheta$  безотносительно к тому, упругим или неупругим оказывается отдельный акт столкновений. Другими словами, входящая в (1.23) величина  $\frac{d\sigma}{d\Omega}$  есть сумма дифференциальных сечений упругого и неупругого рассеяния:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \left( \frac{d\sigma}{d\Omega} \right)_{\text{упр}} + \left( \frac{d\sigma}{d\Omega} \right)_{\text{неупр}}. \quad (1.24)$$

При этом (см. (1.8))

$$\int \frac{d\sigma}{d\Omega} d\Omega = \sigma; \quad \int \left( \frac{d\sigma}{d\Omega} \right)_{\text{упр}} d\Omega = \sigma_{\text{упр}}; \quad (1.25)$$

$$\int \left( \frac{d\sigma}{d\Omega} \right)_{\text{неупр}} d\Omega = \sigma_{\text{неупр}}.$$

Итак, подставляя (1.22) и (1.23) в (1.21), получаем

$$\langle \theta^2 \rangle = n_0 x \int \vartheta^2 \frac{d\sigma}{d\Omega} d\Omega - \quad (1.26)$$

средний квадрат угла отклонения частицы (расхождения пучка частиц) растет пропорционально толщине пройденного слоя вещества. Соотношение (1.26) — это основная формула теории многократного рассеяния частиц при прохождении через вещество. Часто используется величина  $\Theta = \sqrt{\langle \theta^2 \rangle}$ ; она называется *средним углом многократного рассеяния*.

При выводе формул (1.16) и (1.26) были сделаны допущения, ограничивающие нас случаем быстрых частиц (см. соображения, изложенные при получении соотношений (1.12) или (1.20)). Нам надо теперь решить, какие же частицы можно считать «быстрыми». Очевидно, необходимо, чтобы скорость или кинетическая энергия проходящей через вещество частицы были много больше какой-то величины соответствующей размерности, характеризующей либо само вещество, либо взаимодействие нашей частицы с атомом вещества.

Мы будем пользоваться двумя неравенствами: а) скорость частицы  $a$  много больше средней скорости электронов в атоме вещества:

$$v_a \gg \langle v_e \rangle; \quad (1.27a)$$

б) кинетическая энергия частицы  $a$  много больше средней потенциальной энергии взаимодействия в системе  $a+A$ :

$$E_a \gg |\langle V_{aA} \rangle|. \quad (1.27б)$$

Прикинем, что это означает в цифрах, скажем, для взаимодействия протонов с веществом.

Из атомной физики мы знаем, что средняя скорость электрона на  $(nl)$ -орбите атома водорода или водородоподобного иона выражается через боровскую скорость  $v_B = \alpha c \approx 2 \cdot 10^8$  см/с по формуле

$$\langle v_e \rangle_{nl} = v_B \cdot \frac{Z}{n}, \quad (1.28)$$

где  $n$  — главное квантовое число,  $Z$  — заряд ядра,  $\alpha = 1/137$  — постоянная тонкой структуры. Применительно к многоэлектронному атому формулой (1.28) можно пользоваться лишь для ориентировочных оценок, подставляя в нее вместо  $Z$  эффективный заряд соответствующей электронной оболочки  $Z_{nl}^{\text{эфф}}$ ; средняя скорость электрона в атоме различна на разных оболочках: она тем меньше, чем дальше находится рассматриваемая электронная оболочка от ядра. Часто для оценки средней скорости электронов по всем оболочкам атома пользуются моделью Томаса — Ферми

$$\langle v_e \rangle_{T-F} \approx 0,7 v_B Z^{2/3}. \quad (1.29)$$

Для примера рассмотрим случай, когда наш протон проходит через газ гелия. При этом средняя скорость атомных электронов составляет примерно  $0,01$  с и, как легко подсчитать, условию (1.27) отвечает неравенство  $E_p \gg 50$  кэВ. Таким образом, в гелиевой среде протоны с кинетической энергией в несколько МэВ, согласно условию (1.27а), можно смело считать быстрыми и применять к этому случаю полученные выше результаты. Интересно, что условие (1.27б) дает примерно такие же цифры, что и условие (1.27а).

## § 1.2. КЛАССИЧЕСКАЯ ТЕОРИЯ ИОНИЗАЦИОННОГО ТОРМОЖЕНИЯ

Совместим физические условия (1.27б) и (1.27а). С одной стороны, взаимодействие быстрой частицы  $a$  с каждым атомом среды мало, а это значит, что в каждом соударении и потери энергии частицы относительно малы, и, следовательно, искривление траектории ее движения ничтожно: практически частица движется прямолинейно и равномерно. С другой стороны, согласно тем же условиям, частица пролетает мимо атома среды столь быстро, что «видит» каждый из атомных электронов как бы «замороженным» в какой-то точке пространства. Классическая теория ионизационного торможения быстрых частиц основывается на предположении, что проходящая через вещество частица взаимодействует

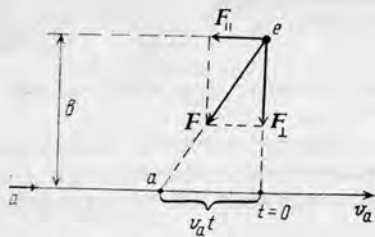


Рис. 1.4. Продольная и поперечная составляющие силы  $F$ , действующей на электрон со стороны пролетающей частицы

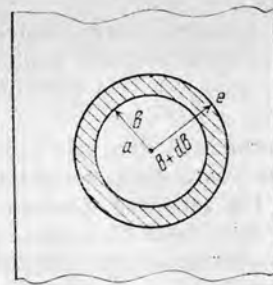


Рис. 1.5. Поперечный разрез кольцевого цилиндра ( $b$ ,  $b+db$ )

вует с атомными электронами как с независимыми свободными частицами; при этом потери энергии частицей за счет ее взаимодействия с отдельными электронами просто суммируются в предположении беспорядочного (равномерного) распределения электронов в веществе.

Рассмотрим взаимодействие быстрой тяжелой заряженной частицы с одним свободным электроном. Пусть частица пролетает мимо электрона с постоянной скоростью  $v_a$  по прямолинейной траектории с прицельным параметром  $b$  (рис. 1.4). Разложим силу  $F(t)$ , действующую в каждый момент времени  $t$  со стороны частицы  $a$  на электрон, на продольную и поперечную составляющие  $F_{||}(t)$  и  $F_{\perp}(t)$ . Согласно сформулированным выше условиям задачи продольный импульс силы  $\int F_{||}(t) dt$ , полученный за время  $t < 0$ , полностью компенсируется импульсом силы, полученным за время  $t > 0$ . Поперечный же импульс силы оказывается равным

$$\int F_{\perp}(t) dt = 2 \int_0^{\infty} F(t) \frac{b}{\sqrt{b^2 + (v_a t)^2}} dt = 2 \int_0^{\infty} \frac{Z_a e^2}{b^2 + (v_a t)^2} \frac{b dt}{\sqrt{b^2 + (v_a t)^2}} = \frac{2Z_a e^2}{b v_a}. \quad (1.30)$$

Приравняем его к импульсу (количеству движения) электрона и вычислим кинетическую энергию электрона после его взаимодействия с пролетевшей частицей:

$$T_e = \frac{p_e^2}{2m_e} = \frac{2Z_a^2 e^4}{b^2 m_e v_a^2}. \quad (1.31)$$

Такова потеря энергии частицы при взаимодействии с одним электроном, отстоящим от траектории ее движения на расстоянии  $b$ .

Пусть частица проходит слой вещества  $\Delta x$ . Вырежем в нем мысленно тонкий кольцевой цилиндр, так чтобы его ось совпадала с траекторией движения частицы (рис. 1.5). Число электронов в этом кольцевом цилиндре равно

$$dN_e = n_e \cdot 2\pi b db \cdot \Delta x, \quad (1.32)$$

где  $n_e$  — плотность числа атомных электронов в веществе, а потери энергии частицы за счет ее взаимодействия с этими электронами составляют  $T_e dN_e$ , где  $T_e$  определяется формулой (1.31). Чтобы получить всю величину потерь энергии частицы при прохождении слоя  $\Delta x$ , остается взять интеграл по всей плоскости:

$$-\Delta E = \int T_e dN_e = n_e \Delta x \int_0^{\infty} T_e \cdot 2\pi b db. \quad (1.33)$$

Отсюда для тормозной способности вещества получаем

$$\left(-\frac{dE}{dx}\right) = \frac{4\pi Z_a^2 e^4}{m_e v_a^2} n_e \int \frac{db}{b}. \quad (1.34)$$

Здесь мы остановимся в своих выкладках и обсудим, что же делать с интегралом. Если действовать формально, то этот интеграл расходится. Однако физические соображения подсказывают, что брать его от нуля до бесконечности неразумно, так как и при предельно малых, и при предельно больших  $b$  мы выходим за границы тех предположений, на основе которых получено соотношение (1.34). Действительно, при  $b \rightarrow 0$  бессмысленно считать, что электрон после взаимодействия с частицей сохранил свое положение в пространстве: ведь он получает при таком столкновении большую энергию. С другой стороны, при очень больших  $b$  энергия, получаемая электроном, оказывается меньше потенциала ионизации и даже меньше порога возбуждения атома; в этом случае предположение о независимых свободных электронах вступает в грубое противоречие с реальной картиной строения вещества. Поэтому ограничим интегрирование в (1.34) конечными пределами — от некоторого  $b_{\min}$  до некоторого  $b_{\max}$ :

$$\left(-\frac{dE}{dx}\right) = \frac{4\pi Z_a^2 e^4}{m_e v_a^2} n_e \ln \frac{b_{\max}}{b_{\min}}. \quad (1.35)$$

На основе изложенных выше физических соображений выводится следующая формула для оценки логарифмического фактора в (1.35):

$$\ln \frac{b_{\max}}{b_{\min}} \approx \ln \frac{2m_e v_a^2}{I}, \quad (1.36)$$

где  $I$  — величина порядка средней энергии возбуждения или потенциала ионизации атома. Мы не будем, однако, делать сейчас

соответствующих выкладок, так как ниже, при более последовательном квантовом подходе мы опять получим формулу типа (1.35) со своим логарифмическим фактором, который тогда и оценим. Пока же отметим, что логарифмический фактор в (1.35) — это весьма вялая функция скорости (кинетической энергии) проходящей частицы, так что основные свойства тормозной способности вещества  $\left(-\frac{dE}{dx}\right)$  определяются предлогарифмическим фактором.

Проанализируем формулу (1.35).

Во-первых, мы видим, что зависимость ионизационных потерь от кинетической энергии  $E$  и массы частицы  $m_a$  сводится исключительно к зависимости от их отношения, т. е. скорости частицы:

$$\left(-\frac{dE}{dx}\right) \sim \frac{1}{v_a^2} \sim \frac{m_a}{E}. \quad (1.37)$$

Во-вторых, ионизационные потери пропорциональны квадрату заряда проходящей через вещество частицы:

$$\left(-\frac{dE}{dx}\right) \sim Z_a^2. \quad (1.38)$$

Это значит, например, что тормозные способности какого-то определенного вещества для протона и  $\alpha$ -частицы при одинаковой скорости этих частиц различаются (в области применимости формулы (1.35)) в 4 раза, а при одинаковой кинетической энергии — в 16 раз:

$$\left.\frac{\left(-\frac{dE}{dx}\right)_p}{\left(-\frac{dE}{dx}\right)_\alpha}\right|_{v_p=v_\alpha} \approx \frac{1}{4}; \quad \left.\frac{\left(-\frac{dE}{dx}\right)_p}{\left(-\frac{dE}{dx}\right)_\alpha}\right|_{E_p=E_\alpha} \approx \frac{1}{16}. \quad (1.39)$$

Формула (1.35) показывает, что ионизационные потери пропорциональны плотности числа электронов в веществе. Как и в § 1.1, обозначим через  $n_0$  плотность числа атомов в среде. Тогда если  $Z$  — это атомный номер вещества, то

$$n_e = Zn_0. \quad (1.40)$$

Следовательно, формулу (1.35) можно переписать по-другому:

$$\left(-\frac{dE}{dx}\right) = \frac{4\pi Z_a^2 e^4}{m_e v_a^2} Zn_0 \ln \frac{b_{\max}}{b_{\min}}, \quad (1.41)$$

или (учитывая, что плотность числа атомов  $n_0$  связана с плотностью вещества  $\rho$  через число Авогадро  $N_0 = 6,022 \cdot 10^{23}$  моль<sup>-1</sup> и массовое число атомов вещества  $A$ ,

$$n_0 = \rho \frac{N_0}{A}, \quad (1.42)$$

преобразовать ее еще дальше:

$$\left(-\frac{dE}{dx}\right) = \frac{4\pi Z_a^2 e^4}{m_e v_a^2} \frac{Z}{A} \rho N_0 \ln \frac{b_{\max}}{b_{\min}}. \quad (1.43)$$

Учитывая, что отношение  $Z/A$  меняется от вещества к веществу в довольно узких пределах (для гелия  ${}^4_2\text{He} - 0,5$ ; для свинца  ${}^{208}_{82}\text{Pb} - 0,4$ ), мы видим, что тормозная способность вещества, грубо говоря, пропорциональна его плотности

$$\left(-\frac{dE}{dx}\right) \sim \rho. \quad (1.44)$$

В § 1.1 мы ввели помимо тормозной способности  $\left(-\frac{dE}{dx}\right)$  еще так называемую массовую тормозную способность

$\left(-\frac{dE}{dx}\right) = \frac{1}{\rho} \left(\frac{dE}{dx}\right)$ . Сейчас мы видим, что она очень слабо меняется от вещества к веществу:

$$\left(-\frac{dE}{dx}\right) = \frac{4\pi Z_a^2 e^4}{m_e v_a^2} \frac{Z}{A} N_0 \ln \frac{b_{\max}}{b_{\min}}; \quad (1.45)$$

другими словами, потери энергии частицы при прохождении одного и того же слоя, выраженного в г/см<sup>2</sup>, в различных веществах примерно одинаковы.

На рис. 1.6 приведены экспериментальные данные о тормозной способности свинца. Мы видим, что ее зависимость от скорости частиц гораздо сложнее, чем следует из изложенной выше простой классической теории.

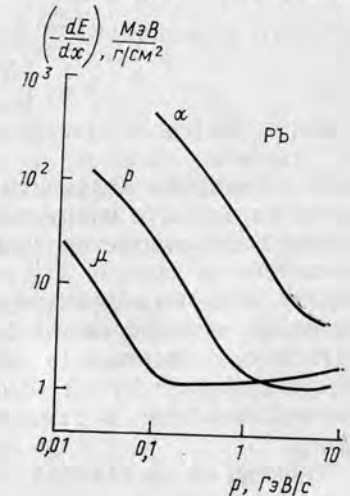


Рис. 1.6. Тормозная способность свинца по отношению к протонам, мюонам и  $\alpha$ -частицам

## Лекция 2

### § 2.1. КВАНТОВАЯ ТЕОРИЯ ИОНИЗАЦИОННОГО ТОРМОЖЕНИЯ БЫСТРЫХ ЗАРЯЖЕННЫХ ЧАСТИЦ

В начале прошлой лекции мы выразили характеристики прохождения заряженных частиц через вещество с помощью характеристик элементарных процессов взаимодействия частицы с отдельным атомом вещества. В дальнейшем мы оставили в стороне

эти соотношения и, обратившись к классической теории ионизационного торможения, пошли на очень сильные упрощения, вплоть до того, что дискретная, атомная структура вещества оказалась вне нашего рассмотрения. Сейчас мы продолжим начатый в § 1.1 последовательный анализ, который привел нас к формулам (1.16) и (1.27). Задача теперь состоит в том, чтобы найти и подставить в эти формулы характеристики взаимодействия частицы с атомами — эффективное торможение  $S(E)$  и дифференциальное сечение рассеяния  $\frac{d\sigma}{d\Omega}$ . Для этого обратимся к квантовой теории столкновений.

В квантовой теории дифференциальное сечение упругого рассеяния, при котором атом остается в своем начальном состоянии, или неупругого, сопровождающегося переходами  $|0\rangle \rightarrow |n\rangle$  из одного состояния атома в другое, выражается через соответствующую амплитуду рассеяния:

$$\left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right)_{\text{упр}} = |F_{\text{упр}}(E, \vartheta)|^2, \quad (2.1)$$

$$\left(\frac{d\sigma_n}{d\Omega}\right) = \frac{k'}{k} |F_{0 \rightarrow n}(E, \vartheta)|^2, \quad (2.2)$$

где  $E$  — энергия падающей частицы, а  $\vartheta$  — угол рассеяния. В общем случае для нахождения амплитуд рассеяния необходимо решить некое волновое уравнение (или даже систему связанных уравнений) и извлечь эти амплитуды из асимптотики соответствующих волновых функций. Однако если кинетическая энергия падающей частицы много больше, чем средняя энергия ее взаимодействия с атомами (а это согласно (1.27б) и есть как раз интересующий нас случай «быстрых частиц»), то проходит борновское приближение, в рамках которого задача кардинально упрощается.

Борновская амплитуда упругого рассеяния  $a+A \rightarrow a+A$  есть просто интеграл

$$F_{\text{упр}}^{(\text{борн})}(E, \vartheta) = -\frac{m_a}{2\pi\hbar^2} \int e^{-ik'r} V(r) e^{ikr} d^3r, \quad (2.3)$$

куда входит плоская волна  $\varphi_k = e^{ikr}$ , описывающая свободное движение частицы  $a$  в начальном состоянии, аналогичная ей волновая функция частицы в конечном состоянии  $\varphi_{k'} = e^{ik'r}$  и усредненный по основному состоянию атома  $|0\rangle$  потенциал его взаимодействия с частицей:

$$V(r) = \frac{Z_a Z e^2}{r} = \langle 0 | \sum_{j=1}^Z \frac{Z_a e^2}{|r-r_j|} | 0 \rangle \quad (2.4)$$

(уточним: фактически в (2.3) вместо массы налетающей части-

цы должна входить величина  $\mu = \frac{m_a - m_A}{m_a + m_A}$  — приведенная мас-

са системы  $a+A$ ). Входящие в (2.3) волновые векторы  $k$  и  $k'$  есть, с точностью до постоянной Планка, импульсы падающей и рассеянной частицы:  $k = p/\hbar$ ;  $k' = p'/\hbar$ ; в дальнейшем мы будем называть вектор  $k$  или  $k'$  просто импульсом частицы.

Из формулы (2.3) видно, что в борновском приближении амплитуда упругого рассеяния представляет собой сумму двух слагаемых: амплитуды рассеяния, обусловленного взаимодействием частицы  $a$  с ядром атома, и амплитуды рассеяния, обусловленного взаимодействием с атомными электронами; полная картина рассеяния зависит от интерференции этих двух амплитуд. Первое слагаемое вычисляется прямым интегрированием:

$$F_{\text{упр. яд}}^{(\text{борн})}(E, \vartheta) = -\frac{\mu}{2\pi\hbar^2} \int \frac{Z_a Z e^2}{r} e^{i(k-k')r} d^3r = \frac{2\mu Z_a Z e^2}{\hbar^2 q^2}. \quad (2.5)$$

Здесь мы ввели в рассмотрение вектор передаваемого импульса

$$q = k - k'; \quad (2.6)$$

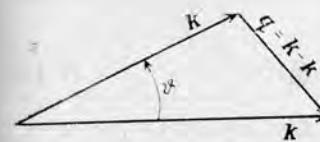


Рис. 2.1. Кинематика упругого и неупругого рассеяния частицы

это единственная кинематическая переменная, от которой зависит борновская амплитуда рассеяния. Зависимость величины и направления вектора  $q$  от угла рассеяния частицы см. на рис. 2.1.

Для вычисления второго слагаемого амплитуды упругого рассеяния введем в рассмотрение плотность электронов в атоме:

$$\rho_{\text{эл}}(r) = \langle 0 | \sum_{j=1}^Z \delta(r-r_j) | 0 \rangle, \quad (2.7)$$

через которую выразим средний потенциал взаимодействия частицы с электронной оболочкой:

$$\langle 0 | \sum_{j=1}^Z \frac{Z_a e^2}{|r-r_j|} | 0 \rangle = \int \frac{Z_a e^2}{|r-r'|} \rho_{\text{эл}}(r') d^3r'. \quad (2.8)$$

Подставив (2.8) в (2.6) и затем в (2.3), получим

$$F_{\text{упр. эл}}^{(\text{борн})}(E, \vartheta) = \frac{2\mu Z_a e^2}{\hbar^2 q^2} \int \rho_{\text{эл}}(r) e^{iqr} d^3r. \quad (2.9)$$

При малых  $q$  входящий сюда интеграл стремится, как легко видеть, к  $Z$ . При  $q \gg 1/a$ , где  $a$  — величина порядка атомных размеров, он быстро затухает из-за осцилляций экспоненциального

множителя  $e^{i\mathbf{q}\mathbf{r}}$ . В промежутке  $0 < q < 1/a$  зависимость этого интеграла от  $q$  определяется формой распределения электронной плотности  $\rho_{эл}(\mathbf{r})$ . Определим *формфактор электронной плотности атома*

$$\mathcal{F}_{эл}(\mathbf{q}) = \frac{1}{Z} \int \rho_{эл}(\mathbf{r}) e^{i\mathbf{q}\mathbf{r}} d^3r = \frac{1}{Z} \left\langle 0 \left| \sum_{j=1}^Z e^{i\mathbf{q}\mathbf{r}_j} \right| 0 \right\rangle, \quad (2.10)$$

который, с точностью до множителя  $1/Z$ , есть фурье-образ электронной плотности. Сбрав вместе слагаемые (2.5) и (2.9), выразим через  $\mathcal{F}_{эл}(\mathbf{q})$  амплитуду упругого рассеяния частицы атомом:

$$F_{упр}(E, \vartheta) = -\frac{2\mu Z_a Z e^2}{\hbar^2 q^2} [1 - \mathcal{F}_{эл}(\mathbf{q})]. \quad (2.11)$$

Здесь, как и в дальнейшем, мы в отличие от (2.3) опускаем значок «борн», хотя будем помнить, что это выражение не точное, а полученное в борновском приближении.

Итак, дифференциальное сечение упругого рассеяния имеет вид

$$\left( \frac{d\sigma}{d\Omega} \right)_{упр} = \frac{4\mu^2 Z_a^2 Z^2 e^4}{\hbar^4 q^4} |1 - \mathcal{F}_{эл}(\mathbf{q})|^2. \quad (2.12)$$

При  $q \gg 1/a$  оно превращается в сечение рассеяния частицы с зарядом  $Z_a$  на точечном кулоновском центре заряда  $Z$  и описывается формулой Резерфорда

$$\left( \frac{d\sigma}{d\Omega} \right)_{упр} \Big|_{q \gg \frac{1}{a}} \rightarrow \left( \frac{d\sigma}{d\Omega} \right)_R. \quad (2.13)$$

В дальнейшем будем обозначать символом  $\left( \frac{d\sigma}{d\Omega} \right)_R$  резерфордское сечение, соответствующее рассеянию частицы с зарядом  $Z_a$  на единичном точечном заряде ( $Z=1$ ):

$$\left( \frac{d\sigma}{d\Omega} \right)_R \equiv \frac{4\mu^2 Z_a^2 e^4}{\hbar^4 q^4} = \frac{Z_a^2 e^4}{16E^2 \sin^4 \frac{\vartheta}{2}}. \quad (2.14)$$

В этих обозначениях дифференциальное сечение упругого рассеяния частицы  $a$  атомом принимает вид

$$\left( \frac{d\sigma}{d\Omega} \right)_{упр} = Z^2 \left( \frac{d\sigma}{d\Omega} \right)_R |1 - \mathcal{F}_{эл}(\mathbf{q})|^2. \quad (2.15)$$

Из полученной формулы видно, что при больших значениях передаваемого импульса  $q \gg 1/a$ , т. е. при отклонении частицы на большие углы, рассеянная частица не чувствует электронной обо-

лочку атома и рассеивается как на голом ядре. Наоборот, при  $q \ll 1/a$  (предельно малые углы рассеяния) электронная оболочка экранирует ядро и сечение рассеяния оказывается существенно меньше резерфордского.

В борновском приближении дифференциальное сечение неупругого рассеяния  $a + A \rightarrow a' + A_n^*$  рассчитывается аналогично тому, как это было сделано выше для случая упругого рассеяния, и для каждого парциального перехода  $|0\rangle \rightarrow |n\rangle$  выражается через так называемый *формфактор перехода*, или *неупругий формфактор*,  $\mathcal{F}_{0 \rightarrow n}(\mathbf{q})$ :

$$\frac{d\sigma_n}{d\Omega} = \frac{k'}{k} \left( \frac{d\sigma}{d\Omega} \right)_R |\mathcal{F}_{0 \rightarrow n}(\mathbf{q})|^2, \quad (2.16)$$

$$\mathcal{F}_{0 \rightarrow n}(\mathbf{q}) = \langle n | \sum_{j=1}^Z e^{i\mathbf{q}\mathbf{r}_j} | 0 \rangle. \quad (2.17)$$

Заметим, что если энергия падающих частиц много больше энергии возбуждения атома, то входящий в (2.16) кинематический множитель  $k'/k$  практически не отличается от единицы:

$$\frac{k'}{k} = \sqrt{1 - \frac{\varepsilon_n - \varepsilon_0}{E}} \rightarrow 1. \quad (2.18)$$

Итак, теперь у нас есть необходимые заготовки из квантовой теории столкновений, чтобы продолжить квантовомеханическое рассмотрение ионизационного торможения быстрых заряженных частиц. Приступим к вычислению эффективного торможения

$$S(E) = \sum_n (\varepsilon_n - \varepsilon_0) \sigma_n, \quad (2.19)$$

для чего вычислим сначала интегральные парциальные сечения неупругого рассеяния

$$\sigma_n = \int \frac{d\sigma_n}{d\Omega} d\Omega. \quad (2.20)$$

Поскольку при  $\frac{k'}{k} \rightarrow 1$  дифференциальное сечение  $\frac{d\sigma_n}{d\Omega}$  зависит

только от одной кинетической переменной  $q$ , то в (2.20) удобно перейти от интегрирования по углу рассеяния  $\vartheta$  к интегрированию по  $q$ . При изменении угла рассеяния  $\vartheta$  от нуля до  $\pi$  передаваемый импульс меняется от  $q_{\min} = k - k'$  до  $q_{\max} = k + k'$  по закону (см. рис. 2.1)

$$q^2 = k^2 + k'^2 - 2kk' \cos \vartheta. \quad (2.21)$$

Учтем закон сохранения энергии

$$E - E' = \varepsilon_n - \varepsilon_0, \quad (2.22)$$



а также малость энергии возбуждения по сравнению с энергией падающих частиц

$$E - E' \ll E. \quad (2.23)$$

Тогда с хорошей точностью имеем

$$q_{\min} = \frac{k^2 - k'^2}{k + k'} \approx \frac{\varepsilon_n - \varepsilon_0}{\hbar v_a}; \quad q_{\max} \approx 2k. \quad (2.24)$$

Кроме того, с учетом (2.21)

$$d\Omega = 2\pi \sin \vartheta d\vartheta = 2\pi \frac{qdq}{kk'} \approx \frac{2\pi qdq}{k^2}. \quad (2.25)$$

Таким образом, парциальные сечения  $\sigma_n$  можно вычислить по формуле

$$\sigma_n = \frac{2\pi}{k^2} \int_{q_{\min}}^{q_{\max}} \frac{d\sigma_n}{d\Omega} qdq. \quad (2.26)$$

Подставим это выражение в (2.19), взяв при этом  $\frac{d\sigma_n}{d\Omega}$  из

$$(2.16) \left( \frac{k'}{k} \rightarrow 1 \right):$$

$$\begin{aligned} S(E) &= \frac{2\pi}{k^2} \sum_n (\varepsilon_n - \varepsilon_0) \int_{q_{\min}}^{q_{\max}} \frac{d\sigma_n}{d\Omega} qdq = \\ &= \frac{2\pi}{k^2} \frac{4\mu^2 Z_a^2 e^4}{\hbar^4} \sum_n (\varepsilon_n - \varepsilon_0) \int_{q_{\min}}^{q_{\max}} \left| \langle n \left| \sum_{j=1}^Z e^{iqr_j} \right| 0 \rangle \right|^2 \frac{qdq}{q^4}. \end{aligned} \quad (2.27)$$

В квантовой механике атома доказывается формула

$$\sum_n (\varepsilon_n - \varepsilon_0) \left| \langle n \left| \sum_{j=1}^Z e^{iqr_j} \right| 0 \rangle \right|^2 = Z \frac{\hbar^2 q^2}{2m_e}, \quad (2.28)$$

с помощью которой бесконечная сумма по всем возбужденным состояниям атома точно сводится к простому аналитическому выражению. К сожалению, мы не можем применить ее прямо к (2.27), так как нижний предел интегрирования  $q_{\min}$  сам зависит от  $n$  (см. (2.24)). Поэтому заменим в (2.27) нижний предел его средним значением:

$$q_{\min} \rightarrow \bar{q}_{\min} = \frac{(\varepsilon_n - \varepsilon_0)}{\hbar v_a} \equiv \frac{I}{\hbar v_a}. \quad (2.29)$$

Теперь можно переставить в (2.27) порядок суммирования и интегрирования. В результате получаем

$$\begin{aligned} S(E) &= \frac{2\pi}{k^2} \frac{4\mu^2 Z_a^2 e^4}{\hbar^4} \int_{q_{\min}}^{q_{\max}} \frac{dq}{q^3} \sum_n (\varepsilon_n - \varepsilon_0) \left| \langle n \left| \sum_{j=1}^Z e^{iqr_j} \right| 0 \rangle \right|^2 = \\ &= \frac{4\pi Z_a^2 e^4 Z}{m_e v_a^2} \ln \frac{q_{\max} \hbar v_a}{I}. \end{aligned} \quad (2.30)$$

Сюда входит параметр  $I$  — средняя энергия возбуждения атома пролетающей частицей. Последовательный расчет этой величины мы выполним в § 3.2, там и будет получена следующая формула, выражающая  $I$  через силы осцилляторов переходов  $f_{n0}$ :

$$\ln I = \frac{1}{Z} \sum_n f_{n0} \ln (\varepsilon_n - \varepsilon_0). \quad (2.31)$$

Для атома водорода, например, по этой формуле получаем  $I = 14,9$  эВ. Это больше, чем потенциал ионизации  $I_{\text{иониз}} = 13,6$  эВ. Таким образом, действительно, как отмечалось в § 1.1, главный вклад в торможение частицы дает ионизация атома, а не возбуждение его дискретных уровней.

Вернемся к полученному выше выражению (2.30) для эффективного торможения, где у нас остался нераскрытым символ  $q_{\max}$ . Формально  $q_{\max} = 2k$ , это значение достигается, когда падающая частица «отскакивает» от атома строго назад. Однако такое может произойти крайне редко, да и то лишь тогда, когда наша падающая тяжелая частица взаимодействует тоже с тяжелой частицей — ядром атома. Нас же сейчас интересует процесс возбуждения или ионизации атома, когда энергия передается от падающей частицы непосредственно атомному электрону. Поэтому фактически  $q_{\max}$  в (2.30) определяется кинематикой столкновения тяжелой частицы с электроном.

Если бы этот электрон до столкновения покоился, то из кинематики упругого столкновения  $a + e \rightarrow a + e$  можно было бы легко рассчитать максимальный импульс электрона после столкновения: с хорошей точностью он равняется  $2m_e v_a$ , где  $v_a$  — скорость налетающей частицы. В наших условиях (вспомним соотношение (1.27)) величина  $2m_e v_a$  значительно больше, чем средний импульс электрона в атоме до взаимодействия с ним тяжелой частицы. Значит, движением электрона в атоме можно пренебречь и воспользоваться полученной величиной для оценки максимального импульса, передаваемого падающей частицей атомному электрону:

$$\hbar q_{\max} \approx 2m_e v_a. \quad (2.32)$$

Теперь остается подставить (2.32) в (2.30):

$$S(E) = \frac{4\pi Z_a^2 e^4 Z}{m_e v_a^2} \ln \frac{2m_e v_a^2}{I}. \quad (2.33)$$

Умножим это выражение на плотность числа атомов в веществе и получим тормозную способность вещества:

$$\left(-\frac{dE}{dx}\right) = \frac{4\pi Z_a^2 e^4}{m_e v_a^3} Z n_0 \cdot \ln \frac{2m_e v_a^2}{I} \quad (2.34)$$

основная зависимость от скорости частицы

слабая зависимость от свойств среды

основная зависимость от свойств среды

Эта окончательная формула, полученная в рамках квантового подхода, повторяет в главных чертах формулу (1.41). Можно считать, что тем самым оправдывается использованный при выводе формулы (1.41) классический подход. Вместе с тем здесь мы продвинулись несколько дальше, сняв оставшиеся в § 2.1 неопределенности, касавшиеся логарифмического фактора, и раскрыв физический смысл входящих в него параметров.

На рис. 2.2 приведены данные для тормозной способности графита и свинца по отношению к протонам и  $\alpha$ -частицам. Хорошо видно, что экспериментально установленная зависимость тормозной способности от скорости (энергии) частиц, если ее рассматри-

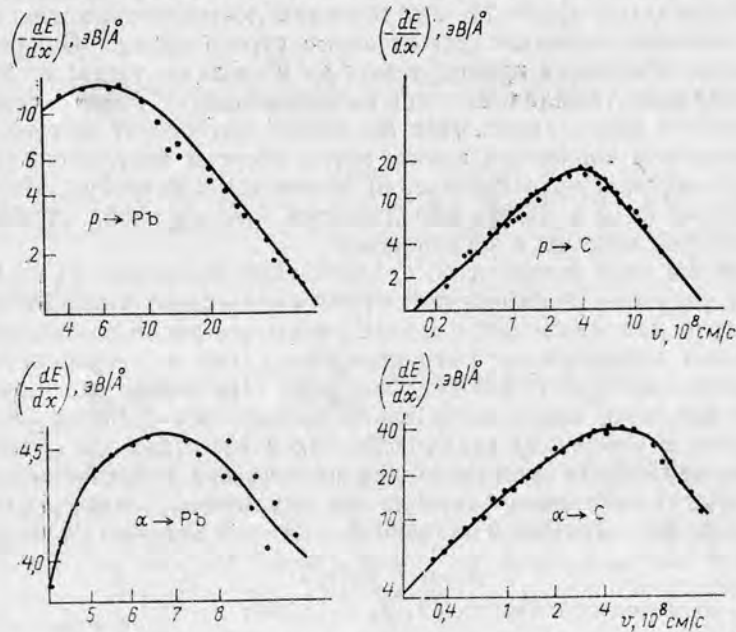


Рис. 2.2. Тормозная способность графита и свинца по отношению к протонам и  $\alpha$ -частицам [по: Готт Ю. В. Взаимодействие частиц с веществом в плазменных исследованиях. М.: Атомиздат, 1978]

вать во всем представленном здесь интервале изменения этих переменных, гораздо сложнее той, что дает наша формула (2.34). В следующей лекции мы обсудим разные поправки к ней, а пока заметим, что на значительном участке кривой  $\left(-\frac{dE}{dx}\right)$ , который соответствует энергии протона примерно от сотни кэВ до сотни МэВ, неплохо выполняется простой закон  $\left(-\frac{dE}{dx}\right) \sim \frac{1}{v_a^2}$ , и поэтому мы будем пользоваться им для качественных оценок.

## § 2.2. ВРЕМЯ ЗАМЕДЛЕНИЯ И ПРОБЕГИ ЧАСТИЦ В ВЕЩЕСТВЕ

Растративая свою энергию на возбуждение и ионизацию атомов среды, попавшая в нее быстрая частица замедляется и в конце концов «останавливается», т. е. включается в тепловое движение атомов среды. Как скоро это происходит?

Обратимся к формуле (2.34). Учитывая, что  $dE = m_a v_a dv_a$  и  $dx = v_a dt$ , запишем ее в эквивалентной форме

$$-\frac{dv_a}{dt} = \frac{4\pi Z_a^2 e^4}{m_a m_e v_a^2} Z n_0 \ln \frac{2m_e v_a^2}{I} \quad (2.35)$$

откуда для времени замедления от начальной скорости  $v_{нач}$  до некоторой скорости  $v$  получаем

$$t(v_{нач} \rightarrow v) = \int_{v_{нач}}^v \left[ -\frac{m_a m_e v_a^2}{4\pi Z_a^2 e^4 Z n_0 \ln(2m_e v_a^2/I)} \right] dv_a \quad (2.36)$$

Это время прямо пропорционально массе  $m_a$  и обратно пропорционально квадрату заряда частицы  $Z_a$ . Если пренебречь тем, что скорость частицы входит в подынтегральное выражение не только как  $v_a^2$ , но и под логарифм, то интеграл (2.36) легко берется и выявляется характер зависимости времени замедления от начальной скорости частицы  $t \sim (v_{нач}^3 - v^3)$ . Полученный результат находится в полном соответствии с тем, что дает и формула (2.34) для тормозной способности. А именно: процесс торможения идет тем быстрее, чем меньше скорость частицы. В этой связи обратим внимание на то, что последние этапы торможения совершаются настолько быстро, что дают пренебрежимо малый вклад в полное время замедления. Поэтому можно упростить понятие времени замедления быстрой частицы в веществе и вычислять его как время, в течение которого скорость частицы падает от начальной  $v_{нач}$  до нулевой. Тогда согласно (2.36) имеем

$$t(v_{нач}) \sim \frac{m_a}{Z_a^2 Z n_0} v_{нач}^3 \sim \frac{E^{3/2}}{\sqrt{m_a Z_a^2 Z n_0}} \quad (2.37)$$

т. е. время замедления частицы примерно пропорционально кубу ее скорости (энергии в степени 3/2). Конечно, эти оценки разумны лишь тогда, когда начальная скорость частицы попадает на спадающий участок кривой  $(-\frac{dE}{dx})$ , и лишь в той мере, в какой справедлив закон  $1/v_a^2$ .

Получим аналогичные полуколичественные оценки и для пробегов частиц:

$$R(E) = \int_0^R dx = \int_0^E \frac{dE'}{(-\frac{dE}{dx})_{E'}} = \int_0^{v_{нач}} \frac{m_e v_a^2 m_a v_a d v_a}{4\pi Z_a^2 e^4 Z n_0 \ln(2m_e v_0^2/I)}. \quad (2.38)$$

При любой начальной скорости  $v_{нач}$  полный пробег частицы  $R$ , как и время ее замедления  $t$ , пропорционален массе частицы и обратно пропорционален квадрату ее заряда. На участке  $1/v_a^2$  выявляется аналитическая зависимость пробега от начальной скорости частицы (начальной энергии)

$$R \sim \frac{m_a v_{нач}^4}{Z_a^2 Z n_0} \sim \frac{E^2}{m_a Z_a^2 Z n_0}. \quad (2.39)$$

Рассмотрим небольшой пример. Согласно формуле (2.39) пробег протонов и  $\alpha$ -частиц одинаковой начальной энергии в одном и том же веществе должен различаться в 16 раз. Сравним это с тем, что дает эксперимент: в алюминии пробег протонов энергии 10 МэВ составляет 630 мкм (0,6 мм), пробег  $\alpha$ -частиц той же энергии — 61 мкм; их отношение не 16, но не так уж сильно отличается от этой цифры.

Наглядное представление о прохождении заряженных частиц через вещество дают так называемые *кривые Брэгга*, показывающие, как распределена удельная ионизация, производимая частицей, по траектории («следу») ее движения (рис. 2.3). В соответствии с формулой (2.34) в начале следа, пока частица еще не потеряла своей скорости, удельная ионизация невелика и медленно монотонно растет по мере замедления частицы. К концу пробега удельная ионизация резко возрастает и, наконец, в самом конце быстро падает до нуля.

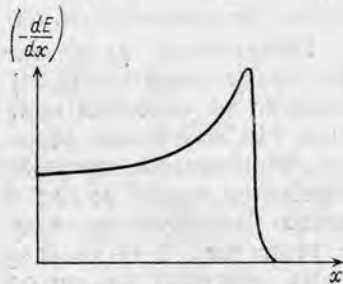


Рис. 2.3. Удельная ионизация, производимая частицей по мере прохождения через вещество («кривая Брэгга»)

### § 2.3. ВЫЧИСЛЕНИЕ СРЕДНЕГО УГЛА МНОГОКРАТНОГО РАССЕЯНИЯ

Согласно формуле (1.21) для вычисления среднего угла многократного рассеяния  $\Theta = \sqrt{\langle \Theta^2 \rangle}$  надо знать дифференциальное сечение рассеяния частицы атомов вещества. Упругое и неупругое рассеяние дают аддитивные вклады в  $\langle \Theta^2 \rangle$ :

$$\langle \Theta^2 \rangle = n_0 x \int \vartheta^2 \left[ \left( \frac{d\sigma}{d\Omega} \right)_{упр} + \left( \frac{d\sigma}{d\Omega} \right)_{неупр} \right] d\Omega. \quad (2.40)$$

Выясним, в каком отношении друг к другу находятся эти вклады. Начнем с неупругого рассеяния. В борновском приближении дифференциальное сечение неупругого рассеяния быстрой частицы атомом дается формулами (2.16), (2.17):

$$\left( \frac{d\sigma}{d\Omega} \right)_{неупр} \approx \left( \frac{d\sigma}{d\Omega} \right)_R \sum_{n \neq 0} \left| \langle n \left| \sum_{j=1}^Z e^{iqr_j} \right| 0 \rangle \right|^2 \quad (2.41)$$

(здесь мы положили  $k'/k = 1$ ). „Размеры“ атомных волновых функций, в обкладках [которых вычисляется матричный элемент  $\langle n | \sum e^{iqr_j} | 0 \rangle$ , порядка атомной длины  $a$ . Это определяет две предельные области углов рассеяния, или, что по существу то же, передаваемого импульса  $q$ :

$$q \ll \frac{1}{a}; \quad q \gg \frac{1}{a}. \quad (2.42)$$

В первом случае во всей внутренней области атома показатель экспоненты мал и при вычислении матричных элементов можно воспользоваться разложением экспоненты в ряд Тейлора

$$\begin{aligned} \langle n \left| \sum_{j=1}^Z e^{iqr_j} \right| 0 \rangle &= \langle n \left| \sum_j (1 + iqr_j + \dots) \right| 0 \rangle = \\ &= iq \langle n \left| \sum_j r_j \right| 0 \rangle = iq \langle n \left| \sum_j x_j \right| 0 \rangle. \end{aligned} \quad (2.43)$$

И далее

$$\begin{aligned} \sum_{n \neq 0} \left| \langle n \left| \sum_j e^{iqr_j} \right| 0 \rangle \right|^2 &\approx q^2 \sum_{n \neq 0} \left| \langle n \left| \sum_j x_j \right| 0 \rangle \right|^2 = \\ &= q^2 \langle 0 \left| \sum_{j,j'} x_j x_{j'} \right| 0 \rangle = q^2 \langle 0 \left| \sum_j x_j^2 \right| 0 \rangle \sim Zq^2 a^2. \end{aligned} \quad (2.44)$$

Итак, для оценки дифференциального сечения неупругого рассеяния в области малых передаваемых импульсов мы получаем

$$\left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right)_{\text{неупр}} \Big|_{q \ll \frac{1}{a}} \approx \left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right)_R Zq^2 a_0 \sim \frac{Z}{q^2}. \quad (2.45)$$

Переходя к области больших передаваемых импульсов ( $q \gg 1/a$ ), воспользуемся свойствами полноты атомных волновых функций (1.5):

$$\sum_{j \neq 0} |\langle \sum_j e^{iqr_j} | \psi \rangle|^2 = \langle \sum_j e^{iqr_j} | \psi \rangle \langle \sum_j e^{-iqr_j} | \psi \rangle = \langle \sum_j e^{iqr_j} | \psi \rangle \langle \sum_j e^{iqr_j} | \psi \rangle^* \rightarrow Z + \langle \sum_{j \neq 0} e^{iq(r_j - r_j')} | \psi \rangle \rightarrow Z. \quad (2.46)$$

Перечеркнутые слагаемые мы отбросили ввиду того, что при  $q \gg 1/a$  входящие в них экспоненты очень сильно осциллируют. Тогда, подставив (2.46) в (2.41), мы получаем, что при больших передаваемых импульсах неупругое рассеяние быстрой частицы на атоме эквивалентно ее рассеянию на  $Z$  свободных электронов:

$$\left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right)_{\text{неупр}} \Big|_{q \gg \frac{1}{a}} \approx Z \left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right)_R \sim \frac{Z}{q^4}. \quad (2.47)$$

Заметим, что дифференциальное сечение  $\left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right)_{\text{неупр}}$  пропорционально атомному номеру  $Z$  в обоих предельных случаях:  $q \ll 1/a$  и  $q \gg 1/a$ .

Теперь обратимся к упругому рассеянию:

$$\left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right)_{\text{упр}} = Z^2 \left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right)_R |1 - \mathcal{F}_{\text{эл}}(q)|^2. \quad (2.48)$$

Из общей формулы (2.10) видно, что при малых передаваемых импульсах формфактор  $\mathcal{F}_{\text{эл}}(q)$  выражается через среднеквадратичный радиус электронной оболочки атома

$$\mathcal{F}_{\text{эл}}(q) \Big|_{q \ll \frac{1}{a}} \approx 1 - \frac{1}{6} q^2 \langle r^2 \rangle + \dots \quad (2.49)$$

Подставляя это выражение в (2.48), получаем

$$\left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right)_{\text{упр}} \Big|_{q \ll \frac{1}{a}} \approx \frac{Z^2}{36} \left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right)_R q^4 \langle r^2 \rangle^2. \quad (2.50)$$

Учитывая, что Резерфордское сечение  $\left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right)_R$  пропорционально  $1/q^4$ , видим, что при  $q \rightarrow 0$  сечение упругого рассеяния быстрой заряженной частицы атомом среды выходит на константу.

В § 2.1 мы выяснили, что при  $q \gg 1/a$  формфактор электронной оболочки «вымирает» и, следовательно, упругое рассеяние частицы атомом происходит в таком случае исключительно за счет ее взаимодействия с атомным ядром:

$$\left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right)_{\text{упр}} \Big|_{q \gg \frac{1}{a}} \approx Z^2 \left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right)_R, \quad (2.51)$$

причем, в отличие от (2.45) и (2.47), сечение (2.57) пропорционально не  $Z$ , а  $Z^2$ .

Подставим полученные результаты в (2.40), заменив при этом переменную интегрирования:  $\vartheta \rightarrow q \approx k\vartheta$ :

$$\langle \Theta^2 \rangle = n_0 x \int \frac{q^2}{k^2} \left[ \left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right)_{\text{упр}} + \left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right)_{\text{неупр}} \right] \frac{2\pi q dq}{k^2}. \quad (2.52)$$

Теперь хорошо видно, что определяющий вклад в интеграл дает упругое рассеяние с большими передаваемыми импульсами. Поэтому опустим в (2.52) второе слагаемое, а в первое подставим приближенное выражение (2.51). В итоге получаем

$$\langle \Theta^2 \rangle = n_0 x \frac{8\pi m_a^2 Z^2 Z^2 e^4}{\hbar^4 k^4} \int_{1/a}^{q_{\text{max}}} \frac{q^2 dq}{q^4} = n_0 x \frac{8\pi m_a^2 Z^2 Z^2 e^4}{(\hbar k)^4} \ln q_{\text{max}} a. \quad (2.53)$$

Величина  $q_{\text{max}}$  была оценена раньше (см. соотношение (2.32)).

По определению, средний угол многократного рассеяния вычисляется согласно формуле

$$\Theta = \sqrt{\langle \Theta^2 \rangle}. \quad (2.54)$$

Выделим в  $\Theta$  основную зависимость от энергии частицы  $E$ , ее заряда  $Z_a$ , а также от параметров среды:

$$\Theta \sim \frac{Z_a Z}{E} \sqrt{n_0 x}. \quad (2.55)$$

#### § 2.4. СТРЕГГЛИНГ. ФЛУКТУАЦИИ ИОНИЗАЦИОННЫХ ПОТЕРЬ

Статистический характер столкновений частиц с атомами среды проявляется не только в угловом разбросе проходящего пучка, но также в разбросе полных пробегов отдельных частиц и в разбросе величины ионизационных потерь в заданном слое вещества. Первое из этих явлений носит название *стрегглинга* (straggling). Из рис. 2.4 видно, что пробег, о котором шла речь в § 2.2, — это в действительности средний пробег пучка частиц. Распределение пробегов отдельных частиц вокруг среднего значения  $\langle R \rangle$  неплохо следует закону Гаусса:

$$P(R) dR = \frac{1}{\sqrt{2\pi \langle (\Delta R)^2 \rangle}} \exp \left\{ -\frac{(R - \langle R \rangle)^2}{2 \langle (\Delta R)^2 \rangle} \right\} dR, \quad (2.56)$$

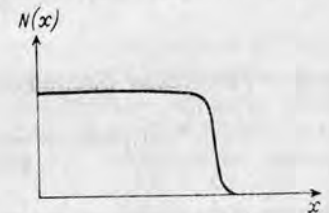


Рис. 2.4. Разброс пробегов частиц заданной начальной энергии ( $N(x)$  — интенсивность пучка по прохождении слоя  $x$ )

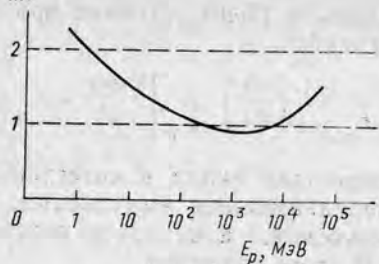
$$\frac{\sqrt{\langle(\Delta R)^2\rangle}}{\langle R \rangle}, \%$$


Рис. 2.5. Стреглинг для протонов в алюминии в зависимости от начальной энергии частиц

Таблица 2.1

Величина стреглинга  $\sqrt{\langle(\Delta R)^2\rangle}/\langle R \rangle$  для протонов с энергией 20 МэВ в различных средах, %

Be	Al	Cu	Pb
1,3	1,5	1,6	1,8

где  $\langle(\Delta R)^2\rangle = \langle(R - \langle R \rangle)^2\rangle$  — дисперсия этого распределения. Относительная величина стреглинга  $\sqrt{\langle(\Delta R)^2\rangle}/\langle R \rangle$  для различных быстрых тяжелых частиц и различных сред невелика — от десятых долей до одного-двух процентов (табл. 2.1). Ее зависимость от начальной энергии части коррелирует с энергетической зависимостью тормозной способности вещества, т. е. примерно до минимума кривой  $(-\frac{dE}{dx})$

величина  $\sqrt{\langle(\Delta R)^2\rangle}/\langle R \rangle$  медленно падает с увеличением энергии частицы, а дальше медленно растет (рис. 2.5). Относительный разброс пробегов при одной и той же энергии у  $\alpha$ -частиц меньше, чем у протонов; это эффект массы частицы.

Перейдем к вопросу о флуктуациях ионизационных потерь в заданном слое вещества; этот вопрос имеет важное значение для теории детекторов заряженных частиц.

Если выбранный нами слой  $\Delta x$  достаточно толст, так что частица в состоянии испытать в нем большое число неупругих столкновений, то оказывается, что разброс потерь ее энергии вокруг среднего значения

$$\langle \Delta E \rangle = \left( -\frac{dE}{dx} \right) \Delta x \quad (2.57)$$

следует гауссову распределению

$$P(\Delta E) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma} \exp \left\{ -\frac{(\Delta E - \langle \Delta E \rangle)^2}{2\sigma^2} \right\}. \quad (2.58)$$

Величину дисперсии этого распределения  $\sigma^2$  можно оценить следующим образом. Максимальная энергия, потерянная частицей со скоростью  $v_a$  в одном столкновении, определяется максимальным переданным импульсом  $q_{\max}$  (см. (2.32)):

$$\epsilon_{\max} = \frac{(h q_{\max})^2}{2m_e} = 2m_e v_a^2. \quad (2.59)$$

Эта величина задает порядок величины для средней энергии частицы, которую она теряет в одном столкновении:  $\langle \epsilon \rangle \sim m_e v_a^2$ . Поделим на нее среднюю энергию (2.57) и получим величину порядка среднего числа неупругих столкновений в слое  $\Delta x$ :

$$\bar{N}(\Delta x) \sim \frac{\langle \Delta E \rangle}{\langle \epsilon \rangle} \approx \frac{4\pi Z_a^2 e^4}{(m_e v_a^2)} Z n_0 \Delta x \quad (2.60)$$

(не стремясь к количественной точности оценок, мы опустили здесь входящий в  $(-\frac{dE}{dx})$  логарифмический множитель). Корень из (2.60) дает среднеквадратичное отклонение числа неупругих столкновений от среднего

$$\Delta \bar{N} = \sqrt{\bar{N}} \sim \frac{2\sqrt{\pi} Z_a e^2}{m_e v_a^2} \sqrt{Z n_0 \Delta x}. \quad (2.61)$$

Отсюда получаем примерную величину среднеквадратичного отклонения от среднего для энергии, потерянной частицей в слое  $\Delta x$ :

$$\sigma \sim \Delta \bar{N} \langle \epsilon \rangle \approx 2\sqrt{\pi} Z_a e^2 \sqrt{Z n_0 \Delta x}. \quad (2.62)$$

Мы рассмотрели случай толстого слоя. Если же слой  $\Delta x$  настолько тонок, что среднее число неупругих столкновений частицы в нем невелико, то флуктуации ионизационных потерь уже не подчиняются закону Гаусса (2.58). Распределение  $P(\Delta E)$  в этом случае не симметрично относительно  $\langle \Delta E \rangle$ , оно близко к распределению Пуассона.

### Лекция 3

#### § 3.1. «ДИЭЛЕКТРИЧЕСКАЯ ТЕОРИЯ» ИОНИЗАЦИОННОГО ТОРМОЖЕНИЯ

При рассмотрении прохождения частицы через плотные среды предположение о ее независимых парных столкновениях с отдельными атомами вещества оказывается слишком грубым. Одним из эффектов, которые не учитываются в этом приближении, является эффект поляризации атомов среды под действием электрического поля пролетающей заряженной частицы. Поляризация среды ослабляет действие электрического поля частицы на атомные электроны, и энергия, передаваемая им от частицы, а следовательно, и тормозная способность вещества уменьшаются. Отсюда видно, что механизм торможения заряженных частиц в раз-

личных средах как-то связан с диэлектрическими свойствами вещества. Не случайно в исследованиях ионизационного торможения большое место заняла так называемая «диэлектрическая теория» этого явления. Рассмотрим ее основные положения.

Пусть тяжелая заряженная частица  $a$  движется со скоростью  $v$  ( $v \ll c$ ) в среде с диэлектрической проницаемостью  $\epsilon$ ; закон дисперсии  $\epsilon = \epsilon(\omega)$ , где  $\omega$  — угловая частота электрического поля, будем считать известным. Так, из оптики и атомной физики мы знаем, что в разреженной среде  $\epsilon(\omega)$  подчиняется дисперсионной формуле

$$\epsilon(\omega) = 1 + \frac{4\pi e^2 n_0}{m_e} \sum_v \frac{f_v}{\omega_v^2 - \omega^2 - i\omega\gamma_v}, \quad (3.1)$$

где  $n_0$  — число атомов на единицу объема среды,  $\omega_v$  — собственные частоты атомов среды,  $f_v$  — «веса» (силы осцилляторов) соответствующих переходов,  $\gamma_v$  — коэффициенты затухания собственных колебаний. Потенциал, создаваемый движущейся частицей  $a$ , найдем из общих уравнений электродинамики

$$\Delta\varphi(\mathbf{r}, t) = -4\pi\rho(\mathbf{r}, t), \quad (3.2)$$

где плотность заряда, согласно нашему условию, имеет вид

$$\rho(\mathbf{r}, t) = Z_a e \delta(\mathbf{r} - \mathbf{v}t). \quad (3.3)$$

Легко проверить подстановкой, что решением уравнения (3.2) является

$$\varphi(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{(2\pi)^3} \int \frac{4\pi Z_a e}{k^2} e^{ik(\mathbf{r} - \mathbf{v}t)} d^3k. \quad (3.4)$$

Отсюда видно, что электрическое поле, которое несет с собой частица, можно представить как непрерывную совокупность монохроматических волн, частоты которых рассчитываются по формуле

$$\omega = kv. \quad (3.5)$$

Если бы наша частица  $a$  двигалась в пустоте, то напряженность создаваемого ею электрического поля можно было бы найти по формуле

$$E_0(\mathbf{r}, t) = -\nabla\varphi(\mathbf{r}, t) = -\frac{1}{(2\pi)^3} \int \frac{4\pi Z_a e}{k^2} ike^{ik(\mathbf{r} - \mathbf{v}t)} d^3k. \quad (3.6)$$

При движении частицы в среде с диэлектрической проницаемостью эта формула меняется:

$$E_0(\mathbf{r}, t) \rightarrow \mathbf{E}(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{(2\pi)^3} \int \frac{1}{\epsilon(\omega)} \frac{4\pi Z_a e}{k^2} ike^{ik(\mathbf{r} - \mathbf{v}t)} d^3k. \quad (3.7)$$

Сила торможения, действующая со стороны среды на частицу, есть разностный эффект

$$\begin{aligned} \mathbf{F}(\mathbf{r} = \mathbf{v}t) &= Z_a e \{ \mathbf{E}(\mathbf{r}, t) - \mathbf{E}_0(\mathbf{r}, t) \}_{\mathbf{r} = \mathbf{v}t} = \\ &= -i \frac{1}{(2\pi)^3} \int \frac{4\pi Z_a^2 e^2}{k^2} \mathbf{k} \left( \frac{1}{\epsilon(\omega)} - 1 \right) d^3k. \end{aligned} \quad (3.8)$$

Чтобы упростить этот интеграл, запишем дифференциал в виде  $d^3k = k^2 dk \sin\theta d\theta d\phi$  (где  $\theta$  — угол между векторами  $\mathbf{k}$  и  $\mathbf{v}$ , а  $\phi$  — соответствующий азимутальный угол) и, используя (3.5), выразим  $\omega$  через  $\theta$ :  $\omega = kv \cos\theta$ . Тогда интегрирование по  $\theta$  в пределах  $0 \div 180^\circ$  можно заменить интегрированием по  $\omega$  от  $\omega = kv$  до  $\omega = -kv$ ; при этом  $d\omega = -kv \sin\theta d\theta$ . В результате получаем, что сила  $\mathbf{F}(\mathbf{r} = \mathbf{v}t)$  имеет лишь продольную составляющую относительно направления движения частицы  $\mathbf{v}$ , а ее величина дается выражением

$$F(\mathbf{r} = \mathbf{v}t) = -i \frac{Z_a^2 e^2}{\pi v^2} \int_0^\infty \frac{dk}{k} \int_{-kv}^{kv} \left( \frac{1}{\epsilon(\omega)} - 1 \right) \omega d\omega. \quad (3.9)$$

Для вычисления интеграла (3.9) надо знать диэлектрическую проницаемость среды  $\epsilon(\omega)$  как функцию частоты не только при положительных, но и при отрицательных значениях  $\omega$ , т. е. включая нефизическую область изменения  $\omega$ . Для этого можно воспользоваться известными из оптики общими соотношениями для вещественной и мнимой частей диэлектрической проницаемости  $\epsilon(\omega)$  как аналитической функции  $\omega$ :

$$\text{Re } \epsilon(\omega) = \text{Re } \epsilon(-\omega), \quad (3.10)$$

$$\text{Im } \epsilon(\omega) = -\text{Im } \epsilon(-\omega).$$

С учетом этих соотношений видно, что сила торможения (3.9), или, что то же, тормозная способность вещества  $\left( -\frac{dE}{dx} \right) = |\mathbf{F}(\mathbf{r} = \mathbf{v}t)|$ , определяется исключительно мнимой частью диэлектрической проницаемости:

$$\left( -\frac{dE}{dx} \right) = \frac{Z_a^2 e^2}{\pi v^2} \text{Im} \int_0^\infty \frac{dk}{k} \int_{-kv}^{kv} \frac{\omega d\omega}{\epsilon(\omega)}. \quad (3.11)$$

### § 3.2. ПРИМЕНЕНИЕ «ДИЭЛЕКТРИЧЕСКОЙ ТЕОРИИ»: ИОНИЗАЦИОННОЕ ТОРМОЖЕНИЕ В РАЗРЕЖЕННОМ ГАЗЕ

Вычислим тормозную способность разреженного газа. Из формулы (3.1) видно, что при достаточно малой плотности атомов  $n_0$  диэлектрическая проницаемость  $\epsilon(\omega)$  мало отличается от

единицы. Значит, можно вместо  $1/\epsilon(\omega)$  подставить в (3.11) приближенное выражение

$$\frac{1}{\epsilon(\omega)} \approx 1 - \frac{4\pi e^2 n_0}{m_e} \sum_{\nu} \frac{f_{\nu}}{\omega_{\nu}^2 - \omega^2 - i\omega\gamma_{\nu}}. \quad (3.12)$$

В результате получим

$$\left(-\frac{dE}{dx}\right) \approx \frac{4\pi Z_a^2 e^4 n_0}{m_e v^2} \sum_{\nu} f_{\nu} \int_{\omega_{\nu}/v}^{\infty} \frac{dk}{k}. \quad (3.13)$$

При этом мы воспользовались соотношением

$$\int_{-kv}^{kv} \frac{\omega\gamma}{(\omega_{\nu}^2 - \omega^2)^2 + \omega^2\gamma^2} \omega d\omega \Big|_{\gamma \rightarrow 0} = 0, \text{ если } kv < \omega_{\nu}, \quad (3.14)$$

с помощью которого определяется нижний предел интеграла по переменной  $k$ . Физический смысл этой переменной — импульс, передаваемый атому среды в результате воздействия на него электрического поля движущегося заряда. Формально интеграл  $\int \frac{dk}{k}$  в (3.13) берется от  $k_{\min} = \omega_0/v$  до бесконечности. В действительности (см. § 2.1) импульс, передаваемый атому при неупругом столкновении, ограничен:  $\hbar k_{\max} \approx 2m_e v$ . Подставляя это значение в (3.13), получим

$$\begin{aligned} \left(-\frac{dE}{dx}\right) &= \frac{4\pi Z_a^2 e^4 n_0}{m_e v^2} \sum_{\nu} f_{\nu} \int_{\omega_{\nu}/v}^{2m_e v/\hbar} \frac{dk}{k} = \\ &= \frac{4\pi Z_a^2 e^4 n_0}{m_e v^2} \sum_{\nu} f_{\nu} \ln \frac{2m_e v^2}{\hbar \omega_{\nu}}. \end{aligned} \quad (3.15)$$

Теперь воспользуемся известным из атомной физики «правилом сумм» для сил осцилляторов:

$$\sum_{\nu} f_{\nu} = Z; \quad (3.16)$$

здесь  $Z$  — число электронов в атоме. Определив среднюю энергию возбуждения атома  $I$  соотношением

$$\ln I \equiv \frac{1}{Z} \sum_{\nu} f_{\nu} \ln(\hbar \omega_{\nu}), \quad (3.17)$$

выразим через нее тормозную способность вещества:

$$\left(-\frac{dE}{dx}\right) = \frac{4\pi Z_a^2 e^4}{m_e v^2} Z n_0 \ln \frac{2m_e v^2}{I}. \quad (3.18)$$

Формально (3.18) в точности совпадает с формулой (2.34), которую мы вывели в рамках квантовой теории ионизационного торможения. Правда, входящая в (2.34) величина средней энергии возбуждения атома  $I$  оставалась неопределенной; здесь же она дается соотношением (3.17) и, следовательно, может быть вычислена непосредственно, коль скоро известно распределение сил осцилляторов в атоме среды. Как уже отмечалось в § 2.1, расчеты для разных атомов показывают, что средняя энергия  $I$  всегда выше, чем потенциал ионизации атома.

### § 3.3. ТОРМОЖЕНИЕ ЗАРЯЖЕННОЙ ЧАСТИЦЫ В ВЫРОЖДЕННОМ ЭЛЕКТРОННОМ ГАЗЕ

Задача, к рассмотрению которой мы переходим, является методической, но находит широкое применение в теоретических исследованиях прохождения заряженных частиц через плазму и конденсированные среды. В одном отношении она является полной противоположностью той задачи, что была только что рассмотрена в § 3.2: там мы отвлеклись от всех коллективных эффектов при прохождении частиц через вещество, здесь коллективный механизм торможения ставится на самое видное место.

Из атомной физики известно, что основными характеристиками вырожденного электронного газа являются граница Ферми (задаваемая как предельное значение энергии электрона  $\epsilon_F$  или его импульса  $k_F$ ) и частота коллективных («плазменных») колебаний  $\omega_0$  — «плазменная частота». Обе эти характеристики выражаются через электронную плотность  $n_e$ :

$$k_F = (3\pi^2 n_e)^{1/3}, \quad (3.19)$$

$$\omega_0 = \sqrt{\frac{4\pi e^2 n_e}{m_e}}. \quad (3.20)$$

Для ориентировки заметим, что в металлах средняя электронная плотность  $n_e$  порядка  $10^{23}$  1/см<sup>3</sup>, т. е. в атомных единицах — порядка единицы. Из формул (3.19) и (3.20) следует, что при этом  $k_F$  и  $\omega_0$  тоже порядка нескольких атомных единиц, т. е.  $\epsilon_F$  и  $\omega_0$  — порядка десятка эВ.

Согласно «диэлектрической теории» тормозная способность всякого вещества определяется его диэлектрической проницаемостью. Мы не будем заниматься выводом зависимости  $\epsilon(\omega)$  от параметров, характеризующих состояние электронного газа и проходящую через него заряженную частицу, однако наметим основные моменты получения окончательной формулы. Как было показано в § 3.1, заряженная частица несет с собой как бы «пакет» фотонов, обладающих особыми свойствами по отношению к квантам свободного электромагнитного поля. А именно: их частота  $\omega$  и волновой вектор  $k$  не связаны между собой обычным соотношением  $\omega = kc$ . Это так называемые *виртуальные фотоны*. Для

них, однако, как и для обычных фотонов, выполняется закон сохранения импульса при взаимодействии с электронами среды:

$$\mathbf{k}'_e = \mathbf{k}_e + \mathbf{k}, \quad (3.21)$$

где  $\mathbf{k}_e$  и  $\mathbf{k}'_e$  — начальный и конечный импульсы свободного электрона среды. Отсюда энергия, передаваемая от частицы среде при поглощении электроном с начальным импульсом  $\mathbf{k}_e$  виртуального фотона с волновым вектором  $\mathbf{k}$ , равна

$$\Delta E = \frac{\hbar^2 \mathbf{k}'_e{}^2}{2m_e} - \frac{\hbar^2 \mathbf{k}_e^2}{2m_e} = \frac{\hbar^2}{2m_e} \{ (\mathbf{k}_e + \mathbf{k})^2 - \mathbf{k}_e^2 \} \quad (3.22)$$

(по ходу дела отметим, что поглощение обычного, реального фотона свободным электроном невозможно, так как при этом нельзя одновременно удовлетворить законам сохранения импульса и энергии; см. об этом § 7.1).

Здесь мы должны вспомнить о принципе Паули: в вырожденном электронном газе электрон может перейти из начального состояния  $|\mathbf{k}_e\rangle$  в другое состояние  $|\mathbf{k}'_e\rangle$ , только если это конечное состояние лежит за пределами сферы Ферми, т. е. если  $k'_e > k_F$ . Теперь обратимся к общей формуле диэлектрической проницаемости (3.1). Применяя ее к случаю вырожденного электронного газа, мы заменим спектр собственных частот  $\omega$ , непрерывным набором значений  $\Delta E/\hbar$ , где  $\Delta E$  возьмем из (3.22); число атомов на единицу объема среды  $n_0$  заменим плотностью электронов  $n_e$ , а силы осцилляторов  $f_\nu$  — вероятностями соответствующих одноэлектронных переходов  $f(\mathbf{k}_e \rightarrow \mathbf{k}'_e)$ . При этом суммирование по  $\nu$  заменим интегрированием по всем начальным состояниям электрона, т. е. по всем состояниям внутри сферы Ферми. Учет всех возможных конечных состояний обеспечивается при этом учетом закона сохранения (3.21) и принципа Паули:

$$\epsilon(k, \omega) = 1 + \frac{4\pi e^2 n_e}{m_e} \int \frac{f(\mathbf{k}_e \rightarrow \mathbf{k}_e + \mathbf{k}) d^3 k_e}{\frac{\hbar^2}{4m_e^2} [(\mathbf{k}_e + \mathbf{k})^2 - \mathbf{k}_e^2]^2 - \omega^2 - i\omega\gamma} \Bigg|_{\substack{k_e \leq k_F \\ |\mathbf{k}_e + \mathbf{k}| > k_F}} \quad (3.23)$$

(заметим, что вся комбинация множителей перед интегралом есть не что иное, как квадрат плазменной частицы (3.20)). Далее остается подставить сюда соответствующее выражение для вероятности одноэлектронного перехода  $f(\mathbf{k}_e \rightarrow \mathbf{k}'_e)$  (его дает квантовая электродинамика), выполнить с учетом указанных ограничений интегрирование по  $d^3 k_e$ , а затем полученное выражение для диэлектрической проницаемости  $\epsilon(k, \omega)$  подставить в интеграл (3.11). В общем случае всю эту процедуру интегрирования можно провести только численно. Что же касается аналитических формул, то их можно получить только приближенно, да и то лишь при определенных соотношениях между параметрами задачи.

Так, если скорость пролетающей частицы много больше скорости электрона на поверхности Ферми, т. е.  $v \gg v_F = \hbar k_F/m_e$ , то тормозная способность вырожденного электронного газа вычисляется по формуле

$$\left( -\frac{dE}{dx} \right) = \frac{4\pi Z_a^2 e^4}{m_e v^2} n_e \left\{ \ln \frac{2m_e v^2}{\hbar \omega_0} - \frac{3}{5} \left( \frac{v_F}{v} \right)^2 - \frac{3}{14} \left( \frac{v_F}{v} \right)^4 + \dots \right\}, \quad (3.24)$$

где не выписаны члены более высокого порядка.

Налицо близкое сходство полученного выражения с уже известными нам формулами для тормозной способности вещества. Сравнивая его, например, с (2.34), мы видим, что энергия плазменных колебаний  $\hbar \omega_0$  играет в (3.24) такую же роль, как средняя энергия возбуждения атома  $I$  в формуле (2.34). Выявляется простой физический смысл приведенного результата: быстрая заряженная частица, проходя через вырожденный электронный газ, тормозится за счет возбуждения в нем коллективных плазменных колебаний.

Не будем забывать, что формула (3.24) справедлива лишь при условии  $v \gg v_F$ . Если это условие и не выполняется, будем записывать тормозную способность вырожденного электронного газа в форме, подсказываемой выражением (3.24):

$$\left( -\frac{dE}{dx} \right) = \frac{4\pi Z_a^2 e^4}{m_e v^2} n_e L[n_e, v]. \quad (3.25)$$

Выписав явно в последнем множителе  $L \equiv L[n_e, v]$  аргументы  $n_e$  и  $v$ , мы подчеркиваем, что плотность электронного газа  $n_e$  входит в  $\left( -\frac{dE}{dx} \right)$  не только как тривиальный фактор пропорциональности, но и более сложно — через  $L[n_e, v]$  и, в частности, через плазменную частоту  $\omega_0 = \omega_0(n_e)$ :

$$L[n_e, v] \approx \ln \frac{2m_e v^2}{\hbar \omega_0}. \quad (3.26)$$

Заметим, что зависимость фактора  $L[n_e, v]$  от плотности электронов ослабляет рост тормозной способности вещества с ростом  $n_e$ . Здесь есть прямая связь с так называемым «эффектом плотности», о котором пойдет речь в § 4.1.

#### § 3.4. ПРИБЛИЖЕНИЕ ЛОКАЛЬНОЙ ПЛОТНОСТИ

В среде с неоднородным распределением электронной плотности энергетические потери частицы сильно зависят от траектории ее движения, это особенно ярко проявляется при торможении каналированных частиц в кристаллах (см. § 5.1). Для учета особенностей прохождения заряженных частиц через неоднородные



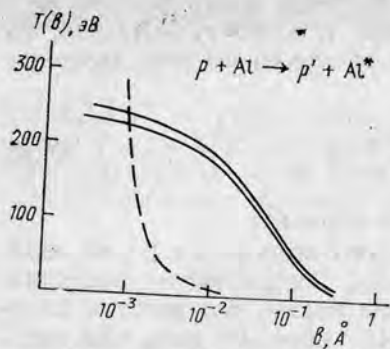


Рис. 3.1. Зависимость от прицельного параметра  $b$  средних ионизационных потерь  $T(b)$  протона с энергией 7 МэВ при рассеянии атомом алюминия — расчет по формуле (3.28) для прямолинейной траектории движения протона [по: Gras-Marti A.//NIM. 1985. Vol. B9. P. 1]. Две сплошные линии — разные варианты выбора формы электронной плотности  $n_e(r)$ ; для ориентировки пунктиром показана потеря энергии протоном при резерфордском рассеянии незранированным ядром атома

среды применяется так называемое «приближение локальной плотности». Оно формулируется следующим образом.

Пусть известно распределение электронной плотности вдоль всей траектории движения частицы в веществе  $n_e = n_e(r)$ . Будем считать, что в окрестности каждой точки  $r$  скорость энергетических потерь частицы определяется исключительно плотностью в этой точке — «локальной плотностью»:

$$\left(-\frac{dE}{dx}\right) = \frac{4\pi Z_a^2 e^4}{m_e v^2} n_e(r) L[n_e(r), v]. \quad (3.27)$$

Тогда потери энергии на любом конечном участке траектории даются интегралом

$$(-\Delta E)_{\Delta s} = \int_{\Delta s} \frac{4\pi Z_a^2 e^4}{m_e v^2} n_e(r) L[n_e(r), v] ds. \quad (3.28)$$

Как видим, приближение локальной плотности по своей сути очень просто. А если принять (как это фактически очень часто и делается), что для  $L[n_e(r), v]$  справедливы формулы теории выржденного электронного газа, то и вся процедура вычисления энергетических потерь оказывается тоже весьма простой. Благодаря этому приближение локальной плотности используется очень широко — даже для вычисления энергетических потерь частицы при столкновении с одиночным атомом. Так, например, поступают при исследовании зависимости этих потерь от прицельного параметра столкновения (рис. 3.1). Надо, однако, иметь в виду, что в теоретическом плане законность этого приближения применительно к разным реальным средам исследована не всегда достаточно полно.

### § 3.5. РЕЛЯТИВИСТСКИЕ ЭФФЕКТЫ; ФОРМУЛА БЕТЕ — БЛОХА

Согласно нерелятивистской теории ионизационного торможения максимальный импульс, который тяжелая частица массы  $m_a \gg m_e$  может передать электрону, равен  $2m_e v$  (см. (2.32)). Релятивистская кинематика дает для этой величины другой результат:

$$(p_e)_{\max} = \frac{2m_e v}{\sqrt{1-\beta^2}}, \quad (3.29)$$

т. е. область интегрирования по передаваемому импульсу при вычислении эффективного торможения  $S(E)$  расширяется по сравнению с тем, что дают формулы (2.27) — (2.33), и учет релятивизма действует в сторону увеличения эффективного торможения в сравнении с предсказаниями нерелятивистской теории. Физической причиной такого увеличения является эффект релятивистского «сжатия» электрического поля пролетающей частицы: в направлении движения частицы поле уменьшается пропорционально фактору  $(1-\beta^2)$ , а в перпендикулярном ему направлении возрастает пропорционально фактору  $\frac{1}{\sqrt{1-\beta^2}}$ , воздействуя, таким

образом, на большее число электронов среды, чем это было бы в случае сферически симметричного поля.

Последовательный учет релятивизма дает для тормозной способности следующий результат:

$$\left(-\frac{dE}{dx}\right) = \frac{4\pi Z_a^2 e^4}{m_e v^2} Z n_0 \left[ \ln \frac{2m_e v^2}{I} + \ln \frac{1}{1-\beta^2} - \beta^2 \right]. \quad (3.30)$$

При  $v \ll c$  эта формула переходит в (2.34), а в релятивистском пределе  $v \rightarrow c$  показывает хотя и медленный, но неограниченный рост тормозной способности. В действительности такой неограни-

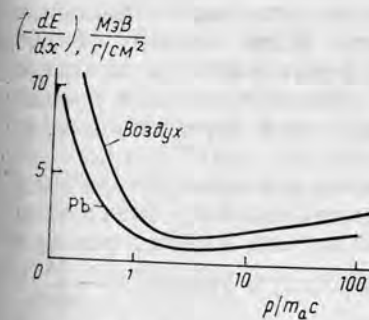


Рис. 3.2. Массовая тормозная способность воздуха и свинца для однозарядных частиц

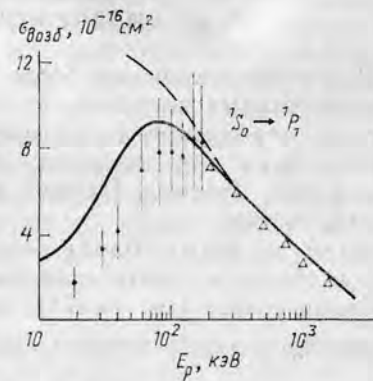


Рис. 4.1. Сечение возбуждения уровня  $2p^6 3s: ^1P_1$  в атоме неона протонным ударом в зависимости от энергии протона [по: Albat R., Gruen N. // J. Phys. 1975. Vol. B8. P. 959]. Сплошная линия — расчет с учетом возмущения электронной оболочки атома в процессе столкновения; пунктирная линия — расчет в борновском приближении

ченный рост не наблюдается: ему препятствует «эффект плотности» — экранировка влияния поля пролетающей частицы на далекие атомы среды, происходящая благодаря поляризации более близких к этой частице атомов. Для учета эффекта плотности в формулу (3.30) вводят еще одну поправку:

$$\left(-\frac{dE}{dx}\right) = \frac{4\pi Z_a^2 e^4}{m_e v^3} Z n_0 \left[ \ln \frac{2m_e v^2}{I} + \ln \frac{1}{1-\beta^2} - \beta^2 - \delta \right]; \quad (3.31)$$

слагаемое  $\delta$ , явная зависимость которого от параметров задается разными авторами по-разному, отражает ограничивающее действие поляризации среды.

В газах этот эффект невелик, и логарифмический рост тормозной способности с энергией наблюдается вплоть до очень больших энергий. В твердых телах и в жидкости, где плотность электронов велика, поляризационный эффект выражен сильнее. Кривая  $\left(-\frac{dE}{dx}\right)$  для конденсированных сред, достигнув минимума приблизительно при  $E = m_e c^2$ , далее поднимается незначительно, практически выходя на плато (рис. 3.2).

Формула (3.31) — основная в теории ионизационного торможения тяжелых быстрых заряженных частиц — называется *формулой Бете — Блоха*.

#### Лекция 4

##### § 4.1. ИОНИЗАЦИОННОЕ ТОРМОЖЕНИЕ МЕДЛЕННЫХ ЧАСТИЦ

В данной лекции мы бегло рассмотрим несколько отдельных дополнительных вопросов, чтобы сделать более полной общую картину механизмов торможения заряженных частиц в веществе и методов их теоретического описания, представленную в предыдущих трех лекциях. Начнем с ионизационного торможения медленных частиц.

Формула Бете — Блоха описывает ионизационные потери частиц, скорость которых превышает среднюю скорость электронов в атомах среды (см. (1.27)). Как видно из рис. 2.2, как раз при скоростях порядка  $\langle v_e \rangle$  находится максимум кривой  $\left(-\frac{dE}{dx}\right)$ .

Уменьшение тормозной способности вещества в сторону меньших скоростей отражает соответствующий ход сечений возбуждения и ионизации атомов в процессах парных нон-атомных столкновений (рис. 4.1). Теоретическое описание таких процессов при малых скоростях ионов требует более сложных методов, чем теория возмущений, на которую мы могли полагаться до сих пор, имея дело с быстрыми частицами. При малых скоростях недостаточно учитывать поле, действующее со стороны налетающей частицы на атом, лишь в низшем порядке теории возмущений, когда за ба-

зисные принимаются волновые функции изолированного атома. Здесь необходимо строить совсем другую систему базисных волновых функций атомных электронов, последовательно учитывающую двухцентровый характер электрического поля тяжелых частиц (ядра атома и налетающей частицы) и изменение его конфигурации во времени по мере сближения и разлета этих частиц. В квантовой теории столкновений соответствующие подходы разработаны, и при использовании современных численных методов они дают хорошие результаты. Разбор этих теоретических методов не входит в нашу задачу; нам важно лишь уяснить, что при скоростях меньше атомных механизм торможения, оставаясь в принципе тем же «ионизационным» (т. е., как и при больших скоростях, энергия частицы идет на возбуждение и ионизацию атомов), переходит в совсем другой режим и характер зависимости торможения от скорости частиц становится противоположным тому, что мы имеем для быстрых частиц. Проследивая мысленно процесс замедления частицы «до конца», мы дойдем до энергий порядка эВ, когда частица уже не может ни ионизовать, ни возбудить атом среды. Дальнейшее замедление таких частиц происходит лишь благодаря упругим столкновениям. Постепенно этот процесс переходит в диффузию, и в конечном счете попавшие в вещество заряженные частицы включаются в общее тепловое движение атомов среды.

Одной из первых теоретических работ о прохождении частиц через вещество заряженных частиц со скоростями меньше атомной была работа Ферми и Теллера (1947), в которой на основе модели ферми-газа был установлен закон зависимости тормозной способности от скорости частицы. Представим себе тяжелую заряженную частицу, движущуюся в вырожденном электронном газе со скоростью  $v$ , много меньшей фермиевской скорости движения электрона в этом газе:  $v \ll v_F$ . Сталкиваясь с электронами, наша частица может передать им часть своей энергии, только если в результате каждой такой передачи конечная скорость электрона окажется больше, чем  $v_F$ ; все состояния внутри сферы Ферми заняты. Таким образом, благодаря принципу Паули из всех электронов, заполняющих сферу Ферми, в торможении проходящей заряженной частицы может участвовать лишь небольшая доля электронов — тем меньшая, чем меньше скорость частицы  $v$ . Для количественных оценок будем пользоваться результатом Ферми и Теллера

$$\left(-\frac{dE}{dx}\right) = \frac{2}{3\pi} \frac{m_e^2 Z_a^2 e^4 v}{h^3} \ln \frac{v_F}{\alpha v}, \quad (4.1)$$

где  $\alpha$  — постоянная тонкой структуры. Как видим, энергетические потери частицы пропорциональны ее скорости и очень слабо зависят от плотности электронного газа.

Приведем еще одну формулу для вычисления ионизационных потерь при малых скоростях частиц, которая выводится в рамках модели Томаса — Ферми:

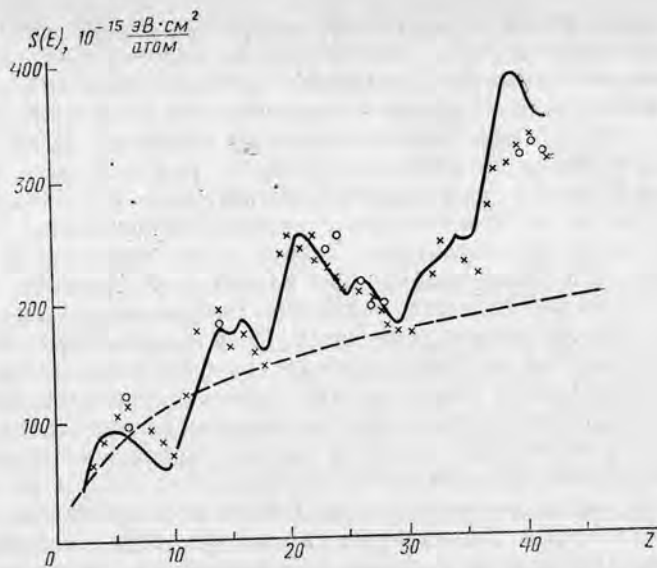


Рис. 4.2. Эффективное торможение ионов  $N^+$  с энергией 800 кэВ в зависимости от атомного номера вещества. Сплошная кривая — феноменологическая подгонка под экспериментальные данные разных групп; пунктирная — расчет по модели Томаса—Ферми [Xia Yue-yuan, Tan Chun-yu/NIM. 1986. Vol. B13. P. 100]

$$\left(-\frac{dE}{dx}\right) = 8\pi e^2 a_0 Z_a^{1/6} \frac{Z_a Z}{(Z_a^{2/3} + Z^{2/3})^{3/2}} n_0 \frac{v}{v_B}; \quad (4.2)$$

здесь  $a_0$  и  $v_B = \alpha c$  — боровский радиус атома и боровская скорость атомного электрона. Как и при описании разных других атомных характеристик, модель Томаса—Ферми, будучи статистической моделью, передает лишь общую тенденцию зависимости тормозной способности от атомного номера вещества. В частности, формула (4.2) скрадывает характерные  $Z$ -осцилляции тормозной способности, установленные на опыте, которые отражают периодичность свойств химических элементов (рис. 4.2).

Приведенные выше формулы описывают кривую ионизационных потерь слева, тогда как формула Бете—Блоха — справа от ее максимума. В области же самого максимума сколько-нибудь последовательное теоретическое описание торможения оказывается очень сложным.

#### § 4.2. КОМПОЗИЦИОННЫЙ ЗАКОН БРЭГГА

Вернемся к формуле Бете—Блоха, описывающей ионизационное торможение быстрых частиц. Как обобщить ее на случай, когда среда, через которую проходит заряженная частица, содержит атомы разного сорта?

Еще в начале века Брэггом был предложен на этот счет простой «композиционный закон» (его называют также правилом Брэгга): если вещество представляет собой химическое соединение  $A_m B_n$  из атомов  $A$  и  $B$ , то его тормозная способность складывается с соответствующими весами из тормозных способностей составляющих его химических элементов:

$$\left(-\frac{dE}{dx}\right)_{A_m B_n} = m \left(-\frac{dE}{dx}\right)_A + n \left(-\frac{dE}{dx}\right)_B. \quad (4.3)$$

Правило Брэгга вытекает из предположения, что химическая связь между атомами в молекулах не влияет на взаимодействие проходящей через вещество частицы с атомными электронами. В действительности это не так, поскольку атомы вещества, образуя молекулы, всегда как-то меняют свои индивидуальные свойства. Можно предположить, что степень нарушения правила Брэгга связана с тем, в каком соотношении друг с другом находятся вклады в торможение от электронов внешних оболочек атомов (участвующих в химической связи) и от электронов внутренних оболочек (слабо чувствующих эту связь). В предыдущих параграфах, в том числе при выводе формул типа формулы Бете—Блоха, обращать на эту сторону дела нам не было нужды, так как в условиях неупорядоченной молекулной среды, когда тормозная способность вещества определяется эффективным торможением отдельного атома, все сводится к средней энергии его возбуждения  $I$ , в которой нивелируются вклады отдельных оболочек. Однако в современных исследованиях вопрос о соотношении вкладов внутренних и внешних оболочек в эффективное торможение вызывает очень большой интерес. Он связан не только с исследованиями торможения частиц в молекулярных средах, но и особенно с вопросом об ионизационных потерях каналированных частиц (см. лекцию 5), механизм которых обладает высокой избирательностью по отношению к вкладу в торможение отдельных атомных оболочек.

Опыт показывает, что для бинарных соединений типа  $A_m B_n$  тормозная способность всегда на несколько процентов меньше, чем это следует из композиционного закона (4.2).

#### § 4.3. ТОРМОЗНАЯ СПОСОБНОСТЬ ВЕЩЕСТВА ДЛЯ ЧАСТИЦ И АНТИЧАСТИЦ. $Z^3$ -ПОПРАВКА К ФОРМУЛЕ БЕТЕ—БЛОХА

В сегодняшней физике, на «стыке» физики элементарных частиц, физики ядра и атомной физики, возникли две крупные комплексные программы: программа мю-катализа ядерного синтеза (см. лекцию 14) и программа исследований с антипротонами низких энергий, в ходе которых заново встали многие вопросы взаимодействия заряженных частиц с веществом. Одним из них является вопрос о том, как соотносятся между собой тормозные способности вещества для частиц и античастиц.

Формула Бете—Блоха, как и вся теория торможения быстрых частиц, с которой мы знакомимся выше, не дает никаких эффектов, зависящих от знака заряда частицы  $Z_a$ . В варианте классической теории (см. § 1.2) эта независимость от знака заряда определяется выбором прямолинейной траектории движения частицы и тем, что мы пренебрегли смещением электрона среды за счет его взаимодействия с частицей. В таких условиях передаваемая электрону энергия  $T_e = \frac{2Z_a^2 e^4}{b^2 m_e v_a^2}$  (см. 1.31)) одна и та же

независимо от того, взаимодействует ли он, например, с антипротоном или с протоном. В варианте квантовой теории (см. § 2.1) независимость тормозной способности от знака заряда обусловлена тем, что в основу рассмотрения была положена теория возмущений — плосковолновое борновское приближение. Итак, отсутствие какого-либо эффекта знака заряда в нашем описании прохождения заряженной частицы через вещество — это результат определенных упрощающих допущений, которые были сделаны выше.

Выйдя за рамки этих допущений, можно сразу обнаружить ряд причин, в силу которых неупругие столкновения частиц и античастиц с атомами вещества становятся неодинаковыми; точнее — даже при одних и тех же начальных параметрах движения протекают неодинаково. Вот некоторые из этих причин: а) кулоновское искривление траектории движения частицы (в сторону от ядра атома для положительно заряженной и в сторону к ядру для отрицательно заряженной частицы); б) эффективное увеличение связи атомных электронов с ядром при тесном сближении с ядром протона или другой положительно заряженной частицы (заряд в центре атома, который «чувствуют» атомные электроны, как бы возрастает на единицу) и аналогичное эффективное ослабление этой связи, когда с ядром сближается отрицательно заряженная частица; в) наличие конкурирующего процесса перезарядки (перехвата атомного электрона) при возбуждении атома положительно заряженной частицей и отсутствие такового в случае отрицательно заряженной частицы. Заметим, что все три названные причины действуют в одну сторону — «в пользу» отрицательно заряженных частиц: сечения возбуждения и ионизации атомов антипротонами  $\bar{p}$ , а также  $\mu^-$ ,  $\pi^-$ -мезонами должны, если верны приведенные соображения, быть больше соответствующих сечений для протонов  $p$ ,  $\mu^-$  и  $\pi^-$ -мезонов.

Как же обстоит дело в действительности? Полной ясности пока нет, поскольку эксперименты должного уровня, которые могли бы дать ответ на этот вопрос, становятся возможными лишь в самое последнее время. Огромный интерес вызвали данные о взаимодействии с атомами антипротонов, полученные пять лет назад в ЦЕРНе с помощью накопителя антипротонов низких энергий (LEAR). Некоторые из этих результатов показаны на рис. 4.3 вместе с ранее известными данными для протонов. Особенно уди-

вительны данные, относящиеся к сечениям двукратной ионизации: для антипротонов эти сечения много больше, чем для протонов.

Для мюонов  $\mu^\pm$  и пионов  $\pi^\pm$  аналогичных данных о сечениях ионизации нет. Однако имеются, хотя и довольно разрозненные, экспериментальные данные, относящиеся непосредственно к характеристикам прохождения этих частиц через вещество. Так, еще в 60-е гг. было установлено, что при средних скоростях частиц ( $\langle v_a \rangle / c \approx 0,5 \div 0,7$ ) тормозная способность вещества для  $\pi^+$ -мезонов несколько выше, чем для  $\pi^-$ -мезонов, а полные пробеги, наоборот, несколько больше для  $\pi^-$ -мезонов, чем для  $\pi^+$ -мезонов. Это, как мы видим, противоположно тому, что наблюдается для сечений ионизации

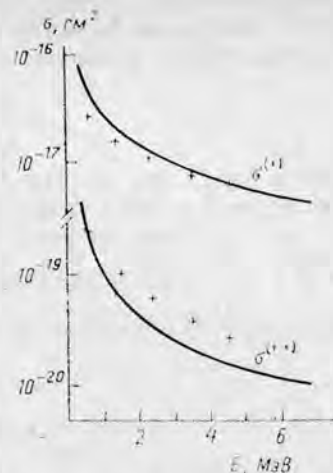


Рис. 4.3. Сечение однократной и двукратной ионизации атомов гелия протонами (сплошные линии) и антипротонами (крестики) [по: Andersen L. H. et al./Phys. Rev. Lett. 1986. Vol. 57. P. 214]

протонами и антипротонами и, казалось бы, опровергает те качественные объяснения эффекта знака заряда, что были приведены выше. Правда, можно привести другие рассуждения, из которых будет следовать, что эффект знака заряда должен проявляться в пользу положительно заряженных частиц. Действительно, положительно заряженная частица, проходя через «газ» электронов вещества, притягивает их к себе, так что на пути движения частицы все время создается область повышенной электронной плотности, а это, по обычным представлениям теории ионизационного торможения, способствует росту энергетических потерь частицы. Для отрицательно заряженной частицы ее поляризующее действие на электроды среды — противоположного знака: частица создает как бы некоторое разрежение электронного газа на пути своего движения, что приводит к ослаблению ее торможения.

Как уже отмечалось выше, полной ясности в том, как сказывается знак заряда частицы на характеристиках ее прохождения через вещество, пока нет. Можно думать, что при переходе от больших скоростей к малым сам эффект знака заряда меняет знак, т. е. систематическое превышение сечений неупругих взаимодействий положительно заряженных частиц над сечениями отрицательно заряженных частиц, ожидаемое при больших скоростях, меняется при переходе к малым скоростям так, что, наоборот, сечения возбуждения и ионизации под действием положительно заряженных частиц становятся меньше соответствующих сечений для отрицательно заряженных частиц.

Обсуждаемый вопрос связан с проблемой о так называемой « $Z^3$ -поправке» к формуле Бете—Блоха. Речь идет об общей формуле (3.31), которую мы запишем сейчас более компактно:

$$\left(-\frac{dE}{dx}\right) = \frac{4\pi Z_a^2 e^4}{m_e v^2} Z n_0 L, \quad (4.4)$$

имея в виду, что фактор  $L$  («ионизационный логарифм») в разных подходах рассчитывается несколько по-разному. Существенно, однако, что во всех этих подходах тормозная способность  $\left(-\frac{dE}{dx}\right)$  всегда оставалась пропорциональной квадрату заряда частицы  $Z_a^2$ . В общем же случае  $L$  записывается в виде

$$L = L_0 + Z_a L_1 + Z_a^2 L_2 + \dots, \quad (4.5)$$

где  $L_0$  — соответствует нашим прежним формулам для  $L$ , а  $L_1$  дает поправку к  $\left(-\frac{dE}{dx}\right)$ , пропорциональную кубу заряда частицы (« $Z^3$ -поправку»). Расчеты разных авторов, проведенные различными методами, показывают, что поправка  $L_1$  положительна. Такой знак  $Z^3$ -поправки согласуется с рассмотренным выше эффектом знака заряда для случая прохождения через вещество быстрых протонов,  $\pi^+$ -пионов и  $\mu^+$ -мюонов ( $Z_a = +1$ ) и антипротонов,  $\pi^-$ -пионов и  $\mu^-$ -мюонов ( $Z_a = -1$ ).

Для проверки изложенных представлений относительно  $Z^3$ -поправки можно воспользоваться экспериментальными данными о тормозной способности различных веществ для протонов и  $\alpha$ -частиц. Согласно изложенному выше, тормозная способность для быстрых  $\alpha$ -частиц  $\left(-\frac{dE}{dx}\right)_\alpha$  должна превышать тормозную способность того же вещества для протонов  $\left(-\frac{dE}{dx}\right)_p$  несколько больше, чем просто в 4 раза, как это следовало бы по формуле Бете—Блоха:

$$\left(-\frac{dE}{dx}\right)_\alpha / \left(-\frac{dE}{dx}\right)_p \Big|_{v_\alpha = v_p} > \frac{Z_\alpha^2}{Z_p^2} = 4. \quad (4.6)$$

Так оно на самом деле и оказывается. На рис. 4.4 приведены экспериментальные данные для мишеней тантала и алюминия. Обратим внимание на монотонное уменьшение  $Z^3$ -поправки с увеличением скорости частицы. В этой связи заметим, что по мере увеличения энергии налетающей частицы для все большего числа электронов в атоме их связь с ядром в процессе столкновения с проходящей частицей становится все менее и менее существенной: частица взаимодействует с ними, словно это свободные электроны. А в этом случае все точнее «работает» формула Резерфорда — со строгой, без каких-либо поправок, зависимостью  $Z_a^2$  для вероятности столкновения. Учитывая, что средняя энергия

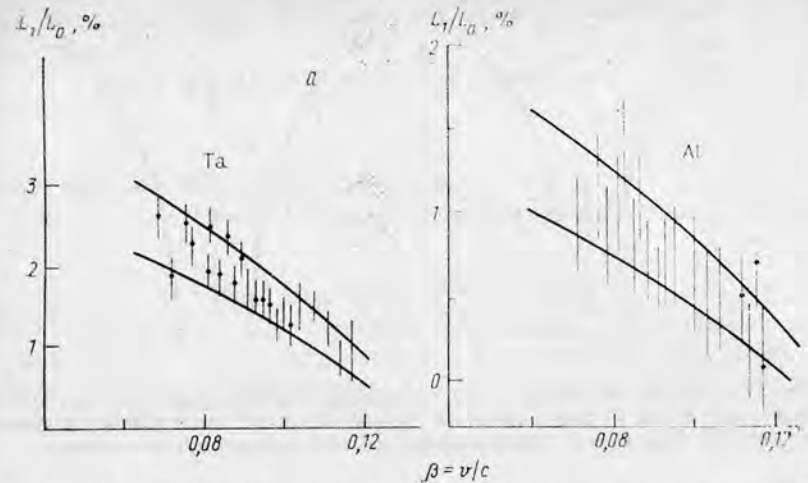


Рис. 4.4. Показатель  $Z^3$ -поправки  $L_1/L_0$  для тантала (а) и алюминия (б) по данным о тормозной способности этих веществ для  $\alpha$ -частиц и протонов. Сплошными линиями показан коридор предсказаний на основе разных вариантов теории ионизационного торможения [по: Ashlay J. C. et al.// Phys. Rev. 1972. Vol. 85. P. 2393]

связи электронов в атоме растет с увеличением атомного номера вещества, на основании этих соображений можно понять, почему, как это показывает на рис. 4.4,  $Z^3$ -поправка растет при переходе от алюминия к более тяжелому элементу тантала.

Обращаясь к (4.5), можно подумать, что  $Z^3$ -поправку легче выявить, сравнивая тормозные способности вещества не для протонов и  $\alpha$ -частиц, а для протонов и каких-то более тяжелых ядер, несущих большой заряд  $Z_a$ . В действительности оказывается, что сделать это непросто: характер прохождения через вещество многозарядных частиц существенно отличается от того, что мы знаем для частиц с малым зарядом, так что прямое применение к ним формул типа Бете—Блоха, даже с поправками (4.5), оказывается невозможным.

#### § 4.4. ПРОХОЖДЕНИЕ ЧЕРЕЗ ВЕЩЕСТВО МНОГОЗАРЯДНЫХ ИОНОВ

Пусть быстрая частица  $a$  с зарядом  $Z_a \gg 1$  идет через вещество. Известные нам процессы возбуждения и ионизации атомов среды при взаимодействии такой частицы с атомными электронами сопровождаются интенсивными процессами перехвата этих электронов. При  $Z_a \gg 1$  всегда найдутся такие состояния системы  $(a+e)$ , переходы в которые (по крайней мере для внешних электронов атомов среды) энергетически выгодны (рис. 4.5). Велика также вероятность «резонансных» процессов ( $\varepsilon_j \approx \varepsilon_i$ ), когда пере-

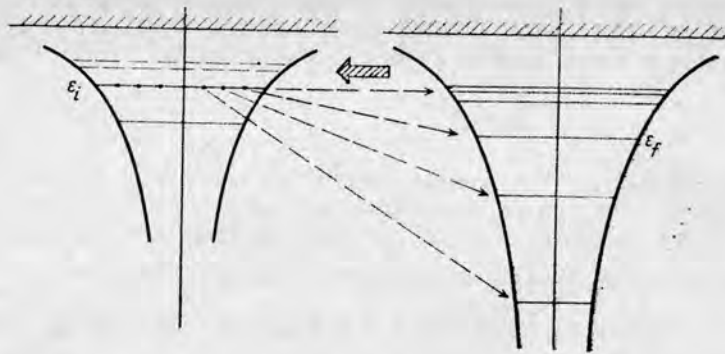


Рис. 4.5. Схема перезарядки при прохождении многозарядного иона через вещество: слева — энергетические уровни внешних электронов в атоме среды, справа — энергетические уровни в системе ион — электрон

хват происходит не в основное или какое-нибудь низколежащее, а в высоковозбужденные состояния системы  $(a+e)$ . Описанный процесс приводит к изменению зарядового состояния пролетающей частицы, и его принято называть *перезарядкой* (*charge exchange*).

Представим себе случай, когда частица  $a$  начинает свое движение в среде как «голый» ион с зарядом  $Z_a$ . Благодаря перезарядке она постепенно обрастает облаком связанных электронов. По мере увеличения числа таких электронов они занимают в поле заряда  $Z_a$  все более протяженные орбиты, и в результате все более существенным становится обратный процесс — потеря проходящим ионом какой-то части приобретенных им электронов (так называемый процесс «обдирки», или стриппинга). Сочетание перехвата и стриппинга придает процессу перезарядки многозарядных ионов динамический характер, и при прохождении пучка таких ионов через вещество мы всегда имеем дело с целым набором разных зарядовых состояний иона.

Пусть величина  $N(Z'_a, x)$  характеризует интенсивность фракции с зарядом  $Z'_a$  в этом составном пучке на расстоянии  $x$  от входа пучка в среду. Распределение различных зарядовых состояний в пучке можно характеризовать весовыми коэффициентами

$$p(Z'_a, x) = \frac{N(Z'_a, x)}{\sum_{Z'_a} N(Z'_a, x)}, \quad (4.7)$$

а через них определить и среднее значение заряда, и дисперсию зарядового распределения:

$$\bar{Z}_a(x) = \sum_{Z'_a} Z'_a \cdot p(Z'_a, x),$$

$$D_{Z_a}(x) = \sum_{Z'_a} (\bar{Z}_a - Z'_a(x))^2 p(Z'_a, x) - \quad (4.8)$$

всё для любого выбранного значения  $x$ .

Если  $\bar{\sigma}_{ex}$  — среднее сечение процесса перезарядки, то величина

$$l_{ex} = (\bar{\sigma}_{ex} \cdot n_0)^{-1}, \quad (4.9)$$

где  $n_0$  — плотность числа атомов в веществе, есть средняя длина пути, по прохождении которого распределение зарядовых состояний в пучке стабилизируется, т. е. устанавливается динамическое равновесие между процессами подхвата и потери электронов ионом. Соответственно определяются равновесный средний заряд иона

$$\bar{Z}_a(\infty) = \sum_{Z'_a} Z'_a \cdot p(Z'_a, x \gg l_{ex}) \quad (4.10)$$

и дисперсия равновесного распределения.

Установление режима равновесного распределения зарядовых состояний многозарядных ионов видно из экспериментов, в которых изучается прохождение многозарядных ионов через вещество при различных — как выше равновесного, так и ниже равновесного — начальных значениях заряда ионов  $Z_a^{нач}$  на входе в мишень. При  $Z_a^{нач} \gg \bar{Z}_a(\infty)$  средний заряд ионов  $\bar{Z}_a(x)$  по мере прохождения ими слоя вещества монотонно падает, а при  $Z_a^{нач} \ll \bar{Z}_a(\infty)$  — монотонно растет, стремясь к одному и тому же пределу (рис. 4.6). Обратим внимание на то, что чем больше скорость иона, тем легче ему потерять свой электрон, а не подхватить электрон от атома среды, т. е. тем сильнее сдвигается динамическое равновесие в сторону больших значений равновесного заряда  $\bar{Z}_a(\infty)$ .

Процесс перезарядки оказывает сильное влияние на торможение многозарядных ионов в веществе. Так, если в мишень попадает пучок «голых» ионов с зарядом  $Z_a$ , то уменьшение их среднего заряда  $\bar{Z}_a(x)$  по мере прохождения ионов через вещество приводит к ослаблению их взаимодействия с атомами среды. Если для «голового» многозарядного иона тормозная способность вещества должна быть больше, чем для протона той же скорости, в  $Z_a^2$  раз, то в действительности тормозная способность для многозарядного иона значительно меньше:

$$\left(-\frac{dE}{dx}\right)_a < Z_a^2 \left(-\frac{dE}{dx}\right)_p \quad (4.11)$$

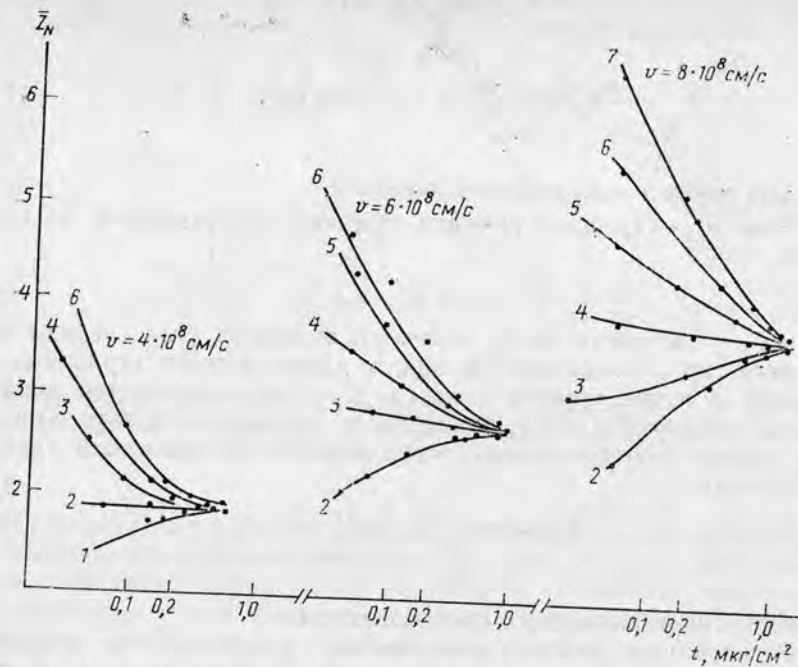


Рис. 4.6. Средний заряд ионов азота  $Z_N(t)$  при прохождении через азотную газовую мишень  $N_2$  [по: Зайков В. П. и др. Деп. в ВИНТИ. 1987. № 600—187. С. 75]. Для наглядности через экспериментальные точки проведены кривые, цифры рядом с кривыми указывают начальный заряд  $Z_N^{1244}$ ; по оси абсцисс — толщина мишени  $t$

Для характеристики торможения многозарядных ионов вводит- ся особое понятие *эффективного заряда* иона — близкое, но не совпадающее с понятием равновесного заряда  $\bar{Z}_a(\infty)$ . Эффективный заряд многозарядного иона  $Z_a^{\text{эфф}}$  определяется отношением фактических значений тормозной способности вещества для ионов  $a$  (в условиях равновесного зарядового распределения) и — при той же скорости — тормозной способности для протонов:

$$Z_a^{\text{эфф}} = \sqrt{\left(-\frac{dE}{dx}\right)_a / \left(-\frac{dE}{dx}\right)_p}. \quad (4.12)$$

Как видно из этого определения,  $Z_a^{\text{эфф}}$  — это заряд гипотетической заряженной частицы, всегда полностью лишенной электронной оболочки, которая испытывала бы в веществе такое же торможение, как реальная частица с собственным зарядом  $Z_a$ .

Опыт показывает, что эффективный заряд  $Z_a^{\text{эфф}}$  может принимать значения в очень широком интервале: он совсем мал при малых скоростях иона и стремится к заряду «голого» иона  $Z_a$  при

больших скоростях (рис. 4.7). Его зависимость от скорости иона можно аппроксимировать формулой

$$\frac{Z_a^{\text{эфф}}}{Z_a} \approx 1 - \exp(-v/v_B Z_a^{2/3}), \quad (4.13)$$

физический смысл которой позволяют понять следующие соображения: если средняя скорость электронов в ионе много меньше, чем скорость самого иона, то вероятность стриппинга велика и ион не способен нести с собой большое число электронов; в противном случае процесс столкновения иона с атомами среды происходит адиабатически и срыв электронов затруднен.

#### § 4.5. ПРОХОЖДЕНИЕ ЧЕРЕЗ ВЕЩЕСТВО ЭЛЕКТРОНОВ

Особенности прохождения через вещество электронов прямо обусловлены тем, что это легкие частицы. Прежде всего характер их ионизационного торможения и многократного рассеяния отличается от того, что нам известно, скажем, о протонах. Из-за малой массы электронов рассеяние на больших углах при их прохождении через вещество оказывается настолько существенным, что, в отличие от случая с тяжелыми заряженными частицами, после некоторого числа столкновений электрон теряет память о первоначальном направлении своего движения. По этой причине применительно к электронам не имеет смысла обычное понятие полного пробега. Учитывая запутанность траектории движения электрона, следует по крайней мере различать средний путь, пройденный электроном в веществе, и среднее удаление его (по прямой) от точки входа в среду торможения (рис. 4.8).

Вторая особенность, также обусловленная малой массой электрона, состоит в том, что к ионизационному торможению добавляется другой, столь же важный здесь механизм — *радиационное торможение*:

$$\left(-\frac{dE}{dt}\right) = \frac{2e^2}{3c^3} |a|^2. \quad (4.14)$$

Ускорение заряженной частицы, которое она испытывает в кулоновском поле ядер мишени, обратно пропорционально массе частицы:

$$a = \frac{1}{m} \frac{Z_1 Z_2 e^2}{r^2}. \quad (4.15)$$

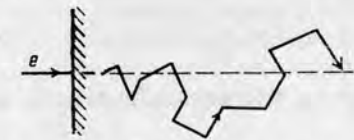
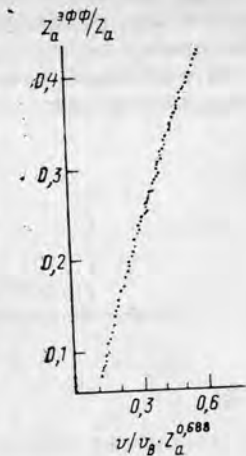


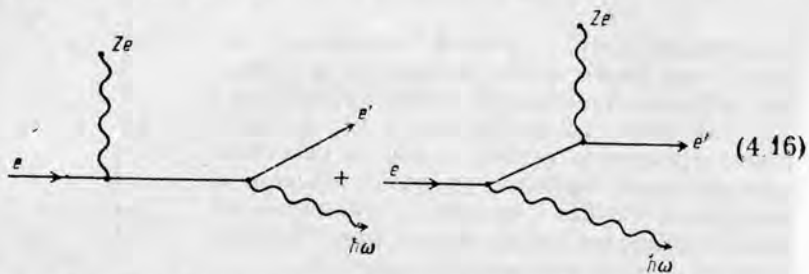
Рис. 4.8. Схема прохождения электрона через вещество

Рис. 4.7. Зависимость эффективного заряда ионов от скорости при движении в различных средах [по: Brown M. D., Mook C. D. // Phys. Rev. 1972. Vol. B6. P. 90]



Отсюда видно, что превышение радиационного торможения электронов над радиационным торможением протонов определяется фактором  $(m_p/m_e)^2$ , т. е. составляет более чем 6 порядков.

В квантовой электродинамике тормозное излучение электронов описывается диаграммами



где волнистая линия, привязанная к точке  $Z_e$ , соответствует взаимодействию (однофотонному обмену) между пролетающим электроном и ядром. Интенсивность тормозного излучения определяется суммой амплитуд (4.16), возведенной по модулю в квадрат, т. е. пропорциональна квадрату заряда ядра  $Z^2$ . В то же время вероятность тормозного излучения при столкновении с отдельными электронами атома (если считать их свободными) растет лишь пропорционально  $Z$ . Для количественных расчетов очень существенно, что в (4.16) электрон взаимодействует не с «голым», а с экранированным ядром; эффекты экранировки особенно сильны, когда длина волны виртуального фотона велика по сравнению с размерами атома. Конечно, результат расчетов зависит от выбранной модели атома — вида электронных волновых функций, распределения плотности заряда в атомной оболочке. Приведем результат, который дает квантовая электродинамика при использовании модели Томаса — Ферми:

$$\left(-\frac{dE}{dx}\right)_{\text{рад}} \approx 4En_0\alpha r_e^2 Z^2 \ln \frac{183}{Z^{1/3}}. \quad (4.17)$$

Здесь  $E$  — полная энергия электрона,  $\left(-\frac{dE}{dx}\right)_{\text{рад}}$  — потеря его энергии на единицу пути за счет излучения,  $n_0$  — плотность атомов вещества,  $\alpha = e^2/\hbar c$  — постоянная тонкой структуры,  $r_e = e^2/m_e c^2 = 2,8 \cdot 10^{-13}$  см — «классический радиус электрона».

Формула (4.17) показывает, что радиационное торможение электронов прямо пропорционально их полной энергии:

$$\left(-\frac{dE}{dx}\right)_{\text{рад}} = \frac{1}{x_0} E. \quad (4.18)$$

Здесь мы ввели параметр  $x_0$ , который дается выражением

$$\frac{1}{x_0} = 4n_0\alpha r_e^2 Z^2 \ln \frac{183}{Z^{1/3}}; \quad (4.19)$$

он имеет размерность длины и называется *радиационной длиной*. Физический смысл радиационной длины хорошо виден, если решить уравнение (4.18), предположив для этого, что радиационное торможение — это единственный род потерь энергии при прохождении электрона через вещество:

$$E(x) = E_0 e^{-x/x_0}. \quad (4.20)$$

Согласно (4.20)  $x_0$  — это длина пути, пройденного электроном, на котором его энергия уменьшается за счет излучения в  $e$  раз. Другая эквивалентная характеристика радиационного торможения — это радиационная толщина  $t_0$ , связанная с радиационной длиной через плотность вещества  $\rho$ :

$$t_0 = \rho x_0 = \left(4N_0\alpha r_e^2 \frac{Z^2}{A} \ln \frac{183}{Z^{1/3}}\right)^{-1} \quad (4.21)$$

(здесь мы выразили отношение  $\rho/n_0$  через массовое число атомов вещества  $A$  и число Авогадро  $N_0$ ). Как видно из (4.21), радиационная толщина быстро падает (грубо говоря, как  $Z^{-1}$ ) при переходе от легких веществ к тяжелым.

Итак, мы имеем дело с двумя механизмами торможения электронов в веществе — ионизационным и радиационным:

$$\left(-\frac{dE}{dx}\right) = \left(-\frac{dE}{dx}\right)_{\text{иониз}} + \left(-\frac{dE}{dx}\right)_{\text{рад}}. \quad (4.22)$$

Характер их зависимости от энергии электрона и от параметров среды различен, поэтому и соотношение вкладов этих двух механизмов в разных средах различно. В широкой области энергий, вплоть до десятка МэВ, доминируют ионизационные потери. Далее, когда ионизационные потери выходят почти на плато, а радиационные растут пропорционально  $E$ , картина меняется на противоположную. Сравняя формулу Бете — Блоха (3.31) с формулой (4.17) для радиационных потерь, мы видим, что при переходе к веществам с большим  $Z$  соотношение между ионизационными и радиационными потерями меняется в пользу последних; в тяжелых веществах преобладание радиационных потерь над ионизационными начинается раньше, при меньших энергиях, чем в легких. Однако даже в таких средах, как свинец ( $Z=82$ ) или уран ( $Z=92$ ), это происходит при энергиях около 10 МэВ, т. е. уже в релятивистской области.

Для количественной характеристики перехода от режима преимущественного вклада ионизационного торможения к режиму преимущественного вклада радиационного торможения вводится понятие *критической энергии* электрона  $E_{\text{крит}}$ , при которой, по определению, эти вклады равны между собой. Для грубой оценки ее величины годится формула

$$E_{\text{крит}} \approx \frac{800 \text{ МэВ}}{Z}. \quad (4.23)$$



Таблица 4.1  
Значение радиационной толщины  $t_0$  и критической энергии электронов  $E_{\text{крит}}$  для некоторых веществ

Вещество	$t_0$ , г/см <sup>2</sup>	$E_{\text{крит}}$ , МэВ
Воздух	37	80
Al	24	40
Pb	6	7,6

ны пройденного слоя вещества. В случае электронного пучка распределение  $N(x)$  имеет при больших  $x$  характерный протяженный хвост; ему предшествует почти линейный участок кривой. Продолжая этот линейный участок вниз, мы найдем на его пересечении с осью абсцисс некоторую точку  $R_{\text{экстр}}$ . Принято использовать величину  $R_{\text{экстр}}$  как характеристику пробега электронов в веществе; это так называемый *экстраполяционный пробег* электронов.

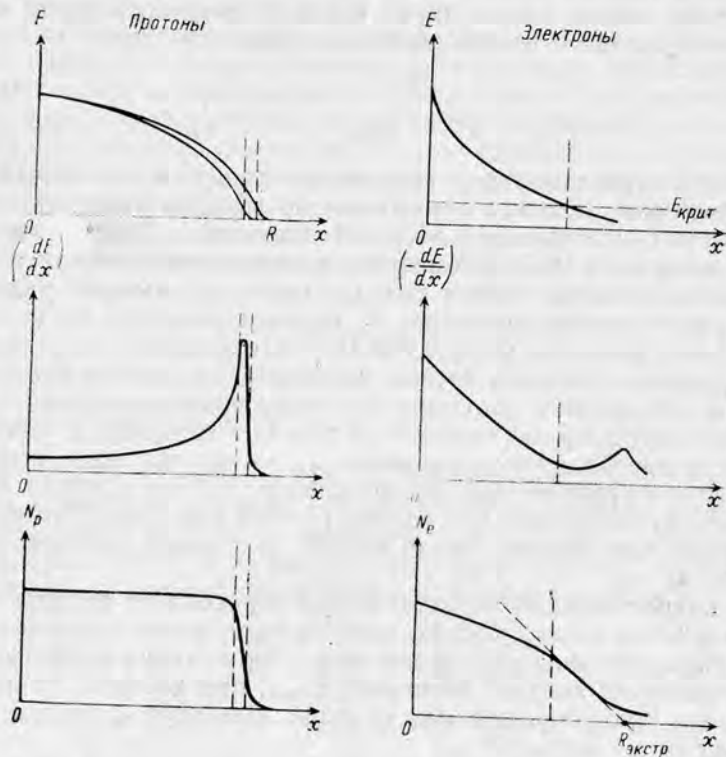


Рис. 4.9. Схематическое изображение основных характеристик прохождения протонов и электронов через вещество

В табл. 4.1 приведены параметры, характеризующие прохождение электронов через некоторые среды.

В заключение сопоставим схематически между собой основные характеристики прохождения через вещество протонов и электронов (рис. 4.9). На нижней паре рисунков показано, как зависит интенсивность пучка частиц от толщины

Установлено следующее эмпирическое соотношение между экстраполяционным пробегом электрона и его полной энергией:

$$R_{\text{экстр}} (\text{г/см}^2) \approx 0,526 E (\text{МэВ}) - 0,094. \quad (4.24)$$

## Лекция 5

### § 5.1. КАНАЛИРОВАНИЕ

В этой лекции мы разберем особенности прохождения быстрых заряженных частиц через кристаллы. *Каналирование* — один из наиболее ярких эффектов, в которых проявляется упорядоченная структура кристаллического вещества.

Еще в начале века Штарк высказал предположение, что если положительно заряженную частицу направить в кристалл вдоль одного из направлений его атомных рядов, то она будет двигаться как бы в трубе, сформированной из ближайших таких рядов, не подходя на близкое расстояние к атомам кристалла. В современных исследованиях мы пользуемся термином *канал* — осевой канал, если он сформирован несколькими соседними рядами атомов, или плоскостной канал, если он сформирован двумя параллельными кристаллографическими плоскостями (рис. 5.1). Явление каналирования было открыто сначала в «машинном эксперименте», где методом статистического моделирования просчитывалось прохождение быстрых положительно заряженных частиц через монокристалл (рис. 5.2). Пробег каналированной частицы значительно больше, чем при ее прохождении кристалла в произвольном направлении, поскольку плотность электронов, а следовательно, и ионизационное торможение частиц в середине канала меньше, чем в среднем по всему образцу.

Увеличение пробега или соответственно уменьшение скорости ионизационных потерь каналированной частицы — не единственное проявление каналирования. Каналированная частица реже сталкивается с ядрами атомов кристалла, а это значит, что вероятность ядерных реакций в монокристалле для заряженных частиц, падающих на него вдоль выделенных кристаллографических направлений, меньше, чем для частиц, идущих в произвольном направлении. По этой же причине каналированная частица меньше создает дефектов в решетке образца, чем неканалированная.

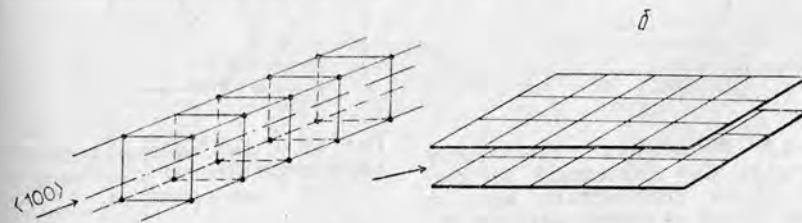


Рис. 5.1. Схематическое изображение осевого канала  $\langle 100 \rangle$  в простой кубической решетке (а) и плоскостного канала (б)

Она, кроме того, реже взаимодействует с электронами внутренних оболочек атомов кристалла и, следовательно, реже, чем неканализованная частица, создает вакансии в этих внутренних оболочках, а это в свою очередь проявляется в ослаблении выхода характеристического рентгеновского или оже-излучения атомов образца.

Каковы условия удержания частицы в канале? Представим себе сначала заряженную частицу, оказавшуюся точно в середине канала и движущуюся вдоль его оси. В идеальной неподвижной решетке силы, действующие на нее в поперечном направлении со стороны кристалла, уравниваются друг друга, так что частица должна оставаться внутри канала и двигаться вдоль него на равном удалении от «стенок» канала. В реальном кристалле вопрос не так прост. Пусть наша частица несет положительный заряд (протон,  $\alpha$ -частица и т. д.). Оказавшись в какой-то момент ближе к одному из рядов атомов, образующих канал, частица начинает испытывать с его стороны более сильное отталкивание, чем от других рядов. Это отталкивание стремится вернуть частицу в центральную область канала, но достаточно ли его, чтобы не дать частице выйти из канала, зависит от величины и формы силового электростатического поля, действующего на частицу в канале, и величины «поперечной» кинетической энергии  $E_{\perp}$ , которую имеет данная частица.

Далее мы воспользуемся приближением непрерывного потенциала, которое в 60-е гг. при построении основ теории каналирования сформировал Линдхард. С помощью этого приближения мы введем одну из основных количественных характеристик явления каналирования — *предельный угол каналирования* («угол Линдхарда»).

Пусть быстрая заряженная частица движется на расстоянии  $\rho$  от некоторой цепочки атомов кристалла (рис. 5.3). Считая цепочку

ку бесконечной, вычислим суммарный потенциал всей этой цепочки в точке  $z$  траектории частицы:

$$V(\rho, z) = \sum_n V(\sqrt{(z-nl)^2 + \rho^2}), \quad (5.1)$$

где  $V(r)$  — потенциал взаимодействия частицы с одним атомом. Одновременное воздействие большого числа атомов на частицу можно приближенно описать с помощью усредненного потенциала

$$\bar{V}(\rho) = \frac{1}{l} \int V(\sqrt{z^2 + \rho^2}) dz; \quad (5.2)$$

именно такое потенциальное поле создает вокруг себя непрерывная струна, каждый элемент которой  $dz$  взаимодействует с частицей по закону  $\frac{dz}{l} V(r)$ . Таким образом, в приближении непрерывного потенциала дискретный ряд атомов заменяется бесконечной струной.

По аналогии с потенциалом струны можно ввести усредненный непрерывный потенциал бесконечной совокупности атомов, лежащих в заданной кристаллической плоскости:

$$\bar{V}(h) = \frac{2\pi}{s} \int_0^{\infty} \rho V(\sqrt{\rho^2 + h^2}) d\rho, \quad (5.3)$$

где  $s$  — площадь, приходящаяся на один атом, а  $h$  — расстояние от частицы до плоскости. Две соседние плоскости, отстоящие друг от друга на расстояние  $l$ , создают в плоскостном канале потенциальное поле:

$$V_c(x) = \bar{V}\left(\frac{1}{2}l - x\right) + \bar{V}\left(\frac{1}{2}l + x\right), \quad (5.4)$$

конкретный вид которого зависит, конечно, от структуры кристаллической решетки и потенциала взаимодействия частиц с отдельным атомом, а общая форма показана на рис. 5.4.

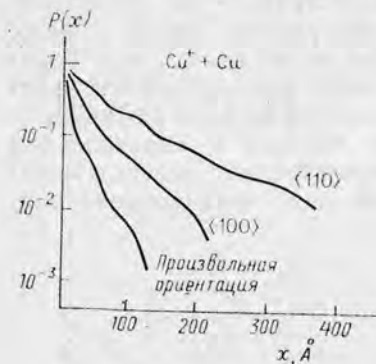


Рис. 5.2. Вероятность прохождения ионов меди  $\text{Cu}^+$  с начальной энергией 5 кэВ сквозь монокристалл меди до энергии 25 эВ — расчет методом статистического моделирования [по: Robinson M. T., Oen O. S. // Phys. Rev. 1963. Vol. 132. P. 2385]

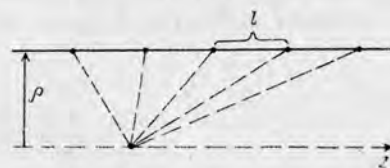


Рис. 5.3. Схема взаимодействия каналированной частицы с цепочкой атомов кристалла

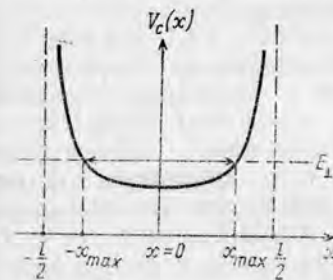


Рис. 5.4. Схема поперечных колебаний положительно заряженной частицы в плоскостном канале

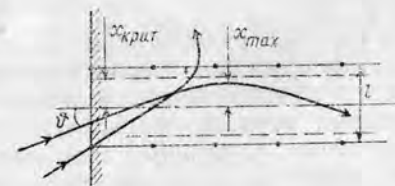


Рис. 5.5. Схема движения положительно заряженной частицы в плоскостном канале

Найдем угол Линдхарда для случая плоскостного каналирования. В модели непрерывного потенциала продольное движение частицы и ее поперечные колебания совершаются независимо друг от друга; согласно этой модели, в своем движении вдоль канала частица не чувствует периодичности кристаллического поля и скорость ее продольного движения лишь монотонно падает за счет столкновений частиц с электронами кристалла. Что же касается поперечных колебаний, то их амплитуда  $x_{\max}$  тем больше, чем больше полная энергия поперечного движения частиц:

$$E_{\perp} = E \sin^2 \delta, \quad (5.5)$$

и определяется уравнением

$$V_c(x_{\max}) - V_c(0) = E_{\perp}; \quad (5.6)$$

в приведенных выше формулах  $E$  — это полная энергия частиц, а  $\delta$  — угол падения частиц на поверхность кристалла, отсчитываемый от оси канала (рис. 5.5). Устойчивые поперечные колебания частицы в одномерной потенциальной яме  $V_c(x)$  возможны, только если их амплитуда  $x_{\max}$  не слишком велика. Если же она оказывается больше некоторого критического значения  $x_{\text{крит}}$ , частица выходит из канала, либо «пробивая» его стенку за счет слишком большой энергии своего поперечного движения, либо резко меняя энергию продольного движения в результате тесного сближения с отдельным атомом решетки (т. е. рассеиваясь на большой угол). Условие  $x_{\max} < x_{\text{крит}}$  приводит к неравенству

$$E_{\perp} < V_c(x_{\text{крит}}) - V_c(0), \quad (5.7)$$

откуда с учетом (5.5) получаем искомое выражение для предельного угла каналирования  $\vartheta_c$ :

$$\sin \vartheta < \sin \vartheta_c = \sqrt{\frac{V_c(x_{\text{крит}}) - V_c(0)}{E}}. \quad (5.8)$$

Естественно, этот угол тем меньше, чем больше энергия входящих в канал частиц. Для грубой оценки предельного угла каналирования обычно используется простая формула

$$\vartheta_c \approx \sqrt{\frac{2Z_a Z_e^2}{Ed}}, \quad (5.9)$$

где  $d$  — шаг решетки кристалла вдоль оси канала.

Для проверки теории каналирования часто применяют метод тонких кристаллических пленок (в атомной физике его называют методом «пучок — фольга»). Используя монохроматические ионные пучки, с помощью этого метода можно измерить потери энергии частиц при прохождении очень тонких слоев вещества, т. е. непосредственно тормозную способность вещества для частиц заданной скорости. В тех же случаях, когда возможна прецизионная ориентация тонкой монокристаллической мишени относительно

но падающего пучка, такого рода эксперименты дают ценную информацию о механизме каналирования, о распределении электронной плотности по профилю канала (эта задача очень актуальна для физики твердого тела), о влиянии тепловых колебаний решетки на проходящую частицу. Действительно, варьируя угол поворота мишени относительно падающего ионного пучка, экспериментатор варьирует средний прицельный параметр, характеризующий прохождение каналированной частицы мимо атомов решетки, а значит, получает возможность ослаблять или усиливать вклады отдельных электронных оболочек атома кристалла в процессе ионизационного торможения иона (вспомним, что при движении заряженной частицы в неупорядоченной среде нет такой избирательности: здесь вклады разных оболочек атомов среды в ионизационные потери частиц «обезличиваются» при интегрировании по прицельному параметру).

Картина движения тяжелой заряженной частицы в канале строится на сочетании представлений классической и квантовой механики. При этом квантовая механика играет, в известном смысле, лишь вспомогательную роль: с ее помощью трактуется распределение электронной плотности в кристалле, а также могут рассматриваться вопросы динамики решетки, что бывает нужно, когда, например, исследуется температурная зависимость эффектов каналирования. Что касается движения самой каналированной частицы, то оно, как мы видим, описывается чисто классически. Чем оправдывается такое применение классической механики?

Рассмотрим этот вопрос на конкретном примере (рис. 5.6). Ион  $\text{He}^+$  движется вдоль канала  $\langle 100 \rangle$  монокристалла кремния с энергией 2 МэВ. Если взять угол отклонения от оси канала порядка угла Линдхарда (здесь  $\vartheta_c$  порядка  $0,4^\circ$ ), то энергия поперечного движения иона  $E_{\perp}$  составит примерно  $2 \text{ МэВ} \times (0,4^\circ/57)^\circ \approx 10^{-4} \text{ МэВ}$ ; соответствующая длина де Бройля  $\lambda_{\perp}$  поперечного движения частиц есть  $2\pi\hbar/\sqrt{2ME_{\perp}} \approx 10^{-10} \text{ см}$ . Это на два порядка меньше, чем ширина «ям», в которой ион совершает свои колебания от стенки к стенке канала. Как видно из предыдущего, длина волны  $\lambda_{\perp}$  обратно

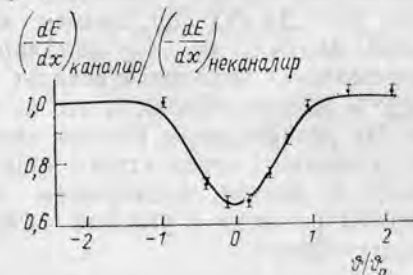


Рис. 5.6. Отношение удельных потерь энергии каналированными (в осевом канале  $\langle 100 \rangle$ ) и неканалированными ионами  $\text{He}^+$  с энергией 2 МэВ при прохождении через тонкую пленку из монокристалла кремния [по: Jip H. S., Gibson W. M. // NIM. 1986. Vol. B13. P. 76]. Сплошная линия — результат подгонки по формуле

$$\left(\frac{dE}{dx}\right)_{\text{каналир}} / \left(\frac{dE}{dx}\right)_{\text{неканалир}} = 1 - \text{const} \cdot \exp\left\{-\frac{2\vartheta^2}{\vartheta_0^2}\right\}$$

при  $\nu_0 = 0,41 \pm 0,01^\circ$

пропорциональна углу отклонения от оси канала. Значит, даже при  $\theta \sim 0,1\theta_c$  дебройлевская длина волны  $\lambda_d$  остается в нашем случае еще на порядок меньше, чем расстояние между стенками канала. Это и означает, что поперечное движение частиц носит практически классический характер.

Однако классическую механику нельзя применить, если в тот же канал мы направим легкую частицу, скажем, позитрон. Квантовая теория трактует поперечные колебания каналированной частицы как движение волнового пакета; его начальная форма определяется условиями входа частицы в канал, а характер эволюции может быть исследован путем решения соответствующего уравнения Шредингера. Случай каналирования электронов требует отдельного рассмотрения, так как отталкивание от узлов кристаллической решетки здесь меняется на притяжение и характер движения частицы в канале оказывается совсем не таким, как в случае положительно заряженной частицы. Его количественное описание требует квантовой механики. С точки же зрения классической механики при осевом каналировании, например, электрон идет вдоль канала, как бы навиваясь на цепочку атомов кристалла. Мы еще вернемся к проблеме каналирования электронов в лекции 9.

Интересные квантовые эффекты обнаруживаются при каналировании ионов, полностью лишенных электронной оболочки. Представим себе, что такой ион движется, скажем, в осевом канале некоторого кристалла. Обратимся к схеме его движения (рис. 5.4). До сих пор, приняв концепцию непрерывного потенциала, мы считали, что каналированная частица в своем движении вдоль канала не чувствует периодичности кристаллического поля. В действительности это не так. Пусть  $v$  — скорость частицы. На значительном участке своего пути она проходит много узлов решетки через строго определенные промежутки времени  $\tau = l/v$  и, значит, подвержена периодическому возмущению со стороны решетки с угловой частотой основной гармоники  $\omega = 2\pi/\tau = 2\pi v/l$ .

В общем случае рассматриваемое периодическое возмущение слабо и при произвольной скорости иона  $v$  не может оказать на него какого-либо существенного воздействия. Однако при определенном значении скорости  $v$  частота возмущения  $\omega$  может совпасть с какой-либо из собственных частот иона  $\omega_{fi}$ , определяемой энергией перехода из его основного  $|i\rangle$  в некоторое возбужденное состояние  $|t\rangle$ . В условиях такого резонанса, когда  $\omega = \frac{1}{h}(\epsilon_f - \epsilon_i)$ , даже слабое периодическое возмущение может вызвать очень сильный переход иона из одного состояния в другое. Такой эффект резонансного возбуждения иона при движении вдоль канала был предсказан Огороковым и носит его имя. *Эффект Огорокова* наблюдался в разных экспериментах. Одним из способов его наблюдения является измерение энергетической зависимости «фракции выживания» каналированных ионов, т. е. зави-

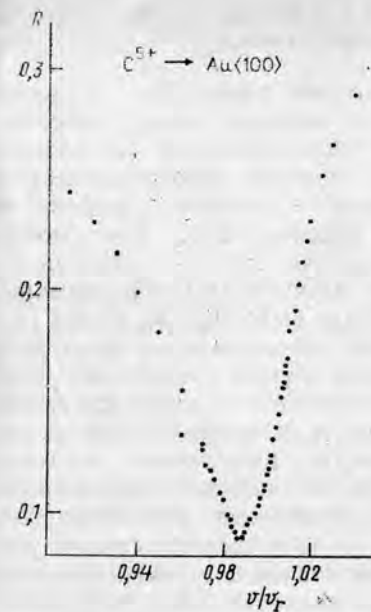


Рис. 5.7. Эффект Огорокова при прохождении ионов  $C^{5+}$  вдоль канала  $\langle 100 \rangle$  кристалла золота толщиной 1600 Å [по: Miller P. D. et al. // NIM. 1986. Vol. B13. P. 56]. По оси абсцисс отложено отношение скорости иона  $v$  к «резонансной» скорости  $v_r$ , соответствующей переходу ( $n=1$ )  $\Rightarrow$  ( $n=2$ ) (основная гармоника); при этом  $E_r = 81,6$  МэВ. По оси ординат — доля ионов  $C^{5+}$ , прошедших через образец без изменения зарядового состояния («фракция выживания»)

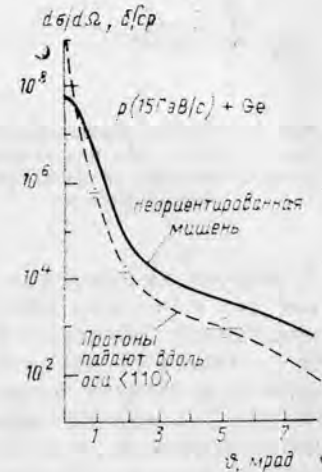


Рис. 5.8. Угловая зависимость выхода вторичных заряженных частиц при взаимодействии релятивистских протонов с ядрами мишени в монокристалле германия [по: Andersen S. K. et al. // Nucl. Phys. 1978. Vol. B. 144. P. 1]

симости от энергии доли ионов, прошедших через образец без изменения своего зарядового состояния. Дело в том, что при резонансном возбуждении резко возрастают внутренние размеры ионов, а вместе с ними сечения их взаимодействия с атомами кристалла и, в частности, сечение потери ими электронов. Это и проявляется в виде характерных минимумов на кривой энергетической зависимости фракции выживания (рис. 5.7).

Заканчивая обсуждение проблемы каналирования, подчеркнем, что область энергии заряженных частиц, в которой наблюдается и исследуется это явление, очень широка — вплоть до сотен ГэВ. Данные, приведенные в качестве примера на рис. 5.8, показывают эффект каналирования в ядерных взаимодействиях протонов с импульсом 15 ГэВ/с в монокристалле германия.

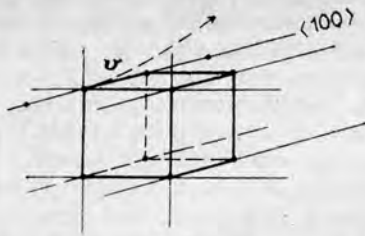


Рис. 5.9. Схема блокировки направления  $\langle 100 \rangle$  при испускании заряженной частицы из узла кристаллической решетки

### § 5.2. ЭФФЕКТ ТЕНЕЙ (БЛОКИРОВКА)

Другим эффектом, который, как и каналирование, обусловлен упорядоченным расположением атомов кристаллического вещества, является эффект теней (блокировка). Его можно наблюдать, когда регистрируемые детекторами заряженные частицы выходят из узлов решетки монокристалла (рис. 5.9); в этом случае кулоновское поле ближайших атомов кристалла

блокирует направления основных осей и плоскостей кристалла, так что в угловых распределениях частиц, выходящих из монокристалла, образуются области резко пониженной интенсивности — «тени» (Тулинов А. Ф., 1965). Эффект теней был обнаружен при исследовании ядерных реакций (в том числе ядерного рассеяния заряженных частиц) на монокристаллах, а также при изучении спонтанного  $\alpha$ -распада тяжелых радиоактивных ядер, введенных в монокристалл (рис. 5.10, 5.11).

На рис. 5.10 дан пример тени при упругом рассеянии протонов с энергией 3 МэВ монокристаллом вольфрама. С помощью рентгеновской методики кристалл ориентировался относительно пучка падающих протонов так, что его наиболее плотно упакованная ось  $\langle 111 \rangle$  располагалась под большим углом к пучку. Сплошная линия на рисунке проведена по экспериментальным

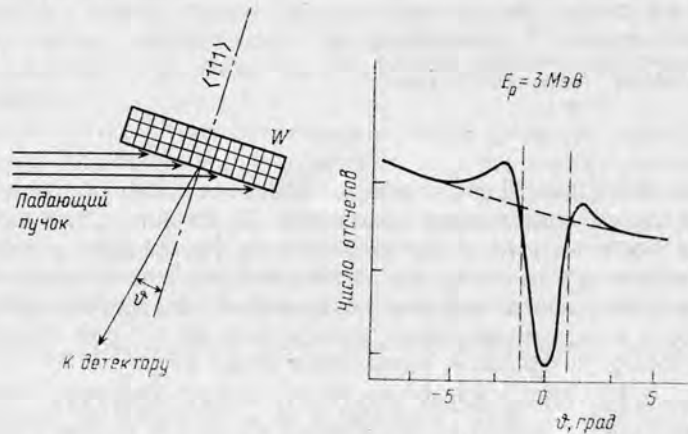


Рис. 5.10. Эффект теней при упругом рассеянии протонов с энергией 3 МэВ монокристаллом вольфрама [по: Тулинов А. Ф. // Вестн. Моск. ун-та. Сер. физика, астроном. 1967. № 5. С. 88]

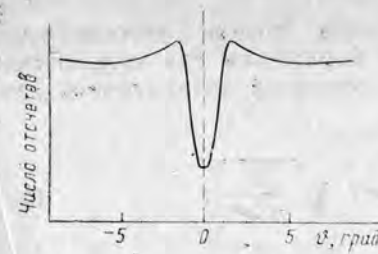


Рис. 5.11. Эффект теней при испускании  $\alpha$ -частиц изотопом  $^{222}\text{Rn}$ , введенным в монокристалл вольфрама [по: Domeji B., Bjorkvist K. // Phys. Lett. 1965. Vol. 14, P. 127].  $\nu$  — угол выхода  $\alpha$ -частиц относительно оси  $\langle 111 \rangle$



Рис. 5.12. Схема возникновения тени

точкам; пунктирная кривая соответствует угловому распределению протонов, рассеянных поликристаллическим образцом. Форма тени нетривиальна, она зависит от многих факторов: плотности упаковки оси кристалла, энергии падающих частиц, заряда частицы — продукта рассеяния (а более точно, закона ее взаимодействия с отдельным атомом кристалла). Исследования показали, что богатую информацию о свойствах кристаллического вещества дает изучение температурной зависимости формы тени.

Рассмотрим элементарную теорию возникновения тени (рис. 5.12). Пусть и источник частиц  $A$ , и рассеивающий центр  $B$ , расстояние между которыми равно  $l$ , неподвижны. Траекторию движения частицы, выходящей из источника под углом  $\theta_0$  к направлению оси кристалла, найдем из законов классической механики, воспользовавшись для простоты приближением малых углов рассеяния. Если потенциал взаимодействия нашей частицы с рассеивающим центром  $B$  аппроксимировать степенным выражением  $V(r) = \alpha/r^n$  ( $n > 0$ ), то в этом приближении угол рассеяния частицы  $\Delta\theta$  выражается через прицельный параметр соударения  $b$  по формуле

$$\Delta\theta = \frac{2\alpha\sqrt{\pi}}{m_a v^2 b^n} \frac{\Gamma\left(\frac{n+1}{2}\right)}{\Gamma\left(\frac{n}{2}\right)}, \quad (5.10)$$

где  $v$  — скорость частицы. В нашем случае  $b \approx l\theta_0$  и, следовательно, угол вылета частицы  $\theta$  при начальном угле  $\theta_0$  определяется выражением

$$\theta = \theta_0 + \frac{2\alpha\sqrt{\pi}}{m_a v^2 l^n} \frac{\Gamma\left(\frac{n+1}{2}\right)}{\Gamma\left(\frac{n}{2}\right)} \frac{1}{\theta_0^n}. \quad (5.11)$$

Отсюда находим угловые размеры тени позади рассеивающего центра. Приведем соответствующие выражения для кулоновского потенциала ( $n=1$ ) и потенциала с обратной квадратичной зависимостью от расстояния ( $n=2$ ):

$$V(r) = \frac{a}{r} \Rightarrow \vartheta_{\min} = 2 \sqrt{\frac{2a}{m_a v^2 l}}; \quad (5.12)$$

$$V(r) = \frac{\alpha}{r^2} \Rightarrow \vartheta_{\min} = 2 \sqrt[3]{\frac{2\pi\alpha}{m_a v^2 l^3}}.$$

В обоих случаях размеры тени тем больше, чем меньше расстояние от источника частиц до рассеивающего центра, т. е. чем плотнее упакован ряд атомов кристалла в соответствующем направлении. С увеличением скорости заряженных частиц размеры тени уменьшаются.

В идеальной решетке каждый атом кристалла лежит строго в узле пересечения кристаллографических осей и плоскостей. Благодаря трансляционной симметрии кристалла для каждого из излучателей, занимающих одинаковое положение в ячейке, эффект блокировки возникает в одних и тех же направлениях. Поэтому при регистрации выходящих из монокристалла заряженных частиц с помощью детектора, охватывающего большой телесный угол (например, с помощью фотопластинки), возникает характерная «протонограмма» (рис. 5.13), темные пятна и линии на которой передают направление осей и плоскостей кристалла.

В нашем сильно упрощенном рассмотрении мы оставили в стороне все, что связано с колебаниями кристаллической решетки. В действительности эти колебания существенно влияют на эффект блокировки и, в частности, на форму тени, определяя ее зависимость от температуры образца. На первый взгляд может показаться, что нагрев кристалла и связанное с ним увеличение амплитуды колебаний атомов относительно друг друга всегда должны приводить просто к уменьшению, сужению затененной области углов. На самом деле механизм влияния тепловых колебаний на форму тени гораздо сложнее, поскольку колебания атомов в решетке в общем случае не являются хаотическими, независимыми друг от друга, а представляют собой связанные колебания с сильными корреляциями между смещениями как близко расположенных, так и далеких друг от друга атомов.

Очень часто каналирование и блоки-

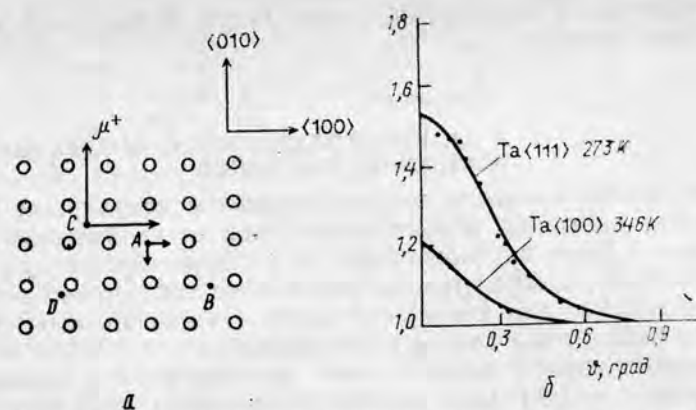


Рис. 5.14. Каналирование и блокировка мюонов  $\mu^+$  от распада пионов  $\pi^+ \rightarrow \mu^+ + \nu_\mu$  в кристаллическом образце: а — схематическое изображение вариантов локализации пиона в момент распада; б — угловая зависимость выхода мюонов  $\mu^+$  при распаде пионов  $\pi^+$  в монокристалле тантала [по: Sigle W. et al. // NIM. 1984. Vol. B2. P. 1]

ровка выступают как две стороны одного и того же явления — влияния упорядоченной структуры кристалла на прохождение через него заряженных частиц. Так, если частицы образуются внутри кристалла, то их угловое распределение на выходе из образца обнаруживает черты либо каналирования, либо блокировки — в зависимости от того, в каком месте кристаллической ячейки происходит образование этих частиц. Именно так — по угловому распределению мюонов  $\mu^+$  от распада пионов  $\pi^+ \rightarrow \mu^+ + \nu_\mu$  — удалось, например, исследовать, как ведет себя в решетке кристалла (после замедления) пион  $\pi^+$ . Здесь мыслится несколько возможностей: положительно заряженный пион может, подобно протону или дейтрону, занять место в какой-то вполне определенной ячейке; он может диффундировать по всему образцу, переходя от ячейки к ячейке, либо локализоваться вблизи какой-то примеси или дефекта; наконец, нельзя исключить такое явление: копия  $\pi^+$  может образовать нейтральный атом пиония ( $\pi^+ e^-$ ), который в свою очередь способен вступить в химическую связь с атомами среды. Различные возможные местоположения пиона  $\pi^+$  в момент распада показаны схематически на рис. 5.14. В случае А выход мюонов  $\mu^+$  блокируется в направлении  $\langle 100 \rangle$  и в направлении  $\langle 010 \rangle$ ; в случае В блокировка в направлении  $\langle 100 \rangle$  и усиление выхода, благодаря каналированию, в направлении  $\langle 010 \rangle$ ; в случае С выход  $\mu^+$  усиливается в обоих направлениях  $\langle 100 \rangle$  и  $\langle 010 \rangle$ . Индексом D обозначен случай, когда образовавшийся пионий ( $\pi^+ e^-$ ) оказывается химически связанным с одним из атомов кристалла.

Эксперименты по изучению распада  $\pi$ -мезонов в кристалле, особенно благодаря своей связи с проблемой водорода и тяже-

Рис. 5.13. Протонограмма кристалла молибдена, полученная при рассеянии протонов с энергией 500 кэВ [по: Тулинов А. Ф. // Вестн. Моск. ун-та. Сер. физика, астроном. 1967. № 5. С. 88]. Центральное пятно соответствует оси  $\langle 100 \rangle$ , через него проходят линии, являющиеся тенями плоскостей  $\langle 100 \rangle$ ,  $\langle 110 \rangle$  и др.

лого водорода в кристаллах, дают ценную информацию о структуре твердого тела.

## Лекция 6

### § 6.1. ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ С ВЕЩЕСТВОМ МОЛЕКУЛЯРНЫХ ИОНОВ

Физические процессы взаимодействия молекулярных ионов с веществом вызывают в настоящее время очень большой интерес не только в чисто научном плане, но и с точки зрения прикладных исследований, однако изучены они еще не так широко и глубоко, как это сделано для атомарных ионов. На начальной стадии разработки находится и теория таких процессов.

Принципиальное новое, с чем мы встречаемся, переходя от процессов с атомарными ионами к процессам с молекулярными ионами, — это явление диссоциации. Потенциалы диссоциации молекулярных ионов составляют, как правило, несколько электрон-вольт, и быстрый молекулярный ион, попадая в вещество, легко расщепляется на составляющие его части. Поэтому в большинстве процессов взаимодействия с веществом, интересных с технической точки зрения, таких, как распыление поверхности твердых тел, имплантация, создание дислокаций в кристаллах и т. п., молекулярный ион воздействует на образец просто как совокупность составляющих его независимых друг от друга атомарных ионов. Заметим в этой связи, что само использование молекулярных пучков в физике взаимодействия частиц с веществом началось в связи с поиском способов увеличить плотность потоков бомбардирующих атомарных частиц. В дальнейшем, однако, выяснилось, что в определенных условиях изучение собственно процесса диссоциации при взаимодействии молекулярных ионов с веществом позволяет получить очень ценные сведения и о самом молекулярном ионе, и о свойствах вещества. Мы разберем несколько таких примеров, взятых из экспериментальных и теоретических исследований последних лет.

#### Явление «кулоновского взрыва»

Суть явления и способы его наблюдения заключаются в следующем. Хорошо коллимированный пучок быстрых молекулярных ионов направляется на тонкую (толщиной менее или около сотни Å) пленку. Время пролета иона сквозь пленку столь мало, что относительное расположение ядер молекулы в течение всего этого времени оказывается как бы замороженным. При этом вероятность обдирки электронного облака молекулярного иона столь велика, что, пролетев сквозь пленку, его ядра оказываются лишенными всех или почти всех своих электронов. Таким образом, силы кулоновского отталкивания ядер друг от друга оказываются теперь нескомпенсированными и под их действием ядра молекулярного иона, продолжая заданное им начальными условиями поступательное движение, разлетаются относительно друг друга в противоположные (в системе центра масс) стороны; мгновен-

ная потеря электронов при попадании быстрого молекулярного иона в вещество мишени оборачивается «взрывом» иона.

Рассмотрим механизм кулоновского взрыва более подробно на конкретном примере. Пусть хорошо коллимированный моноэнергетический пучок ионов  $\text{HeH}^+$  с энергией  $E=3$  МэВ падает на тонкую ( $\sim 100$  Å) углеродную пленку. Из квантовой химии известны параметры структуры и внутреннего движения иона  $\text{HeH}^+$  (рис. 6.1): энергия диссоциации (по каналу  $\text{HeH}^+ \rightarrow \text{He}^0 + \text{H}^+$ )  $e_D \approx 1,8$  эВ; равновесное расстояние между ядрами в низшем ( $\nu=0$ ) вибрационном состоянии  $r_0=0,79$  Å; частота колебаний (расстояние между колебательными уровнями  $\nu=1$  и  $\nu=0$ )  $\hbar\omega = 0,4$  эВ; расстояние между вращательными уровнями на два порядка меньше. При выбранной энергии  $E=3$  МэВ скорость иона  $\text{HeH}^+$  составляет примерно  $1,1 \cdot 10^9$  см/с и, следовательно, время  $t_d$  пролета иона сквозь пленку — около  $10^{-15}$  с. Это на порядок меньше, чем период колебаний ядер  $T_v=2\pi/\omega=1,5 \cdot 10^{-14}$  с. Оценим время, в течение которого, после того как ион проник в мишень, он теряет свои электроны. Эффективное сечение  $\sigma_{st}$  обдирки электронов (стриппинга) порядка геометрических размеров иона, т. е. примерно  $10^{-16}$  см<sup>2</sup>. В веществе с плотностью  $\rho$  средняя длина пути, на котором происходит стриппинг,  $l_{st}=(\sigma_{st}\rho N_0)^{-1}$  где  $N_0$  — число Авогадро. Этому соответствует время  $t_{st}=(\sigma_{st}\rho N_0 v)^{-1}$ . Подставляя сюда нужные цифры, получаем  $t_{st} \sim 10^{-17}$  с. Действительно, в рассматриваемом случае потеря молекулярным ионом своих электронов происходит практически мгновенно, если учесть, что время прохождения иона сквозь тонкую пленку составляет  $\sim 10^{-15}$  с, а период вибрации ядер в молекулярном ионе  $\sim 10^{-14}$  с; мы уже не говорим о совсем медленном вращательном движении иона ( $T_r \sim 10^{-12}$  с).

В падающем пучке ионов все направления их межъядерной оси равновероятны. Проследим за ионом, чья межъядерная ось в момент подлета к мишени направлена под некоторым углом  $\psi$  к вектору скорости иона (рис. 6.2). Предположим, что потеряв электронную оболочку, ядра гелия и водорода (ионы  $\text{He}^{++}$  и  $\text{H}^+$ ) остались на таком удалении друг от друга, которое равно их равновесному расстоянию в молекулярном ионе  $r_0=0,79$  Å. Тогда ку-

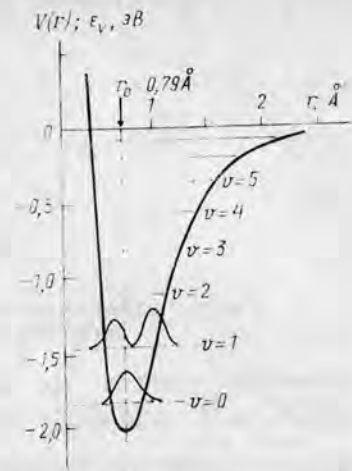


Рис. 6.1. Эффективная потенциальная энергия взаимодействия ядер He и H в молекулярном ионе  $\text{HeH}^+$  и расположение его вибрационных уровней; для уровней  $\nu=0$  и  $\nu=1$  показана плотность распределения расстояния между ядрами  $D_\nu(r)=|\psi_\nu(r)|^2$  [по: Kolos W., Peak J. M. // Chem. Phys. 1976. Vol. 12. P. 381]

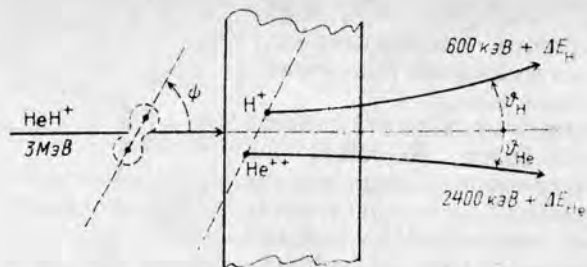


Рис. 6.2. Схема кулоновского взрыва при пролете молекулярного иона  $\text{HeH}^+$  через тонкую пленку

лоновская энергия их взаимного отталкивания равна  $\epsilon_c = \frac{Z_1 Z_2 e^2}{r_0} = \frac{2e^2}{r_0} = 36,5$  эВ. Переходя в кинетическую энергию разлетающихся ядер, она распределяется между ними (в системе центра масс) обратно пропорционально их массам:  $1/5\epsilon_c$  передается протону,  $4/5\epsilon_c$  —  $\alpha$ -частице. Как скоро это происходит? Успевают ли продукты диссоциации  $\text{He}^{++}$  и  $\text{H}^+$  получить подавляющую долю причитающейся им энергии «взрыва» до того, как весь комплекс  $\text{He}^{++}-\text{H}^+$  пролетит сквозь пленку?

В системе центра масс временная картина разлета ядер определяется уравнением

$$\mu \ddot{r} = \frac{Z_1 Z_2 e^2}{r^2}; \quad r(0) = r_0, \quad (6.1)$$

где  $\mu = \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2}$  — приведенная масса ядер. Решив его, мы уви-

дим, что при начальной энергии иона 3 МэВ и толщине пленки 100 Å относительное расстояние между ядрами увеличивается за время прохождения их через пленку с 0,79 Å всего лишь до 1,01 Å, т. е. основная часть энергии взрыва (больше 80%) переходит в кинетическую энергию ядер уже после того, как они пролетели сквозь пленку.

Рассмотрим, как проявляется энергия кулоновского взрыва при измерениях энергетического и углового распределения фрагментов. Пусть  $\mathbf{v}_0$  — вектор скорости молекулярного иона, падающего на пленку, он же — вектор средней скорости каждого из ядер молекулярного иона до «взрыва». Пусть  $\mathbf{u}$  — вектор скорости фрагмента в системе центра масс при полной реализации энергии кулоновского взрыва. По абсолютной величине эти два вектора очень сильно различаются между собой; так, в рассматриваемом примере средняя кинетическая энергия одного из ядер молекулярного иона до его диссоциации  $E_0 = mv_0^2/2$  и его кинетическая энергия в системе центра масс после разлета фрагментов  $\epsilon = mu^2/2$  составляют: для протона — 600 кэВ и 29,2 эВ, для  $\alpha$ -частицы — 2400 кэВ и 7,3 эВ. Однако в результате сложения векто-

ров  $\mathbf{v}_0 + \mathbf{u} = \mathbf{v}$  сдвиг энергии фрагмента относительно среднего значения

$$\Delta E = \frac{m(v_0 + u)^2}{2} - \frac{mv_0^2}{2} \approx mv_0 u \cos \psi \quad (6.2)$$

и изменение направления его движения в Л-системе

$$\vartheta \approx \frac{u}{v_0} \sin \psi \quad (6.3)$$

оказываются весьма значительными:

$$\vartheta_{\max} = \vartheta \Big|_{\psi=90^\circ} = \frac{u}{v_0} = \sqrt{\frac{\epsilon_0}{E_0}}; \quad (6.4)$$

$$\Delta E_{\max} = \Delta E \Big|_{\psi=0^\circ; 180^\circ} = \pm 2\sqrt{\epsilon E_0}. \quad (6.5)$$

Таким образом, в рассматриваемом примере имеем

для протонов:  $\vartheta_{\max} \approx 6,9$  мрад ( $0,4^\circ$ ),

$$\Delta E_{\max} \approx \pm 8,4 \text{ кэВ};$$

для  $\alpha$ -частиц:  $\vartheta_{\max} \approx 1,75$  мрад,

$$\Delta E_{\max} \approx \pm 8,4 \text{ кэВ}.$$

Согласно (6.2) и (6.3) сдвиг энергии фрагмента  $\Delta E$  и величина угла  $\vartheta$  связаны между собой уравнением эллипса

$$\left(\frac{\Delta E}{mv_0 u}\right)^2 + \left(\frac{\vartheta}{u/v_0}\right)^2 = 1. \quad (6.6)$$

Приведенные цифры дают представление о величине эффекта в типичных условиях проведения эксперимента. Однако проделанные выше выкладки слишком схематичны в одном очень важном отношении: расстояние между ядрами в молекулярном ионе, а следовательно, и начальное расстояние  $r(0)$  между ними в момент кулоновского взрыва не являются фиксированными, как мы полагали выше, а распределены некоторым образом вокруг среднего значения в зависимости от относительных заселенностей различных вибрационных состояний молекулярного иона в падающем пучке. В каждом из таких состояний расстояние между ядрами  $\text{He}^{++}$  и  $\text{H}^+$  распределено согласно закону

$$D_{\mathbf{v}}(r) = |\psi_{\mathbf{v}}(r)|^2, \quad (6.7)$$

где  $\psi_{\mathbf{v}}(r)$  — волновая функция колебательного движения ядер в таком состоянии; профиль распределений  $D_{\mathbf{v}}(r)$  для состояний  $\mathbf{v}=0$  и  $\mathbf{v}=1$  молекулярного иона  $\text{HeH}^+$  показан на рис. 6.1.

Колебание ядер в молекуле проявляется в размывании энергетического и углового распределений продуктов кулоновского взрыва. Эллипс (6.6) превращается в эллиптической формы коль-





Рис. 6.3. Кулоновский взрыв молекулярного иона  $\text{HeH}^+$  с энергией 3 МэВ при пролете тонкой пленки: кольцевая диаграмма углового и энергетического распределения протонов, рассчитанная без учета поляризации среды

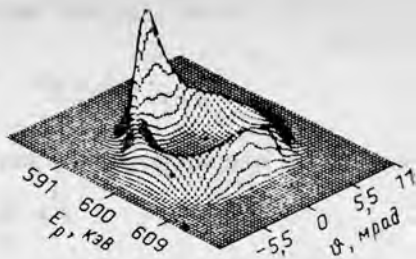


Рис. 6.4. Те же распределения, что на рис. 6.3, — результат эксперимента [по: Gemmel D. S. // Chem. Rev. 1980. Vol. 80. P. 301] (толщина углеродной пленки 196 Å)

цо, толщина которого тем больше, чем больше амплитуда колебаний ядер. На рис. 6.3 приведена типичная «кольцевая диаграмма» углового и энергетического распределения протонов при кулоновском взрыве молекулярного иона  $\text{HeH}^+$  с энергией 3 МэВ, рассчитанная по изложенной выше схеме с использованием стандартных волновых функций молекулярного иона  $\text{HeH}^+$ .

На рис. 6.4 показаны те же распределения, измеренные на опыте. Толщина пленки была здесь больше той, что предполагалось выше, а это значит, что более существенной является стадия разлета фрагментов непосредственно внутри мишени. Сопоставляя теоретические и экспериментальные распределения на рис. 6.3 и 6.4, мы видим их несомненное общее сходство, оно касается и формы эллипса (средней величины его полуосей), и средней толщины кольца. Однако в одном отношении между этими двумя типами распределений наблюдается резкое различие: при вылете протона в направлении падающего пучка ионов ( $\theta \rightarrow 0$ ) сильно нарушается симметрия энергетического распределения протонов относительно среднего значения  $\Delta E = 0$ , причем резко усиленным оказывается левый ( $\Delta E < 0$ ) пик этого распределения. Этот пик создается протонами, которые после диссоциации молекулярного иона движутся непосредственно вслед за идущим впереди ионом  $\text{He}^{++}$  и поэтому хорошо чувствуют возмущения, вносимые им в среду. Поляризуя атомы среды, идущий первым ион  $\text{He}^{++}$  создает в ней некую «поляризационную волну», которую часто, по аналогии с тем, как лодка идет по воде, называют также *поляризационным следом*. В его кильватере и оказывается наш протон.

Понятие поляризационной волны было введено в физику взаимодействия частиц с веществом еще в 40-е гг. Нильсом Бором, однако исчерпывающего теоретического описания этого явления до сих пор получить не удалось. Обнаружение эффекта поляризационной волны в экспериментах по кулоновскому взрыву показало,

что продукты диссоциации молекулярных ионов, двигаясь в веществе (в нашем случае это пара ионов  $\text{He}^{++}$  и  $\text{H}^+$ ), не являются какой-то изолированной от этой среды системой, а составляют с ней единое целое — некий сложный *кластер*, который по выходе из мишени несет с собой информацию не только о молекулярном ионе, но и о диэлектрических свойствах среды.

Мы рассмотрели явление кулоновского взрыва на примере двухатомного молекулярного иона. Это явление известно и для сложных (многоатомных) молекулярных ионов, оно эффективно используется в стереохимических исследованиях таких ионов. Здесь особенно информативными оказываются корреляционные эксперименты, когда на совпадение регистрируются два, а то и три продукта диссоциации молекулярного иона.

#### Отражение быстрых молекулярных ионов от поверхности кристаллов

При изучении отражения быстрых молекулярных ионов от поверхности кристаллов было замечено явление (Молчанов, Сошка, 1965), на первый взгляд кажущееся странным: значительная доля ионов отражается кристаллом без диссоциации. Бездиссоциативное отражение наблюдается даже тогда, когда «поперечная энергия», получаемая молекулой от мишени, на порядки превышает энергию диссоциации молекулы. В этом состоит нетривиальность явления. Действительно, отражение молекулы от поверхности есть в конечном счете результат взаимодействия атомов молекулы с атомами, находящимися на поверхности мишени. Если считать, что в каждом отдельном акте столкновения импульс, получаемый молекулой от мишени, приходится на какой-то один из атомов молекулы, а другой или другие атомы молекулы остаются в этом акте столкновения всего лишь «наблюдателями» («спектаторами»), то связь между атомами в молекуле в результате такого однократного столкновения должна разорваться. Поскольку на самом деле в большом числе случаев этого не происходит, можно предположить, что в процессе бездиссоциативного отражения столкновения отдельных атомов молекулы с атомами мишени как-то скоррелированы между собой (рис. 6.5): хотя каждый из атомов молекулы и получает значительный импульс, но при этом возмущение, вносимое в их относительное движение, оказывается небольшим.

Теория бездиссоциативного отражения молекулярных ионов еще только строится, пока ее наиболее ощутимым успехом является верное объяснение зависимости относительного выхода недиссоциированных молекулярных ионов («фракции выживания») от угла рассеяния (рис. 6.6). Между тем гипотеза о доминирующей роли коррелированных столкновений в процессе бездиссоциативного отражения получила сильную поддержку в специального рода экспериментах с быстрыми молекулярными ионами, выполненных на ориентированных монокристаллах. Отражая упоря-

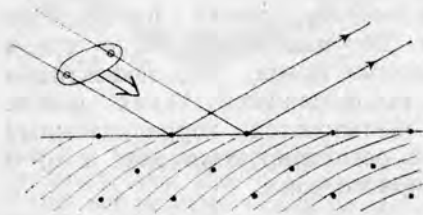


Рис. 6.5. Схема коррелированных атомных столкновений при бездиссоциативном отражении быстрых молекулярных ионов от поверхности твердого тела

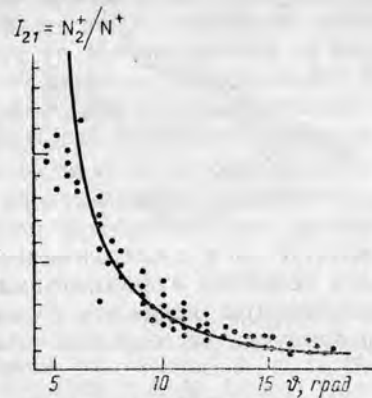


Рис. 6.6. Угловая зависимость относительного выхода молекулярных ионов азота  $N_2^+$  ( $E=30$  кэВ) при отражении от поверхности поликристалла меди; кривая соответствует закону  $\theta^{-3}$  для многократного рассеяния молекулярного иона на атомах поверхности кристалла [по: Парлис Э. С. и др. Атомные столкновения в газах и на поверхности твердых тел. Ташкент, 1988]

доченность в расположении атомов по всему объему кристаллу, ряды атомов на его поверхности образуют своеобразные поверхностные структуры. В одних направлениях (когда ряд атомов второго слоя оказывается как раз посередине между соседними рядами атомов первого слоя) это *полуканалы*, в других (когда упорядоченные ряды атомов разных слоев кристалла оказываются строго один под другим) — глубокие *провалы*. Коль скоро бездиссоциативное отражение молекулярных ионов обусловлено коррелированными столкновениями с атомами мишени, оно должно зависеть от взаимного расположения атомов в поверхностном слое кристалла и в ближайших к нему слоях, а следовательно, от того, как ориентирован монокристалл относительно направления падающего и отраженного пучков.

Эксперименты с монокристаллическими мишенями выявили строгую корреляцию между наличием на поверхности мишени тех или иных упорядоченных структур в направлении плоскости рассеяния, с одной стороны, и видом особенностей на кривой зависимости фракций выживания молекулярных ионов от азимутального угла поворота мишени — с другой: поверхностным полуканалам всегда соответствуют максимумы, а провалам — минимумы на этой кривой. Направляя пучок молекулярных ионов на разные грани монокристалла, можно в направлении одной и той же кристаллографической оси наблюдать либо максимум, либо

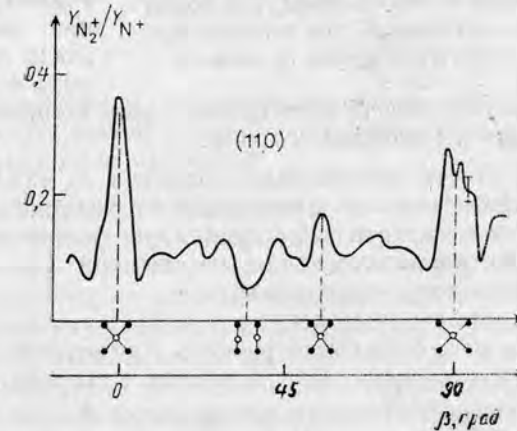
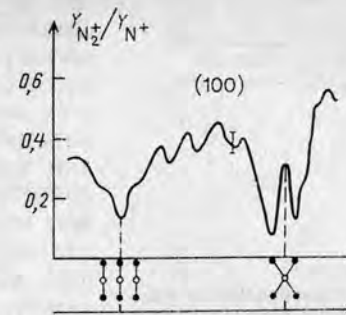
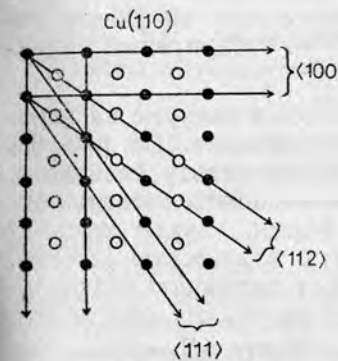
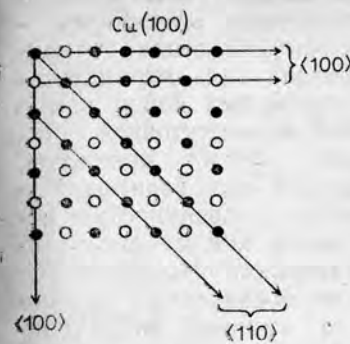


Рис. 6.7. Относительная вероятность бездиссоциативного отражения молекулярных ионов азота ( $E=30$  кэВ) от граней (100) и (110) монокристалла меди (случай симметричного отражения:  $\alpha = \frac{1}{2} \theta = 7^\circ$ ) [по: Balashova L. L. // Rad. Effects and Defect in Solids. 1991. Vol. 115. P. 289]. По оси абсцисс отложен азимутальный угол мишени, отсчитываемый от направления  $\langle 100 \rangle$

минимум бездиссоциативного отражения; все определяется тем, что соответствует данной оси на данной грани: полуканал или провал (рис. 6.7).

#### Образование отрицательных молекулярных ионов вблизи поверхности металлов

Экспериментальные исследования показывают, что при взаимодействии молекул с поверхностью металлов с большой вероятностью образуются отрицательные молекулярные ионы. Энергия сродства электрона с нейтральной молекулой  $\epsilon$  всегда очень мала, во всяком случае значительно меньше, чем работа выхода электрона с поверхности металла. Какой механизм делает тем не менее выгодным перехват молекулой электрона с поверхности? Этот вопрос вызывает сейчас очень большой интерес. Тем более

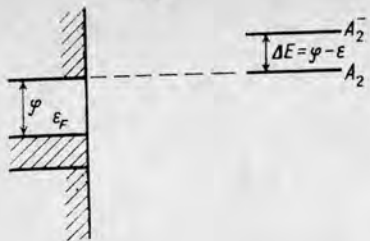


Рис. 6.8. Схема относительного расположения энергетических уровней двухатомной молекулы  $A_2$  и молекулярного иона  $A_2^-$  при подхвате электрона с поверхности металла

лекулярных пучков вошло новое понятие — «гарпунный механизм». Разберем его суть.

Пусть нейтральная молекула  $A_2$  находится в вакууме на некотором далеком расстоянии от поверхности металла. На рис. 6.8 слева схематически изображен энергетический спектр свободных электронов в металле, штриховкой показана занятая электронами часть зоны проводимости,  $\epsilon_F$  — уровень Ферми. Будем рассматривать нашу молекулу и металл как единую физическую систему. На рис. 6.8 справа уровень  $A_2$  соответствует состоянию нейтральной молекулы. При большом удалении молекулы от поверхности уровень  $A_2^-$  поднят над уровнем  $A_2$  на величину  $\Delta E = \phi - \epsilon$ , где  $\phi$  — работа выхода электрона с поверхности металла в вакуум.

Рассмотрим по отдельности взаимодействие с металлом нейтральной молекулы  $A_2$  и отрицательного иона  $A_2^-$  по мере их сближения с поверхностью, не учитывая пока возможность перехода электрона от металла к молекуле или обратно. В первом случае это взаимодействие «включается» лишь при очень тесном сближении, где оно имеет характер отталкивания. Совсем иная картина возникает по мере приближения к методу отрицательного иона  $A_2^-$ . Поляризуя газ свободных электронов в металле, отрицательный заряд иона  $A_2^-$  создает в нем положительный заряд (расположенный зеркально относительно поверхности), и сам, под влиянием этого наведенного заряда, все сильнее притягивается к поверхности металла. Лишь на совсем малом расстоянии, где непосредственно вступают в действие силы межатомного взаимодействия, это притяжение сменяется отталкиванием. Кривые потенциальных энергий взаимодействия («термов») для нейтральной молекулы  $A_2$  и отрицательного иона  $A_2^-$  показаны схематически на рис. 6.9; по оси абсцисс отложено расстояние от поверхности металла до центра масс молекулы  $A_2$  или иона  $A_2^-$ . Рассмотрим теперь систему этих двух термов совместно.

что в результате исследований самого последнего времени складывается представление о процессе образования отрицательных молекулярных ионов как о важнейшей промежуточной стадии многих других процессов, происходящих при взаимодействии молекул с поверхностью металлов, таких, как их диссоциация, хемисорбция (образование химических соединений на поверхности), сильное вибрационное возбуждение молекул. В связи с разработкой этого вопроса в литературу по физике молекул — «гарпунный механизм».

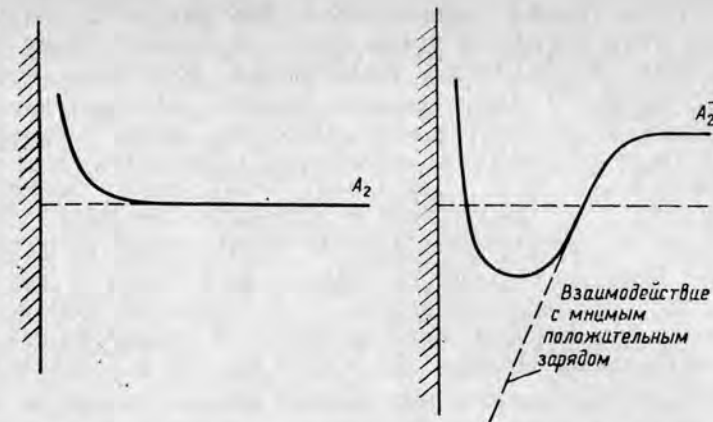


Рис. 6.9. Схематическое изображение взаимодействия нейтральной молекулы  $A_2$  и молекулярного иона  $A_2^-$  с поверхностью металла без учета процесса перезарядки

Рис. 6.10 соответствует случаю, когда начальная кинетическая энергия  $E$  нейтральной молекулы  $A_2$ , движущейся перпендикулярно поверхности металла, больше, чем энергия перехода  $A_2 \rightarrow A_2^-$ :  $E > \Delta E = \phi - \epsilon$ . Пока мы не учитываем возможности такого перехода, картина движения молекулы  $A_2$  предельно проста: молекула доходит до классической точки поворота  $R_1$ , где вся ее кинетическая энергия расходуется на преодоление потенциальной энергии отталкивания от поверхности, а затем повторяет тот же путь в обратном направлении и уходит на бесконечность. Теперь учтем возможность для молекулы подхватить электрон с поверхности металла. В принципе, это может произойти в любой точке

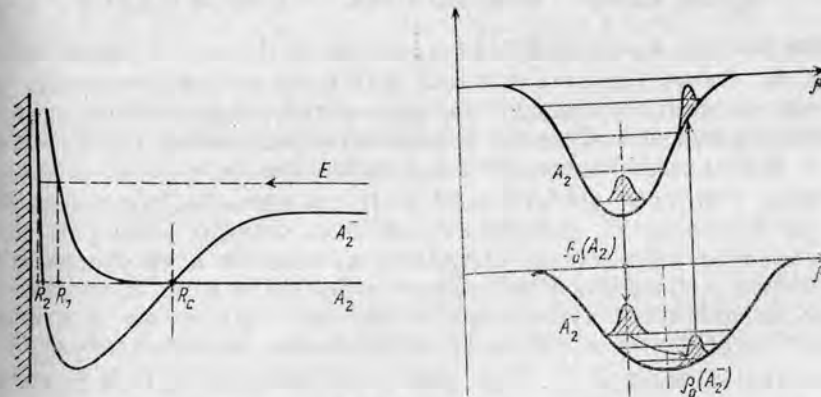


Рис. 6.10. Схема пересечения термов нейтральной молекулы  $A_2$  и отрицательного молекулярного иона  $A_2^-$  вблизи поверхности металла

Рис. 6.11. Принцип Франка—Кондона применительно к процессу перезарядки  $A_2 \rightleftharpoons A_2^-$  вблизи поверхности металла

ее траектории, однако в общем случае вероятность такого перехода очень мала, поскольку везде, кроме окрестности точки пересечения термов  $R_c$ , изменение электронного состояния молекулы  $A_2 \rightarrow A_2^-$  требует соответствующего резкого изменения кинетической энергии ее поступательного движения. Лишь в окрестности точки  $R_c$  переход электрона от металла к молекуле возможен с большой вероятностью. Это значит, что какая-то значительная часть молекул  $A_2$ , движущихся к поверхности металла, дойдя до расстояния  $R_c$ , превращается здесь в отрицательные молекулярные ионы  $A_2^-$ . Продолжая далее свое движение в сторону поверхности, они доходят до точки поворота  $R_2$  и поворачивают обратно. При повторном прохождении точки пересечения термов  $R_c$  как фракцией нейтральных молекул  $A_2$ , так и фракцией отрицательных ионов  $A_2^-$  снова возможен электронный обмен с металлом и в одну и в другую сторону:  $A_2 \rightleftharpoons A_2^-$ . В результате этих процессов в отраженном от поверхности металла молекулярном пучке оказывается большая доля отрицательных ионов  $A_2^-$ .

В изложенном выше исключительно существенным моментом является то, что переход электрона от металла к молекуле осуществляется на далеком расстоянии от поверхности металла. Отсюда и термин — *гарпунный механизм*: «выбрасываемая» металлом навстречу приближающейся молекуле легкая частица — электрон — играет роль гарпуна, с помощью которого эта молекула (становясь отрицательным ионом) сильно притягивается к поверхности.

Через гарпунный механизм легко понять важную роль, которую играет связь между электронными и вибрационными степенями свободы молекулы в процессах ее диссоциации при отражении от поверхности. На рис. 6.11 схематически изображены кривые эффективной потенциальной энергии  $U_{A_1}(\rho)$  и  $U_{A_2^-}(\rho)$

межъядерного взаимодействия в молекуле  $A_2$  и в отрицательном ионе  $A_2^-$ . Здесь (не путать с рис. 6.10!) по оси абсцисс откладывается расстояние  $\rho$  между ядрами, образующими молекулу или молекулярный ион. Средние равновесные расстояния между ядрами в нейтральной молекуле и в отрицательном ионе не совпадают друг с другом:  $\rho_0(A_2) \neq \rho_0(A_2^-)$ . Пусть поток нейтральных молекул  $A_2$  падает на поверхность металла, причем молекулы вибрационно не возбуждены. «Нулевые колебания» ядер совершаются вокруг равновесного расстояния  $\rho_0(A_2)$ . По мере поступательного движения молекул в сторону металла где-то на удалении  $R_c$  от поверхности происходит превращение части молекул  $A_2$  в отрицательные ионы  $A_2^-$ . При этом ядра молекул, будучи тяжелыми частицами, не успевают за этим электронным переходом (принцип Франка — Кондона; см. рис. В.11) и, оказавшись в новой для себя потенциальной яме  $U_{A_2^-}(\rho)$ , остаются по-прежнему

му на взаимном расстоянии около  $\rho_0(A_2)$ , которое не совпадает с

равновесным расстоянием между ними в новой яме. Возникают колебания ядер относительно этого нового равновесного положения  $\rho_0(A_2^-)$ ; другими словами, неотъемлемой стороной процесса перехвата электрона от металла к молекуле является интенсивное заселение вибрационных состояний образующегося молекулярного иона  $A_2^-$ . То же самое происходит после отражения молекулярных ионов от поверхности металла, при повторном прохождении ими окрестности точки пересечения термов  $R_c$ . В результате и молекулярные ионы, и нейтральные молекулы, уходя от металла в вакуум, оказываются с большой вероятностью в возбужденных вибрационных состояниях, т. е. предрасположены к быстрой диссоциации на составляющие их атомы и атомарные ионы.

Мы разбирали случай, когда кинетическая энергия поступательного движения молекул в сторону поверхности металла («поперечная» энергия молекул) больше, чем энергия перехода  $A_2 \rightarrow A_2^-$ . В противоположном случае, когда  $E < \Delta E = \varphi - \epsilon$ , образование свободных отрицательных молекулярных ионов  $A_2^-$ , которые могли бы в конечном счете уйти от металла в вакуум, невозможно. Однако, согласно концепции гарпунного механизма, отрицательные молекулярные ионы интенсивно образуются на промежуточной стадии процессов отражения, диссоциации и хемосорбции нейтральных молекул (рис. 6.12). В этом случае отрицательные ионы  $A_2^-$ , коль скоро они образовались благодаря переходу электрона от металла к молекулам, оказываются «запертыми» в ограниченной области движения между точками поворота  $R_2$  и  $R_3$ . При этом, как ясно из предыдущего, многократное пересечение ими окрестности точки  $R_c$  способствует интенсивному заселению возбужденных вибрационных состояний.

Все изложенное выше относится к случаю относительно небольших скоростей молекул и молекулярных ионов, когда непосредственный удар падающих тяжелых частиц в атомы мишени не играет существенной роли для изменения внутреннего состояния молекулы. При всем этом речь идет о поперечной составляющей скорости. Если молекулярные ионы испытывают скользящее отражение от поверхности кристалла, то эта нормальная составляющая может быть малой и при значительной начальной кинетической энергии падающих частиц. В связи с этим концепция гарпунного механизма используется не только применительно к процессам с участием медленных молекулярных ионов, но и для объяснения большого выхода отрицательных молекулярных ионов при отражении быстрых положительно заряженных молекулярных ионов от поверхности кристаллов (рис. 6.13).

## § 6.2. ПРИМЕНЕНИЕ МЕТОДА КОМПЬЮТЕРНОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ

Метод компьютерного моделирования глубоко проник в практику научных исследований в физике взаимодействия частиц с

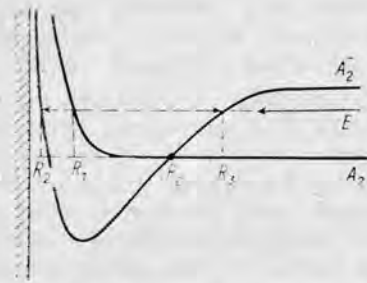


Рис. 6.12. «Гарпунный механизм» образования отрицательных молекулярных ионов  $A_2^-$  вблизи поверхности металла при малых «поперечных» энергиях молекулы  $A_2$

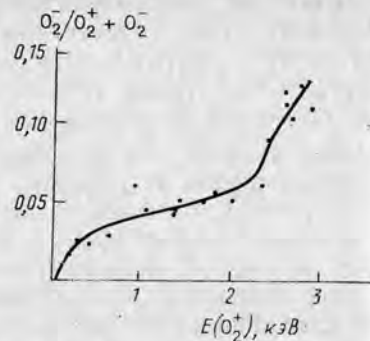


Рис. 6.13. Относительный выход отрицательных молекулярных ионов кислорода  $O_2^-$  при скользящем симметричном ( $\alpha=5^\circ$ ) отражении ионов  $O_2^+$  от грани (111) кристалла серебра [по: Reijnen P.H.F. et al. // Surface Science. 1989. Vol. 221. P. 427]

веществом. В предыдущей лекции упоминался один пример такого применения: именно с «машинного эксперимента», выполненного на ЭВМ, начались современные исследования явления каналирования (см. § 5.1). В настоящей лекции мы дополним его другими примерами. При этом мы оставим в стороне математическую сторону метода, включая вопросы статистической достоверности получаемых с его помощью результатов, и сосредоточимся на физической сути самих моделируемых процессов.

Типичный расчет по методу компьютерного моделирования в области взаимодействия частиц с веществом начинается с того, что задается закон взаимодействия отдельной частицы, попадающей в образец, с его элементами (атомами); при этом подразумевается, что свойства самого вещества мишени нам известны. Здесь сразу же происходит естественное деление всех рассматриваемых задач на два типа, два класса. К первому относятся случаи, когда возмущения, вносимые в вещество мишени каждой отдельной частицей падающего потока, оказываются мало существенными для других частиц этого потока. В таких случаях, разыгрывая на ЭВМ с помощью тех или иных стандартных программ Монте-Карло всевозможные события, достаточно проследить за каждой из частиц падающего потока независимо от других частиц. Гораздо сложнее задачи второго типа, когда приходится учитывать, как по мере попадания в мишень все новых и новых частиц накапливаются происходящие при этом в самой мишени изменения или как возмущение, пусть и неустойчивое, вносимое одной из частиц в вещество мишени, тут же воспринимается следующей за ней другой частицей.

Компьютерное моделирование процессов взаимодействия заряженных частиц с веществом опирается и на законы классической

механики, и на квантовую механику. Квантовая механика входит в эти расчеты вместе с потенциалами ион-атомного взаимодействия, распределением электронной плотности (в пределах одного атома или всего образца); на квантовомеханическом уровне трактуются тепловые колебания атомов решетки в твердом теле, явления выстроенности углового момента атомов мишени или пролетающего иона и т. п. Из уравнений классической механики находятся, по заданным начальным условиям, траектории движения частиц. Метод компьютерного моделирования исключительно нагляден. Однако здесь же таится опасность переоценить значение метода, если забыть, что всякий раз, еще до обращения к ЭВМ, мы сами задаем ту или иную физическую модель интересующего нас процесса, т. е. уже на этой стадии упрощая, моделируя истинную картину взаимодействия.

### Моделирование отражения ионов малой энергии от поверхности кристалла

Отражение заряженных частиц от поверхности твердых тел (так называемое *обратное рассеяние*) широко используется для определения целого ряда параметров, характеризующих свойства твердых тел. Чем легче бомбардирующие частицы и чем больше их энергия, тем глубже проникают они в глубь образца. Поэтому особый интерес вызывает процесс отражения тяжелых ионов малых энергий, несущих информацию об очень небольшом числе самых верхних атомных слоев мишени. Наиболее известный пример применения этого метода — изучение состава поверхности. Идея такого его применения чрезвычайно проста: в зависимости от того, сталкивается ли падающий ион с атомом одной или другой компоненты поверхности мишени, он, рассеиваясь на заданный угол, теряет разную долю своей энергии. Если падающий пучок ионов — моноэнергетический, то в энергетическом спектре ионов, рассеянных на заданный угол, мы ожидаем отдельные линии, положение каждой из которых будет указывать на массу атома, с которым произошло столкновение.

Действительно, пусть на мишень подает пучок ионов массы  $M_1$ , кинетическая энергия которых равна  $E_0$ . Пусть  $\vartheta$  — угол рассеяния иона  $M_1$  при столкновении с атомом  $M_2$  на поверхности мишени. Кинетическая энергия рассеянного иона определяется исходя из законов сохранения энергии и импульса частиц. Сами эти расчеты элементарны, но предположения, в рамках которых они проводятся на практике, заслуживают обсуждения. Допустим, атом мишени  $M_2$  можно считать свободным (т. е. пренебречь его связью с окружением) и неподвижным (т. е. пренебречь его тепловыми колебаниями). Тогда для энергии рассеянной частицы при  $M_1 < M_2$  получаем

$$E_1(\vartheta) = E_0 \left( \frac{M_1}{M_1 + M_2} \right)^2 \left( \cos \vartheta + \sqrt{\frac{M_2^2}{M_1^2} - \sin^2 \vartheta} \right)^2. \quad (6.8)$$

В противоположном случае ( $M_1 > M_2$ ) угол вылета рассеянного иона ограничен значением

$$\vartheta_{\max} = \arcsin \frac{M_2}{M_1}, \quad (6.9)$$

а в пределах конуса  $\vartheta < \vartheta_{\max}$  функция  $E_1(\vartheta)$  двузначна: в формуле (6.8) перед корнем стоит в этом случае знак  $\pm$ .

Каждому значению массы атомов на поверхности мишени  $M_2$ ,  $M_2'$  и т. д. соответствует свое значение энергии  $E_1(\vartheta)$ . Однако при количественном анализе состава поверхности недостаточно знать лишь положение пиков в спектре энергии рассеянных ионов: относительное количество (концентрация) атомов разного сорта на поверхности может быть найдено, только если установлена относительная интенсивность этих пиков. А она определяется как кинематикой элементарного акта столкновения иона с атомом мишени, так и многими другими факторами. Особенно трудными для аналитического исследования являются эффекты многократного рассеяния, в том числе связанные с проникновением рассеиваемых частиц в глубь образца. Здесь-то и оказывается незаменимым компьютерное моделирование, позволяющее проследить за самыми замысловатыми траекториями и учесть их вклад в спектры и угловые распределения отраженных частиц.

Остановимся на конкретном примере. Ионы калия  $K^+$  кинетической энергии 600 эВ падают на поверхность (100) монокристалла золота. Золото имеет гранцентрированную кубическую решетку и может находиться в двух модификациях, отличающихся друг от друга структурой поверхностного слоя (100):  $(1 \times 1)$  и  $(1 \times 2)$ . В варианте  $(1 \times 2)$  каждый второй ряд атомов поверхностного слоя в направлении  $\langle 110 \rangle$  отсутствует, т. е. решетка поверхностного слоя здесь как бы прорезана по сравнению с «обычным» вариантом  $(1 \times 1)$ . На рис. 6.14 показан спектр ионов  $K^+$  при почти симметричном отражении от поверхности образца: угол падения  $\varphi = 30^\circ$ , угол рассеяния  $\vartheta = 70^\circ$ . В одном случае мишень ориентирована таким образом, что ось  $\langle 110 \rangle$  на ее поверхности лежит в плоскости рассеяния (азимутальный угол  $\varphi = 0^\circ$ ), в другом — мишень повернута на угол  $\varphi = 27,5^\circ$ . В обоих случаях вместо одиночного пика, чего надо было бы ожидать, если свести все дело к однократному рассеянию, видна гораздо более сложная картина с двумя большими пиками в спектре отраженных ионов. Положение левого пика вполне соответствует формуле (6.8). Природу правого пика раскрывает компьютерное моделирование процесса отражения.

Представленные на рис. 6.14 гистограммы получены суммированием вкладов различных типов траекторий движения частиц, рассчитанных методом Монте-Карло в предположении об однократных, а также последовательных кратных столкновениях с атомами нескольких верхних слоев кристалла. В целом расчет точно передает форму спектра и характер его изменения с изменением ориентации мишени. Механизм отражения ионов весьма непрост,

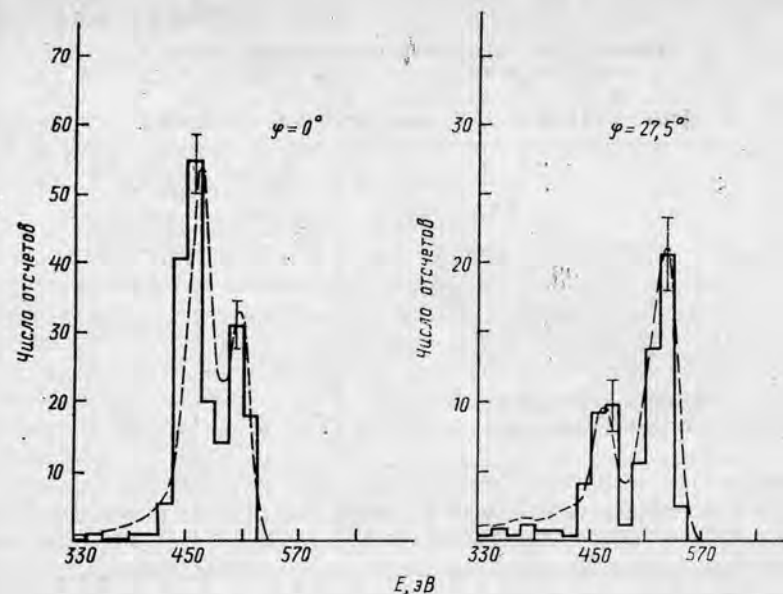


Рис. 6.14. Энергетическое распределение ионов  $K^+$  с энергией 600 эВ при отражении от поверхности (100) монокристалла золота; структура поверхностного слоя  $(1 \times 2)$ . Пунктирные линии — экспериментальные данные; гистограммы — результат компьютерного моделирования. Угол  $\varphi$  отсчитывается от направления  $\langle 110 \rangle$  [по: Heiland W. // Vacuum. 1989. Vol. 39. P. 367]

это видно из табл. 6.1. Почти половина всех событий (43% при  $\varphi = 0^\circ$  и 48% при  $\varphi = 27,5^\circ$ ) приходится на сложные «зигзагообразные» траектории с участием большого числа слоев кристалла; они в основном и формируют правый пик в спектре. Что касается однократных столкновений, то они в основном формируют левый пик. При этом соотношение вкладов самого верхнего и следующих за ним слоев кристалла очень сильно меняется с поворотом мишени.

Здесь сделаем небольшое, но важное для дальнейшего отступление. Мы видим на примере рис. 6.14, что при рассеянии частицы на определенный угол из всех столкновений разной кратности однократные столкновения приводят к наибольшей потере энергии частицы. За этим фактом стоит весьма общая закономерность рассеяния быстрых частиц составной мишенью, которая известна не только применительно к взаимодействию заряженных частиц с веществом, но и в других разделах физики: при замедлении нейтронов, в физике ядерных реакций (где отдельно взятое ядро выступает как составная мишень), в адронной физике высоких энергий и др. В связи с этим рассмотрим в более общем виде, хотя и схематически, как выглядят потери энергии частиц при многократном рассеянии, и сравним их с потерями при однократном рассеянии. Пусть частица массы  $M_1$  рассеивается на некоторый

Таблица 6.1

Компьютерное моделирование отражения ионов  $K^+$  с энергией 600 эВ поверхностью  $(100) - (1 \times 2)$  монокристалла золота;  $\psi = 35^\circ$ ;  $\theta = 70^\circ$   
[по: Heiland W. // Vacuum. 1989. Vol. 39. P. 367]

Класс траекторий	Относительный вклад траекторий, %	
	Угол между плоскостью рассеяния и направлением <110>	
	$\varphi = 0^\circ$	$\varphi = 27,5^\circ$
Однократные столкновения с атомами первого слоя	5	11
Однократные столкновения с атомами второго или третьего слоя	29	13
Зигзагообразные траектории с участием атомов первых двух слоев	7	11
Зигзагообразные траектории с участием большого числа слоев кристалла	43	48
Двукратные и многократные столкновения без зигзагов в траекториях частиц	16	17

малый угол  $\theta \ll 1$ , взаимодействуя с парой частиц массы  $M_2$  (рис. 6.15). При однократном столкновении потерянная частицей энергия  $\Delta E(\theta) = E_0 - E_1(\theta)$  вычисляется по формуле

$$\Delta E^{(1)} \approx \frac{M_1}{M_2} \theta^2 \cdot E_0. \quad (6.10)$$

Для рассмотрения случая двукратного столкновения допустим, что наша пара частиц  $M_2$  лежит в плоскости рассеяния. Тогда отклонение на угол  $\theta$  при двукратном столкновении можно представить себе как рассеяние на углы  $\theta_1$  и  $\theta_2$  на первой и второй из частиц  $M_2$ , причем  $\theta_1 + \theta_2 = \theta$ . В этом случае, в отличие от формулы (6.10), потерянная



Рис. 6.15. Схема двукратного рассеяния ионов на поверхности кристалла

энергия

$$\Delta E^{(2)}(\theta_1, \theta_2) = \frac{M_1}{M_2} (\theta_1^2 + \theta_2^2) E_0 \quad (6.11)$$

не определяется однозначно углом рассеяния  $\theta$ . Подставляя в (6.11)  $\theta_1 = \theta_2 = 1/2 \theta$ , мы получаем потерянную энергию, которая вдвое меньше, чем при однократном столкновении:

$$\Delta E^{(2)}(1/2 \theta, 1/2 \theta) = 1/2 \Delta E^{(1)}(\theta). \quad (6.12)$$

Весь спектр потерянной энергии при двукратном столкновении занимает промежуток от  $1/2 \Delta E^{(1)}(\theta)$  до  $\Delta E^{(1)}(\theta)$ , но форма этого спектра определяется уже не только кинематикой процесса, но и угловым распределением рассеянных частиц в элементарном акте столкновения (зависимостью вероятности рассеяния от прицельного параметра), т. е. динамикой процесса взаимодействия частиц  $M_1$  и  $M_2$ ; она зависит также от взаимного расположения частиц  $M_2$ .

Теперь вернемся к обсуждению результатов компьютерного моделирования отражения ионов малой энергии от поверхности кристаллов. Итак, мы видели, что многократные столкновения вносят большой вклад в основные характеристики процесса отражения — угловые и энергетические распределения отраженных ионов. Следовательно, форма этих распределений должна быть чувствительной к параметрам, характеризующим взаимное расположение ближайших соседей в решетке кристалла. Благодаря этому обстоятельству с помощью метода обратного рассеяния ионов малой энергии удалось решить ряд важных задач диагностики поверхности кристаллов. Назовем некоторые из них, относящиеся к свойствам чистых поверхностей: наблюдение фазового перехода от структуры поверхностного слоя типа  $1 \times 1$  к структуре  $1 \times 2$  в монокристаллах платины и золота; измерение с хорошей точностью расстояния между первым и вторым слоями монокристалла (в кристалле молибдена, например, оно примерно на 0,2 Å меньше, чем соответствующее расстояние между двумя соседними слоями по всему объему кристалла); исследование корреляций ближнего порядка на поверхности монокристаллов и, в частности, их устойчивости при достижении точки фазового перехода. Во всех таких случаях данные о параметрах кристалла извлекались с помощью метода компьютерного моделирования.

#### Компьютерное моделирование процесса каналирования антипротонов

В лекции 4 было рассказано о первых экспериментальных исследованиях атомных процессов с участием антипротонов. Разработка дальнейшей программы таких исследований опирается в значительной мере на расчеты методом компьютерного моделирования.

Из общих соображений можно ожидать, что эффект знака заряда, о котором шла речь в § 4.3, должен быть особенно сильным при прохождении через вещество каналированных протонов

и антипротонов. Факторы, действующие по-разному на каналированные протоны и антипротоны, можно разделить на две группы — «кинематического» и «динамического» характера. В первом случае имеются в виду качественные различия между траекториями движения протона и антипротона в канале: каналированные протоны стремятся занять место как можно ближе к середине канала, т. е. там, где плотность электронов среды, а следовательно, и ионизационное торможение проходящей частицы минимальны; антипротоны, наоборот, стремятся как можно ближе к цепочкам и плоскостям, формирующим канал, и тем самым не только проводят большую долю времени в области повышенной электронной плотности, но и, взаимодействуя при этом с ядрами атомов среды, легче, чем протоны, подвержены деканализованию. Что же касается различий динамического характера, то под ними подразумеваются в конечном счете различия в элементарном акте взаимодействия протона и антипротона с атомами вещества; оно проявляется, в частности, в том, что при одной и той же скорости и одном и том же прицельном параметре соударения протон и антипротон теряют в таком элементарном акте разную долю своей энергии.

Имея в виду все эти различия, проследим за движением протона и антипротона в канале. Возьмем для определенности случай осевого каналирования, ось  $z$  системы координат направим вдоль оси канала. Траектория движения частиц  $\mathbf{r}=\mathbf{r}(t)$  находится из уравнения классической механики

$$m \frac{d^2 \mathbf{r}}{dt^2} = \mathbf{F}_{\text{упр}} + \mathbf{F}_{\text{торм}}, \quad (6.13)$$

где  $m$  — масса частицы,  $\mathbf{F}_{\text{упр}}$  и  $\mathbf{F}_{\text{торм}}$  — отклоняющая сила, действующая на частицу со стороны атомов, формирующих канал, и сила ионизационного торможения:

$$\begin{aligned} \mathbf{F}_{\text{упр}}(\mathbf{r}) &= -\text{grad} \left\{ \sum_i u_i(\mathbf{r}) \right\}, \\ \mathbf{F}_{\text{торм}}(\mathbf{r}) &= -\frac{\mathbf{v}}{v} \left( -\frac{dE}{dz} \right). \end{aligned} \quad (6.14)$$

Обычно потенциал взаимодействия проходящей частицы с атомами стенок канала аппроксимируется суммой непрерывных потенциалов (потенциалов Линдхарда), соответствующих небольшому числу ближайших рядов атомов. В этом приближении продольная составляющая отклоняющей силы обращается в нуль, а ее поперечная составляющая не зависит от координаты частицы  $z$ :

$$\mathbf{F}_{\text{упр}}(\mathbf{r}) = \{F_x(x, y), F_y(x, y), 0\}. \quad (6.15)$$

Что касается силы ионизационного торможения (здесь, отходя от стандартного обозначения  $\left(-\frac{dE}{dx}\right)$ , мы запишем ее как  $\left(-\frac{dE}{dz}\right)$ ,

то ввиду очень малой кривизны траектории движения каналированной частицы поперечная составляющая этой силы пренебрежимо мала по сравнению с ее продольной составляющей:

$$\mathbf{F}_{\text{торм}}(\mathbf{r}) \approx \left\{ 0, 0, -\left(-\frac{dE}{dz}\right) \right\}. \quad (6.16)$$

Изменение силы торможения вдоль траектории движения частицы  $\mathbf{r}=\mathbf{r}(t)$  определяется «профилем» распределения электронной плотности  $\rho_e(\mathbf{r})$  по каналу. Известен ряд методов (например, рентгеновский анализ вещества), которые используются для определения этого распределения. С неплохой точностью можно считать, что до некоторого радиуса  $R$  (приблизительно в районе расположения последних занятых оболочек атома) электронная плотность в атомах кристалла такая же, как и в соответствующем свободном атоме; все же остальное пространство между сферами радиуса  $R$  заполнено однородным электронным газом постоянной плотности.

Моделируя прохождение частицы — протона или антипротона — по каналу, будем считать, что при данном прицельном параметре в ее взаимодействие с электронами внутренних оболочек атомов и с внешними электронами дает аддитивные вклады в потери энергии частицы:

$$\Delta E(b) = \Delta E_{\text{внутр}}(b) + \Delta E_{\text{внешн}}(b) \quad (6.17)$$

(хотя, конечно, подразделять атомные оболочки на внутренние и внешние можно только условно). Для расчета первого слагаемого в (6.17) удобно воспользоваться «полуклассическим» подходом, когда движение пролетающей частицы трактуется классически, а все, что касается атома среды, — в рамках квантовой механики. Тогда потеря энергии частицы за счет взаимодействия с каждой  $i$ -й внутренней оболочкой атома определяется выражением

$$\Delta E_i(b) = \sum_f (\varepsilon_f - \varepsilon_i) P_{i \rightarrow f}(b). \quad (6.18)$$

Здесь  $\varepsilon_i, \varepsilon_f$  — энергия начального и конечного состояний атомного электрона (причем конечного — не только на возбужденном дискретном уровне, но и в непрерывном спектре), а  $P_{i \rightarrow f}(b) = |A_{i \rightarrow f}(b)|^2$  — вероятность перехода  $i \rightarrow f$ , индуцированного частицей, которая проходит с прицельным параметром  $b$ . В полуклассическом приближении амплитуда этой вероятности есть интеграл по времени движения частицы вблизи атома:

$$A_{i \rightarrow f}(b) = \frac{1}{\hbar} \int_0^{\infty} e^{i\omega_{fi}t} \left\langle f \left| \frac{Z_1 e^{\mathbf{z}}}{|\mathbf{r}(t) - \mathbf{r}_i|} \right| i \right\rangle dt, \quad (6.19)$$

где  $\omega_{fi} = \frac{1}{\hbar} (\varepsilon_f - \varepsilon_i)$  — частота перехода. В нашем случае  $Z_1 = \pm 1$  для протона и антипротона соответственно. Полная по-



теря энергии частицей за счет возбуждения ионизации всех внутренних оболочек есть сумма выражений (6.18):

$$\Delta E_{\text{внутр}}(b) = \sum_i \Delta E_i(b). \quad (6.20)$$

В простейшем варианте подхода весь участок траектории  $r(t)$  вблизи атома можно считать прямолинейным. Тогда потеря энергии за счет взаимодействия с внутренними оболочками атома — это одно и то же для протона и антипротона. Если же учесть искривление траектории движения и (или) поляризацию атомных оболочек налетающей частицей, то тогда и возникает так называемый «динамический» эффект знака заряда, о котором говорилось выше.

Для расчета второго слагаемого в (6.17) можно воспользоваться формулами диэлектрической теории ионизационного торможения в приближении локальной плотности (см. § 3.4).

Итак, мы обсудили почти все, что необходимо задать для расчета траектории движения каналированного протона или антипротона. Теперь остается, пользуясь методом Монте-Карло, разыграть начальные координаты частицы  $x(t=0) = x_0$  и  $y(t=0) = y_0$  в поперечной плоскости и, решая численно с этими начальными условиями уравнение (6.13), «двигаться» вслед за частицей по каналу. Среди различных траекторий, которые мы найдем таким способом, могут оказаться отдельные опасные траектории, проходящие особенно близко от атомов решетки. Метод статистического моделирования позволяет автоматически отследить такие

события и, как только частица оказалась вблизи какого-нибудь атома на расстоянии меньшем, чем некоторое заданное критическое расстояние  $r_c$  (обычно оно выбирается порядка 0,01 Å), перевести расчет дальнейшего движения такой частицы в другой режим, считая, что произошел акт деканализирования.

На рис. 6.16 приведен пример расчетов, выполненных методом компьютерного моделирования для каналированных протонов и антипротонов, проходящих через тонкую кремниевую пленку. При равномерном распределении начальных координат частиц  $(x_0, y_0)$  на входе в канал их угловые распределения на выходе из канала качественно различаются между собой; это связано с тем, что при каналировании протоны собираются как можно дальше от рядов атомов кристалла, антипротоны, напротив, непосредственно вблизи этих рядов. Машинный эксперимент показывает, что кинематические и динамические различия во взаимодействии каналированных протонов и антипротонов с веществом проявляются и в энергетических распределениях частиц, прошедших через пленку. В целом каналированные антипротоны теряют больше энергии, чем каналированные протоны, и это связано прежде всего с различием траекторий их движения в канале («кинематический эффект»). Однако величина разности этих потерь весьма чувствительна и к «динамическим» эффектам знака заряда частицы.

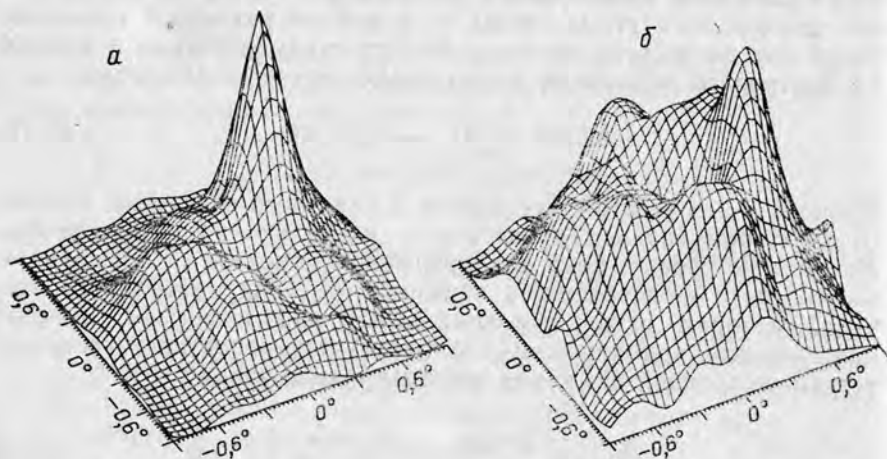


Рис. 6.16. Моделирование прохождения протонов (а) и антипротонов (б) с начальной энергией 200 кэВ через кремниевую фольгу толщиной 3000 Å вдоль канала  $\langle 110 \rangle$ : угловое распределение частиц на выходе из канала [по: Балашова Л. Л. и др. // Мат-лы XX Всесоюз. совещ. по физике взаимодействия заряженных частиц с кристаллами, 1990, М.: Изд-во Моск. ун-та, 1991. С. 45]

## РАЗДЕЛ II ЭЛЕКТРОМАГНИТНОЕ ИЗЛУЧЕНИЕ

### Лекция 7

#### § 7.1. ПРОХОЖДЕНИЕ $\gamma$ -ИЗЛУЧЕНИЯ ЧЕРЕЗ ВЕЩЕСТВО

Общие вопросы прохождения через вещество электромагнитного излучения (видимого света, инфракрасного, ультрафиолетового, рентгеновского излучения) обычно относят к оптике и атомной физике. Здесь мы исследуем прохождение через вещество жесткого электромагнитного излучения — с энергией отдельных фотонов до нескольких десятков и сотен МэВ. В следующих параграфах будут рассмотрены два особых вопроса из области современных исследований по физике ядра и элементарных частиц, непосредственно примыкающих к проблеме прохождения электромагнитного излучения через вещество.

В широком диапазоне энергий  $\gamma$ -квантов сечение их поглощения атомами вещества складывается из сечений трех процессов — фотоэффекта, эффекта Комптона и образования электрон-позитронных пар:

$$\sigma_{\text{полг}} = \sigma_{\text{фот}} + \sigma_{\text{К}} + \sigma_{\text{пар}}. \quad (7.1)$$

При фотоэффекте вся энергия  $\gamma$ -кванта  $E_{\gamma} = h\nu$  передается электрону атома



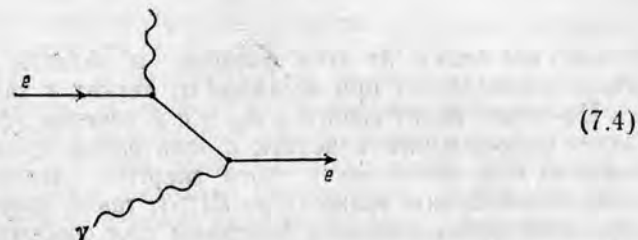
кинетическая энергия вылетающего электрона  $T_e$  тем больше, чем ниже потенциал ионизации  $I_i$  соответствующей атомной оболочки. С точностью до энергии отдачи, приходящейся на образующийся ион  $A^{+}$ , которая даже в случае самых легких атомов очень мала, имеет место простое соотношение:

$$T_e = E_{\gamma} - I_i. \quad (7.3)$$

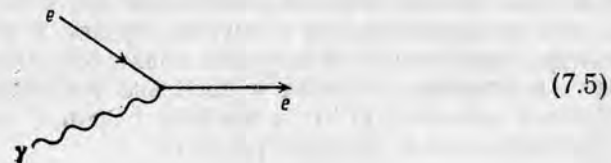
Если проследить, как разворачивается картина атомного фотоэффекта по мере увеличения энергии фотона, то бросаются в глаза две ее особенности (рис. 7.1): а) наличие резких краев поглощения на пороге ионизации каждой очередной оболочки или под-

оболочки; б) очень быстрый спад сечения в сторону увеличения энергии  $E_{\gamma}$  после каждого из значений  $I_i$ . Сочетание этих двух особенностей создает характерную пилообразную форму кривой  $\sigma_{\text{фот}}(E_{\gamma})$ .

В квантовой электродинамике атомный фотоэффект изображается диаграммами Фейнмана, простейшая из которых имеет следующий вид:



Здесь верхняя волнистая линия отображает взаимодействие одного из атомных электронов с суммарным электрическим полем ядра и остальных электронов, а нижняя вершина — непосредственно процесс поглощения фотона этим электроном. Тот же процесс поглощения фотона свободным электроном, который можно было бы изобразить диаграммой



абсолютно запрещен, так как для свободного электрона в процессе (7.5) нельзя одновременно удовлетворить законам сохранения энергии и импульса. Таким образом, наличие «третьего тела», с которым был бы как-то связан наш электрон, — необходимое условие поглощения им фотона. Роль такого «третьего тела» в реальной ситуации (7.2) играет ион  $A^{+}$ , а мера связи с ним электрона — это потенциал ионизации  $I_i$ . Чтобы судить, насколько существенна эта связь для обеспечения возможности фотоэффекта, надо сравнить  $I_i$  с энергией фотона  $E_{\gamma}$ . С ростом  $E_{\gamma}$  «связанность» электрона в атоме как бы ослабевает, а при  $E_{\gamma} \gg I_i$  и вообще пропадает; в таких условиях фотоэффект практически невозможен. Отсюда видно, что при одной и той же энергии фотонов электроны внутренних оболочек атомов (если, конечно,  $E_{\gamma}$  выше соответствующих порогов ионизации) дают гораздо больший вклад в процесс фотопоглощения, чем электроны внешних оболочек. Ясно также, что при больших  $E_{\gamma}$  вероятность фотоэффекта должна расти с ростом атомного номера вещества.

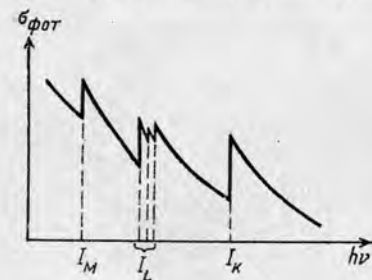


Рис. 7.1. Схема энергетической зависимости сечения атомного фотоэффекта. Отдельно показано расщепление края поглощения на пороге ионизации  $L$ -оболочки

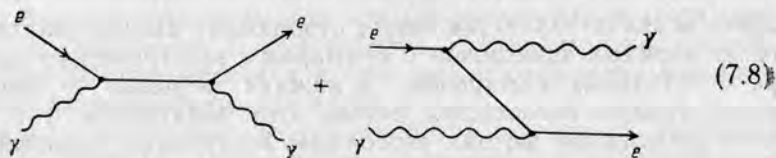
Теоретические расчеты в рамках квантовой электродинамики подтверждают эти качественные соображения. Сечение фотоэффекта действительно быстро убывает с ростом энергии фотонов:

$$\sigma_{\text{фот}} \sim \frac{Z^5}{E_\gamma^{7/2}}; \quad E_\gamma > I_i; \quad (7.6)$$

$$\sigma_{\text{фот}} \sim \frac{Z^5}{E_\gamma}; \quad E_\gamma \gg I_i \quad (7.7)$$

и, как мы видим из этих формул, в области больших энергий очень резко растет при переходе от легких к тяжелым элементам.

По-иному ведет себя и с  $E_\gamma$ , и с  $Z$  сечение эффекта Комптона. Здесь фотон, взаимодействуя с электроном среды, не исчезает, а, передав ему лишь часть своей энергии, рассеивается с увеличением своей длины волны. При  $E_\gamma \gg I_i$  такой процесс описывается с помощью фейнмановских диаграмм для свободного электрона:



(7.8)

При этом полное сечение комptonовского рассеяния  $\gamma$ -квантов на атоме пропорционально числу электронов в атоме, т. е. атомному номеру вещества  $Z$ . Квантовая электродинамика позволяет получить аналитическое, хотя и довольно громоздкое, выражение для сечения процесса (7.8); в пределе  $E_\gamma \gg m_e c^2$  это сечение обратно пропорционально энергии  $\gamma$ -кванта:

$$\sigma_k \Big|_{E_\gamma \gg m_e c^2} \sim \frac{Z}{E_\gamma}. \quad (7.9)$$

При  $E_\gamma > 2m_e c^2$  становится энергетически возможным процесс превращения  $\gamma$ -кванта в электрон-позитронную пару. Как и поглощение фотона электроном, этот процесс не может идти в отсутствие дополнительного тела. В качестве такового могут выступать и электрон, и атомное ядро. В первом случае из-за малой массы электрона порог рождения пары резко возрастает по сравнению с суммой масс электрона и позитрона:

$$E_\gamma |_{\gamma \rightarrow e + e^+} > 4m_e c^2; \quad (7.10)$$

сечение рождения пары на атомных электронах, в расчете на атом, пропорционально  $Z$ . Рождение пары на ядре атома более существенно. Для «голого» ядра соответствующее сечение пропорционально  $Z^2$ . В действительности экранировка электрического поля ядра атомными электронами несколько ослабляет эту зави-

симость от  $Z$ , а также влияет на характер энергетической зависимости сечения. В интервале энергий  $m_e c^2 \ll E_\gamma < \frac{m_e c^2}{\alpha Z^{1/3}}$  сечение образования пар следует формуле

$$\sigma_{\text{пар}} \sim Z^2 \ln \frac{E_\gamma}{m_e c^2}, \quad (7.11)$$

а далее его рост с энергией замедляется.

Полное сечение взаимодействия  $\gamma$ -квантов с атомом включает в себя помимо сечения поглощения также интегральное сечение упругого рассеяния  $\sigma_{\text{упр}}$  — его называют также когерентным или рэлеевским рассеянием. В отличие от комptonовского рассеяния, которое сопровождается ионизацией или возбуждением атома, когерентное рассеяние фотонов происходит на атоме как целом и оставляет его внутреннее состояние неизменным. Вклад когерентного рассеяния в полное сечение невелик во всем диапазоне энергий  $E_\gamma$ , наиболее заметен он в области перекрытия вкладов фотоэффекта и эффекта Комптона (рис. 7.2).

Основные составляющие сечения поглощения  $\gamma$ -квантов атомами вещества (7.1) по-разному ведут себя и в зависимости от  $Z$ , и в зависимости от энергии  $E_\gamma$ . Поэтому кривые  $\sigma_{\text{полг}}(E_\gamma)$  для легких и для тяжелых веществ существенно различаются по форме. При больших  $Z$ , из-за подавляющего вклада сечения фотоэффекта при  $E_\gamma \leq m_e c^2$  и вклада сечения образования пар при  $E_\gamma \gg m_e c^2$ , область, в которой существен комpton-эффект, узка, и кривая  $\sigma_{\text{полг}}(E_\gamma)$  имеет четкий минимум при энергиях  $\gamma$ -квантов в несколько МэВ (обратим внимание на логарифмическую шкалу на рис. 7.2). В веществах с малым  $Z$  область доминирующего

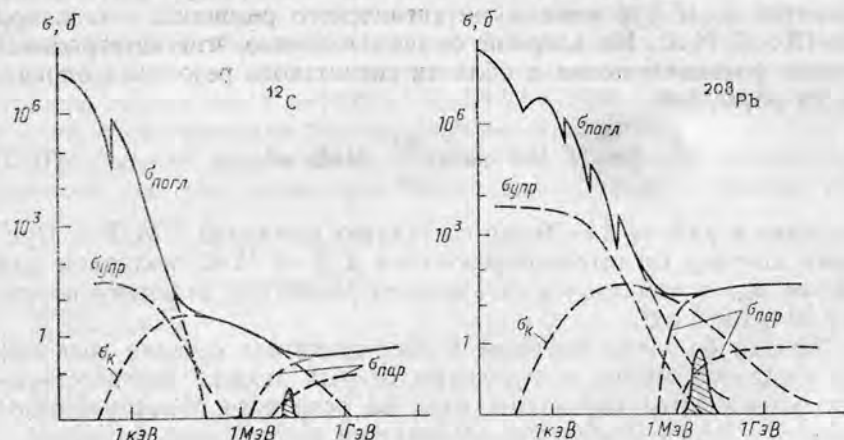


Рис. 7.2. Вклады различных механизмов в полное сечение взаимодействия фотонов с атомами углерода и свинца [по: J. Phys. Chem. Ref. Data, 1980, Vol. 9, P. 1023]. Штриховкой показано полное сечение поглощения  $\gamma$ -квантов ядром атома

вклада комптон-эффекта в полное сечение широка, и логарифмический рост сечения  $\sigma(E_\gamma)$ , связанный с образованием пар, начинается при значительно более высоких энергиях.

Сечение  $\sigma(E_\gamma)$  определяет линейный коэффициент поглощения фотонов

$$\mu(E_\gamma) = n_0 \sigma(E_\gamma), \quad (7.12)$$

которым характеризуется изменение интенсивности пучка фотонов данной энергии  $E_\gamma$  при прохождении через слой вещества:

$$I(x) = I_0 e^{-\mu(E_\gamma)x}. \quad (7.13)$$

### § 7.2. ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ $\gamma$ -КВАНТОВ С ЯДРАМИ АТОМОВ ВЕЩЕСТВА. ЭФФЕКТ МЕССБАУЭРА

Сравним сечения рассмотренных выше атомных процессов с сечениями ядерных реакций, вызываемых  $\gamma$ -квантами. Сечение поглощения в минимуме кривой  $\sigma_{\text{погл}}(E_\gamma)$  есть, по порядку величины, сечение комптон-эффекта при  $E_\gamma \approx m_e c^2$ , которое в свою очередь можно оценить просто из соображений размерности:

$$\sigma_k \sim Z \left( \frac{e^2}{m_e c^2} \right)^2. \quad (7.14)$$

Второй множитель — это квадрат «классического радиуса электрона»  $r_e^2 = (2,8 \cdot 10^{-13} \text{ см})^2$  — величина порядка геометрического сечения ядра  $\pi R_{\text{яд}}^2$ . Сечения ядерных электромагнитных процессов в разных ситуациях могут быть и много меньше, и много больше этой величины. Оценим сечение ядерного поглощения  $\gamma$ -квантов  $\sigma_{\text{яд}}(E_\gamma)$  в максимуме гигантского резонанса, т. е. при  $E_\gamma = 15 \div 25 \text{ МэВ}$ . Из ядерной физики известно, что интегральное сечение фотопоглощения в области гигантского резонанса определяется формулой

$$\int \sigma_{\text{яд}}(E_\gamma) dE_\gamma \approx 60 \frac{NZ}{A} \text{ МэВ} \cdot \text{мб}. \quad (7.15)$$

Для ядер в районе  $A=50$  это составляет примерно  $1 \text{ МэВ} \cdot \text{б}$ . Принимая ширину гигантского резонанса в  $5-8 \text{ МэВ}$ , получаем для сечения  $\sigma_{\text{яд}}$  в максимуме гигантского резонанса величину порядка  $0,16 = 10^{-25} \text{ см}^2$ .

Гораздо больших значений может достигать сечение поглощения  $\gamma$ -квантов ядром в отдельных острых пиках, соответствующих резонансным переходам ядра из основного в возбужденное состояние. Здесь можно воспользоваться резонансной формулой

$$\sigma_{\text{яд}} = g \frac{\pi}{k_\gamma^2} \frac{\Gamma^2}{(E_\gamma - E_{\text{рез}})^2 + \frac{1}{4} \Gamma^2}, \quad (7.16)$$

где  $g$  — статистический множитель порядка единицы,  $E_{\text{рез}}$  — центр тяжести резонансной линии в спектре фотопоглощения,  $\Gamma$  — ширина возбужденного состояния, в которое переходит ядро в результате поглощения  $\gamma$ -кванта. Из (7.16) видно, что при возбуждении самых низших уровней ядра сечение  $\sigma_{\text{яд}}$  достигает в максимуме ( $E_\gamma = E_{\text{рез}}$ ) огромной величины. Например,  $(\sigma_{\text{яд}})_{\text{max}} \sim 10^{-19} \text{ см}^2$  при  $E_{\text{рез}} = 0,1 \text{ МэВ}$ . Не будем, однако, забывать, что сечение резонансного фотопоглощения столь велико лишь в очень узкой — до  $10^{-8} \text{ эВ}$  — области энергий. Интегральное сечение фотопоглощения, соответствующее отдельному резонансу, ничтожно (здесь  $\sim 10^{-19} \text{ см}^2 \times 10^{-8} \text{ эВ} = 10^{-6} \text{ МэВ} \cdot \text{мб}$ ), и, следовательно, при обучении образца потоком  $\gamma$ -квантов с непрерывным спектром их резонансное поглощение ядром никакой роли в ослаблении этого потока не играет.

Иное дело — поглощение монохроматических  $\gamma$ -квантов с энергией, в точности равной резонансной энергии  $E_{\text{рез}}$ , так, как это имеет место в оптике: возбужденный атом вещества, совершив переход  $|n\rangle \rightarrow |0\rangle$ , испускает фотон с некоторой определенной энергией  $\hbar\omega = \epsilon_n - \epsilon_0$ , а другой атом поглощает этот фотон, совершая обратный переход  $|0\rangle \rightarrow |n\rangle$ . Однако в ядерной физике в обычных условиях такая ситуация оказывается невозможной: при испускании или поглощении  $\gamma$ -кванта ядро получает столь значительную отдачу, что система выходит из резонанса — энергия отдачи  $R = \frac{k_\gamma^2}{2MA}$  оказывается значительно больше, чем

собственная ширина резонанса  $\Gamma$ .

Рассмотрим соотношение этих двух величин на конкретном примере ядра  $^{57}\text{Fe}$  (рис. 7.3). Собственная ширина первого возбужденного состояния  $3/2^-$ , которую мы вычислим по времени жизни этого состояния  $\tau = \hbar/\Gamma$ , есть величина порядка  $10^{-8} \text{ эВ}$ . Сдвиг энергии  $\gamma$ -кванта, испускаемого при высвечивании этого состояния, составляет  $R = (0,014 \text{ МэВ})^2 / 2 \cdot 57 \cdot 938 \text{ МэВ} \approx 2 \cdot 10^{-3} \text{ эВ}$ , т. е. на много порядков больше ширины резонанса.

Наблюдение резонансного поглощения  $\gamma$ -квантов ядрами оказывается все-таки возможным благодаря эффекту Мессбауэра.

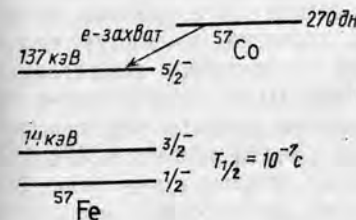


Рис. 7.3. Схема низших уровней ядра  $^{57}\text{Fe}$

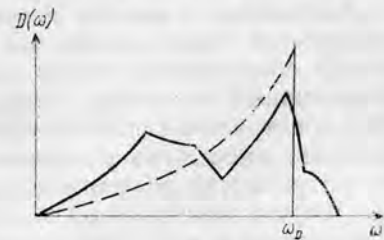


Рис. 7.4. Схема распределения спектральной плотности колебаний решетки  $D(\omega)$  и его аппроксимация по модели Дебая

Этот эффект был открыт в 1958 г. при изучении ядерного резонансного поглощения в кристаллах в условиях сильного охлаждения и источника и поглотителя. В курсе общей физики дается качественное объяснение эффекта Мёссбауэра: благодаря сильной связи между отдельным атомом кристалла и всей кристаллической решеткой импульс отдачи  $k_R = \pm k_\gamma$ , возникающий при поглощении или испускании  $\gamma$ -кванта, может восприниматься не этим отдельным атомом, а кристаллом в целом или по крайней мере очень большой (макроскопически большой) группой атомов. Те-

перь для подсчета сдвига энергии  $\gamma$ -кванта в формулу  $R = \frac{k_\gamma^2}{2M}$

надо подставить вместо массы одного ядра  $M_A$  макроскопически большую массу. А это и означает, что испускание или поглощение  $\gamma$ -кванта происходит практически без какого-либо сдвига по энергии.

За рамками данного объяснения остается вопрос о том, сколько часто происходит такое событие, т. е. вопрос об относительной вероятности событий без потери энергии  $\gamma$ -кванта на отдачу. Чтобы оценить и величину, и температурную зависимость этой относительной вероятности, нам надо объединить в единое целое картину прохождения  $\gamma$ -квантов через кристалл и их поглощения (испускания) ядрами атомов кристаллов. Согласно модели Эйнштейна, каждый атом твердого тела представляет собой независимый гармонический осциллятор, которому соответствует своя собственная частота колебаний  $\omega$ , т. е. своя энергия кванта колебаний  $\hbar\omega$ . Энергия  $n$ -го состояния (содержащего  $n$  квантов) дается формулой  $E_n = \hbar\omega(n + 1/2)$ , где величина  $E_0 = 1/2\hbar\omega$  — это энергия «нулевых колебаний». Среднее число квантов  $\bar{n}$  с определенной энергией  $\hbar\omega$  в зависимости от температуры тела  $T$  определяется по Бозе — Эйнштейну:

$$\bar{n} = \frac{1}{\exp \frac{\hbar\omega}{kT} - 1}. \quad (7.17)$$

В отличие от модели Эйнштейна колебания атомов в кристалле связаны между собой, так что на самом деле имеется целый спектр собственных частот колебаний решетки, имеющий квазинепрерывный характер. Распределение по частотам характеризуется спектральной плотностью колебаний  $D(\omega)$ , вид которой определяет множество различных физических свойств кристалла — от теплоемкости до температурной зависимости эффекта Мёссбауэра. Форма спектральной плотности  $D(\omega)$  нетривиальна (рис. 7.4) и специфична для каждого вещества, но во многих случаях может быть аппроксимирована с помощью модели Дебая

$$D(\omega)d\omega = \begin{cases} \text{const} \cdot \omega^2 d\omega; & \omega \leq \omega_D; \\ 0; & \omega > \omega_D. \end{cases} \quad (7.18)$$

В этой модели структурной характеристикой каждого кристаллического вещества являются дебаевская частота  $\omega_D$ , т. е. максимальная частота колебаний решетки, или связанная с ней соотношением

$$\hbar\omega_D = kT_D \quad (7.19)$$

дебаевская температура  $T_D$ . Значения  $\omega_D$  и  $T_D$  для различных веществ приводятся в справочниках. Так, например, дебаевская температура для решетки металлического железа составляет 467 К, в пересчете на максимальную энергию кванта колебаний это дает  $\hbar\omega_D \approx 5 \cdot 10^{-2}$  эВ. В модели Дебая среднее число квантов колебаний решетки с любой частотой  $\omega$  в интервале  $0 < \omega < \omega_D$  дается формулой (7.17).

Рассмотрим сначала, что такое эффект Мёссбауэра с точки зрения простейшей модели Эйнштейна. Пусть ядро переходит, испуская  $\gamma$ -квант, из одного состояния своего внутреннего движения  $|i\rangle$  в другое состояние  $|f\rangle$ . В случае, когда это происходит со свободным ядром, энергия испущенного  $\gamma$ -кванта однозначно определяется разностью уровней ядра:

$$E_\gamma = \varepsilon_i - \varepsilon_f - R, \quad (7.20)$$

(где  $R = \frac{k_\gamma^2}{2M_A}$  — энергия отдачи), а вероятность перехода —

просто матричным элементом оператора электромагнитного взаимодействия ядра  $\hat{H}_\gamma$  в обкладках соответствующих состояний внутреннего движения ядра:

$$(W_{fi})_{\text{своб}} \sim |\langle f | \hat{H}_\gamma | i \rangle|^2. \quad (7.21)$$

В случае же, когда рассматриваемое ядро входит в решетку кристалла, начальное и конечное состояния всей системы характеризуются уже не только индексами внутреннего состояния собственно ядра, но и дополнительными квантовыми числами, относящимися к движению ядра как целого внутри кристалла:  $|i\rangle \Rightarrow |i, n_i\rangle$ ;  $|f\rangle \Rightarrow |f, n_f\rangle$ . В модели Эйнштейна это число квантов колебаний нашего ядра  $n_i$  и  $n_f$  до и после испускания  $\gamma$ -кванта. От того, насколько меняются эти числа одновременно с ядерным переходом  $|i\rangle \rightarrow |f\rangle$ , зависит энергия испускаемого  $\gamma$ -кванта:

$$E_\gamma = \varepsilon_i - \varepsilon_f + \hbar\omega(n_i - n_f). \quad (7.22)$$

Вместе с тем и вероятность перехода рассматривается теперь тоже с учетом изменения состояния ядра в решетке:

$$W(i, n_i \rightarrow f, n_f) = (W_{fi})_{\text{своб}} |\langle n_f | e^{ik_\gamma r} | n_i \rangle|^2. \quad (7.23)$$

Второй множитель в этом выражении играет роль неупругого формфактора (сравним, например, с формулой (2.16)), его величина зависит от импульса  $\gamma$ -кванта  $k_\gamma$ . Мы рассмотрели ядерный

переход в кристалле с испусканием  $\gamma$ -кванта, все сказанное относится по существу без изменений и к случаю поглощения  $\gamma$ -кванта.

Итак, при рассмотрении ядерного перехода в рамках модели Эйнштейна мы оперируем тремя энергетическими параметрами: разностью уровней  $\varepsilon_i - \varepsilon_f$  (в приведенном выше примере с ядром  $^{57}\text{Fe}$  она составляет 14 КэВ), собственной шириной уровня  $\Gamma$  (в том же примере  $\sim 10^{-8}$  эВ) и энергией кванта колебаний атома в решетке  $\hbar\omega$  (для ориентировки возьмем  $\hbar\omega \approx 5 \cdot 10^{-2}$  эВ, что соответствует дебаевской частоте в металлическом железе). В обычных условиях регистрации испущенных  $\gamma$ -квантов энергетическое разрешение детекторов  $\Delta E_\gamma$  значительно хуже, чем нужно для разрешения структуры линии, связанной с возможными изменениями числа квантов колебаний атома в решетке при переходе  $|i, n_i\rangle \rightarrow |f, n_f\rangle$ :  $\Delta E_\gamma \gg \hbar\omega$ . Применительно к таким условиям регистрации полная вероятность испускания  $\gamma$ -кванта в ядерном переходе  $|i\rangle \rightarrow |f\rangle$ , отнесенная к определенному начальному состоянию системы  $|i, n_i\rangle$ , должна рассчитываться как сумма вероятностей перехода по всем возможным конечным состояниям атома в решетке:

$$W_{fi} \Big|_{\Delta E_\gamma \gg \hbar\omega} = (W_{fi})_{\text{полн}} = \sum_{n_f} W(i, n_i \rightarrow f, n_f). \quad (7.24)$$

Подставляя сюда (7.23) и учитывая квантовомеханическое тождество

$$\sum_{n_f} |\langle n_f | e^{ik_\gamma r} | n_i \rangle|^2 = 1, \quad (7.25)$$

получаем, как и следовало ожидать, что полная вероятность спонтанного  $\gamma$ -перехода в ядре, находящемся внутри кристалла, и в свободном ядре — это одно и то же:  $(W_{fi})_{\text{полн}} = (W_{fi})_{\text{своб}}$ .

Совсем иначе обстоит дело, когда испущенный  $\gamma$ -квант регистрируется методом резонансного поглощения, т. е. в условиях эффекта Мёссбауэра. Чувствительность такого «прибора» столь высока, что даже при минимальном сдвиге энергии  $\gamma$ -кванта ( $E_\gamma = \varepsilon_i - \varepsilon_f \pm \hbar\omega$ ) система выходит из резонанса. Энергия испущенного  $\gamma$ -кванта  $E_\gamma$  строго равняется разности уровней  $\varepsilon_i - \varepsilon_f$  только в «диагональных» переходах, когда число квантов колебаний остается без изменений:  $n_f = n_i$ . Вероятность таких переходов всегда меньше, чем вероятность  $\gamma$ -перехода в свободном ядре:

$$W(i, n \rightarrow f, n) = (W_{fi})_{\text{своб}} |\langle n | e^{ik_\gamma r} | n \rangle|^2 < (W_{fi})_{\text{своб}}. \quad (7.26)$$

Важнейшей характеристикой, используемой в теории эффекта Мёссбауэра, является доля  $\gamma$ -квантов, испускаемых без передачи энергии решетке (в дальнейшем будем говорить просто «испускаемых без отдачи», понимая под этим, что пренебрежимо малой является энергия, но, конечно, не импульс, передаваемый кри-

сталлу). Эту долю числа  $\gamma$ -квантов, или, что то же, относительную вероятность испускания  $\gamma$ -кванта без отдачи

$$f = \frac{(W_{fi})_{\text{без отдачи}}}{(W_{fi})_{\text{своб}}}, \quad (7.27)$$

назовем *фактором ослабления*. Рассчитанный с учетом тепловых колебаний решетки в рамках модели Дебая, он называется также фактором Дебая — Уоллера  $f_{D-w}$ . Наша конечная цель в данном параграфе и состоит в том, чтобы выразить фактор Дебая — Уоллера через параметры решетки и выяснить его зависимость от температуры кристалла.

Когда ядро, испускающее  $\gamma$ -квант, находится в определенном стационарном состоянии своего колебательного движения, фактор ослабления  $f$  можно вывести из уравнения (7.26):

$$f_n = |\langle n | e^{ik_\gamma r} | n \rangle|^2. \quad (7.28)$$

Сначала вычислим фактор  $f_n$  для случая нулевых колебаний ядра внутри решетки. Выбирая ось  $x$  вдоль направления вылета  $\gamma$ -кванта, для соответствующего матричного элемента имеем

$$\begin{aligned} \langle 0 | e^{ik_\gamma r} | 0 \rangle &= \langle 0 | e^{ik_\gamma x} | 0 \rangle = \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} \psi_{n=0}^*(x) e^{ik_\gamma x} \psi_{n=0}(x) dx. \end{aligned} \quad (7.29)$$

Явный вид волновых функций  $\psi_n(x)$ , описывающих стационарные состояния гармонического осциллятора, хорошо известен:

$$\psi_{n=0}(x) = \frac{1}{\pi^{1/4} x_0^{1/2}} \exp\left[-\frac{1}{2} \left(\frac{x}{x_0}\right)^2\right], \text{ где осцилляторный параметр}$$

$x_0$  определяется собственной частотой и массой осциллятора:  $x_0 = \sqrt{\hbar/M\omega}$ . Параметр  $x_0$  задает масштаб амплитуды колебаний. Так, средний квадрат амплитуды колебаний в стационарном состоянии  $\psi_n(x)$  вычисляется по формуле:

$$\langle x^2 \rangle_n = \left(n + \frac{1}{2}\right) x_0^2 = \left(n + \frac{1}{2}\right) \frac{\hbar}{M\omega}. \quad (7.30)$$

Подставляя (7.29) в (7.28) и интегрируя непосредственно по  $x$ , получаем

$$\langle 0 | e^{ik_\gamma r} | 0 \rangle = e^{-\frac{1}{4} k_\gamma^2 x_0^2} = e^{-\frac{1}{2} k_\gamma^2 \langle x^2 \rangle_{n=0}}. \quad (7.31)$$

Взяв из квантовой механики выражение для осцилляторных волновых функций  $\psi_n(x)$ , нетрудно проверить, что формула (7.31)

справедлива не только для низшего, но и для любого состояния осциллятора:

$$\langle n | e^{ik_y r} | n \rangle = e^{-k_y^2 \langle x^2 \rangle_n} \quad (7.32)$$

Отсюда получаем, что фактор ослабления  $f_n$  для вероятности перехода  $|i\rangle \rightarrow |f\rangle$  дается выражением

$$f_n = e^{-k_y^2 \langle x^2 \rangle_n} \quad (7.33)$$

Полученный результат относится к отдельно взятому гармоническому осциллятору, находящемуся в определенном стационарном состоянии. Обобщим его на ансамбль осцилляторов, находящихся в некотором заданном (вообще говоря, смешанном) состоянии, выразив среднее значение фактора ослабления  $f$  через средний квадрат амплитуды колебаний ядер в заданном состоянии:

$$f = e^{-k_y^2 \langle x^2 \rangle} \quad (7.34)$$

Здесь уместно отойти на время от последовательных выкладок и посмотреть на соотношение (7.34) с точки зрения качественных условий существования эффекта Мёссбауэра. Мы видим, что вероятность испускания ядром  $\gamma$ -кванта без отдачи зависит от соотношения длины волны излучения  $\lambda = 1/k_y$  и средних размеров области, в которой локализовано движение ядра. Необходимое условие эффекта Мёссбауэра — малость этих средних размеров по сравнению с длиной волны:

$$\langle x^2 \rangle \ll \lambda^2 \quad (7.35)$$

В газах и жидкостях условие (7.35) не выполняется, так как ядро, испускающее  $\gamma$ -квант, вообще пространственно не локализовано. Вопрос о том, насколько условие (7.35) выполняется применительно к кристаллам, требует более обстоятельного рассмотрения. Из (7.34) видно, что вероятность испускания  $\gamma$ -квантов без отдачи падает с повышением температуры, поскольку при этом растет размах колебаний ядер. С другой стороны, даже при самых низких температурах, вблизи абсолютного нуля, фактор ослабления  $e^{-k_y^2 \langle x^2 \rangle}$  не достигает единицы ввиду наличия нулевых колебаний ядер в решетке.

Возвращаясь к количественным выкладкам в рамках модели Эйнштейна, вычислим входящий в (7.34) средний квадрат амплитуды колебаний  $\langle x^2 \rangle$  для ансамбля осцилляторов, находящихся в тепловом равновесии со средой. Для этого, как видно из (7.30), достаточно знать лишь среднее значение числа квантов колебаний  $\bar{n}(T)$  при заданной температуре:

$$\langle x^2 \rangle_T = \left[ \bar{n}(T) + \frac{1}{2} \right] \frac{\hbar}{M\omega} \quad (7.36)$$

В свою очередь среднее значение  $\bar{n}(T)$  дается формулой Бозе — Эйнштейна (7.17). В итоге получаем

$$\langle x^2 \rangle_T = \frac{\hbar}{M\omega} \left( \frac{1}{e^{\hbar\omega/kT} - 1} + \frac{1}{2} \right) \quad (7.37)$$

На этом мы исчерпали возможности простой модели Эйнштейна, в которой каждый атом представляет собой независимый гармонический осциллятор определенной частоты  $\omega$ .

Для того чтобы учесть веса различных собственных частот при наличии связанных колебаний атомов кристаллической решетки, обратимся к модели Дебая и усредним (7.37) по спектру частот (7.18):

$$\langle x^2 \rangle_T \Rightarrow \frac{\int_0^{\omega_D} \frac{\hbar}{M\omega} \left( \frac{1}{\exp(\hbar\omega/kT) - 1} + \frac{1}{2} \right) \omega^2 d\omega}{\int_0^{\omega_D} \omega^2 d\omega} \quad (7.38)$$

После простых выкладок, подставляя полученный результат в (7.34), приходим к окончательному выражению для фактора ослабления — фактора Дебая — Уоллера:

$$f_{D-W}(T) = \exp \left\{ -\frac{3}{2} \frac{R}{\hbar\omega_D} \left[ 1 + 4 \left( \frac{T}{T_D} \right)^2 \int_0^{T_D/T} \frac{udu}{e^u - 1} \right] \right\}, \quad (7.39)$$

где  $R = \hbar^2 k_y^2 / 2M$  — энергия отдачи при испускании  $\gamma$ -кванта свободным ядром.

В выражение (7.39) входит неопределенный интеграл, который берется аналитически лишь в предельных случаях, когда температура кристалла много ниже или же много выше дебаевской:

$$I \left( \frac{T_D}{T} \right) = \int_0^{T_D/T} \frac{udu}{e^u - 1} = \begin{cases} \frac{\pi^2}{6}; & T \ll T_D; \\ \frac{T_D}{T}; & T \gg T_D. \end{cases} \quad (7.40)$$

Соответственно получаем в этих экстремальных условиях для фактора Дебая — Уоллера

$$f_{D-W}(T) = \begin{cases} \exp \left\{ -\frac{3}{2} \frac{R}{\hbar\omega_D} \right\}, & \text{если } T \ll T_D; \\ \exp \left\{ -6 \frac{R}{\hbar\omega_D} \frac{T}{T_D} \right\}, & \text{если } T \gg T_D. \end{cases} \quad (7.41)$$

Отсюда видно, что для уверенного наблюдения эффекта Мёссбауэра необходимо:

а) подбирать  $\gamma$ -излучатели в области тяжелых ядер с малыми энергиями перехода (малые  $R$ );

б) подбирать кристаллы с высокой температурой Дебая  $T_D$ ;

в) охлаждать излучатель и поглотитель до возможно более низких температур.

И все же (как было отмечено еще в самом начале нашего рассмотрения) наличие нулевых колебаний решетки мешает 100%-му испусканию и поглощению  $\gamma$ -квантов без отдачи даже при абсолютном нуле.

В заключение оценим, для примера, величину фактора Дебая — Уоллера для перехода  $3/2 \rightarrow 1/2$  в ядре  $^{57}\text{Fe}$  в решетке металлического железа. При низких температурах  $T \ll T_D = 467 \text{ K}$  имеем

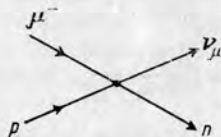
$$f_{D-W} \Big|_{T \ll T_D} = e^{-\frac{3}{2} \frac{2 \cdot 10^{-3} \text{ эВ}}{5 \cdot 10^{-2} \text{ эВ}}} \approx 0,95. \quad (7.42)$$

Это очень высокое значение. Численный расчет по формуле (7.39) показывает, что оно остается достаточно высоким даже при комнатных температурах:  $f_{D-W}(300 \text{ K}) \approx 0,75$ . Поэтому эффект Мёссбауэра на железе может хорошо наблюдаться вплоть до очень высоких температур.

## Лекция 8

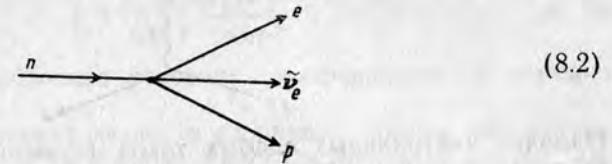
### § 8.1. ВРАЩЕНИЕ ПЛОСКОСТИ ПОЛЯРИЗАЦИИ СВЕТА КАК ЭФФЕКТ НЕСОХРАНЕНИЯ ЧЕТНОСТИ В АТОМАХ

Открытие промежуточных бозонов, явившееся одним из крупнейших достижений физики в 80-е гг., было подготовлено многолетними теоретическими и экспериментальными исследованиями в области слабых взаимодействий и, в частности, исследованиями по проблеме нейтральных слабых токов. Наличие таких токов в природе было очень желательным с точки зрения развития теории элементарных частиц, однако обнаружить их долгое время не удавалось. Все известные до начала 70-х гг. процессы слабых взаимодействий свидетельствовали о наличии лишь заряженных слабых токов: во всех таких процессах либо меняется зарядовое состояние лептона, как это имеет место, например, при  $\mu$ -захвате



(8.1)

либо рождающаяся пара лептонов несет ненулевой суммарный заряд, как, например, происходит при  $\beta$ -распаде нейтрона:



(8.2)

На современном диаграммном языке оба процесса — (8.1) и (8.2) — трактуются как обмен заряженным промежуточным бозоном; например,



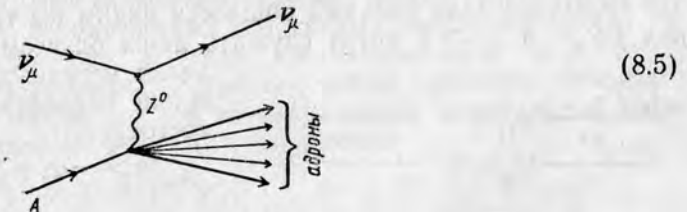
(8.3)

Проявлением нейтральных токов могли бы быть процессы рассеяния нейтрино адронами. Именно так они и были впервые обнаружены (ЦЕРН, 1973) — по отсутствию мюонов в значительной доле событий, соответствующих неупругим взаимодействиям мюонных нейтрино и антинейтрино с ядрами:

$$\nu_{\mu} + A \rightarrow \nu_{\mu} + \text{адроны}, \quad (8.4)$$

$$\bar{\nu}_{\mu} + A \rightarrow \bar{\nu}_{\mu} + \text{адроны}.$$

Существование нейтрального промежуточного бозона позволяет трактовать такие процессы в рамках универсального для всех типов взаимодействий обменного механизма; например,



(8.5)

Другим проявлением нейтральных токов являются эффекты несохранения четности в атомных системах. Рассмотрим взаимодействие между электроном и протоном. Согласно квантовой электродинамике оно обусловлено обменом фотоном:





Наличие нейтральных слабых токов (существование нейтрального промежуточного бозона) требует добавить к этой диаграмме другую:



Таким образом, полный гамильтониан  $ep$ -взаимодействия представляет собой сумму двух слагаемых:

$$\hat{H}_{ep} = \hat{H}_0 + \Delta\hat{H}. \quad (8.8)$$

Второе слагаемое  $\Delta\hat{H}$ , описывающее слабое взаимодействие (8.7), хотя и ничтожно мало по абсолютной величине в сравнении с основным слагаемым  $\hat{H}_0$ , соответствующим электромагнитному взаимодействию, тем не менее вносит в гамильтониан  $\hat{H}_{ep}$  совершенно новое качество: благодаря этому слагаемому во взаимодействии зарядов не сохраняется четность.

Представим себе атом с одним валентным электроном, например атом щелочного металла (рис. 8.1). В атомной физике все стационарные состояния атома (за исключением состояний атома водорода — случай случайного вырождения) — это состояния определенной четности. Таковы и состояния нашего атома  $ns_{1/2}$  и  $np_{1/2}$ . С учетом взаимодействия  $\Delta H$ , не сохраняющего четность, эти состояния (для большей общности дадим им также обозначения  $|+\rangle$  и  $|-\rangle$ ) могут служить лишь базисом для нахождения истинных волновых функций рассматриваемых двух состояний:

$$\begin{array}{ccc} \frac{\varepsilon_0(-)}{\varepsilon_0(+)} \downarrow E1 & \begin{array}{c} np_{1/2} \equiv |-\rangle \\ ns_{1/2} \equiv |+\rangle \end{array} & \begin{array}{c} \downarrow E1+M1 \\ |b\rangle \\ |a\rangle \end{array} \\ a & & b \end{array} \quad \begin{array}{l} |a\rangle = \alpha|+\rangle + \beta|-\rangle; \\ |b\rangle = -\beta|+\rangle + \alpha|-\rangle. \end{array} \quad (8.9)$$

Рис. 8.1. Схема электромагнитного перехода между нижними уровнями валентного электрона в атоме без учета (а) и с учетом (б) несохранения четности

Здесь коэффициент  $\alpha$  практически не отличается от единицы, а коэффициент  $\beta$ , харак-

теризующий примесь состояний противоположной четности, наоборот, очень мал; оценки по теории возмущений

$$\beta \approx \frac{\langle +|\Delta\hat{H}|-\rangle}{\varepsilon_0(-) - \varepsilon_0(+)} \quad (8.10)$$

показывают, что в обычных условиях коэффициент  $\beta$  порядка  $10^{-16}$ .

С учетом несохранения четности из правил отбора, регулирующих электромагнитные переходы между состояниями атомов, надо исключить правила отбора по четности. Применительно к рассматриваемому случаю это означает, что между уровнями атома, показанными на рис. 8.1, возможен, строго говоря, не только  $E1$ , но и  $M1$ -переход. Пусть  $\hat{H}_\gamma$  — гамильтониан взаимодействия атома с электромагнитным излучением, отвечающего, в частности, за процессы испускания и поглощения фотона. Вероятность спонтанного электромагнитного перехода атома из состояния в состояние определяется матричным элементом оператора

$$\langle b|\hat{H}_\gamma|a\rangle = \langle E1\rangle_{ba} + \beta\langle M1\rangle_{ba}, \quad (8.11)$$

который мы разбили на два слагаемых: первое соответствует обычным правилам отбора, второе, пропорциональное малому параметру  $\beta$ , запрещено при обычном подходе и возникло здесь как эффект несохранения четности. Конечно, почувствовать столь малую добавку, измеряя просто вероятность электромагнитного перехода  $W_{b\rightarrow a} \sim |\langle b|\hat{H}_\gamma|a\rangle|^2$ , совершенно невозможно.

Вспомним, однако, что одним из характерных свойств электромагнитного излучения является его поляризация: свет может быть линейно поляризованным, циркулярно поляризованным и т. д. Обращаясь к квантовой электродинамике, можно показать, что разрешенные и запрещенные по четности слагаемые матричного элемента (8.11) комбинируются в переходах с испусканием право- и левополяризованного света по-разному:

$$\begin{aligned} \langle b|\hat{H}_\gamma^{(\text{прав})}|a\rangle &= \langle E1\rangle_{ba} \pm \beta\langle M1\rangle_{ba}; \\ \langle b|\hat{H}_\gamma^{(\text{лев})}|a\rangle &= \langle E1\rangle_{ba} \mp \beta\langle M1\rangle_{ba}. \end{aligned} \quad (8.12)$$

Таким образом, несохранение четности может проявиться как разность между вероятностями спонтанных электромагнитных переходов с испусканием фотонов противоположной друг другу циркулярной поляризации. Результирующим эффектом становится наличие очень малой (но все же не нулевой) циркулярной поляризации спонтанно испускаемого излучения:

$$P = \frac{|\langle b|\hat{H}_\gamma^{(\text{прав})}|a\rangle|^2 - |\langle b|\hat{H}_\gamma^{(\text{лев})}|a\rangle|^2}{|\langle b|\hat{H}_\gamma^{(\text{прав})}|a\rangle|^2 + |\langle b|\hat{H}_\gamma^{(\text{лев})}|a\rangle|^2} \approx \beta \frac{2 \operatorname{Re} \langle E1\rangle_{ba}^* \langle M1\rangle_{ba}}{|\langle E1\rangle_{ba}|^2}. \quad (8.13)$$

Как видим, степень этой циркулярной поляризации пропорциональна коэффициенту  $\beta$ , характеризующему примесь состояний противоположной четности.

Вероятности вынужденных электромагнитных переходов (скажем с поглощением фотона) пропорциональны вероятностям спонтанных переходов между соответствующими уровнями. Из рассмотренного выше следует, что из-за несохранения четности вероятности возбуждения отдельных атомных уровней при поглощении атомом право- и левоциркулярно поляризованного света, строго говоря, не совпадают друг с другом:  $W_{a \rightarrow b}^{(\text{прав})} \neq W_{a \rightarrow b}^{(\text{лев})}$ ; то же, разумеется, справедливо и для соответствующих сил осцилляторов:  $f_{a \rightarrow b}^{(\text{прав})} \neq f_{a \rightarrow b}^{(\text{лев})}$ . Отсюда вытекает принципиально новое положение, касающееся прохождения света через вещество: с учетом несохранения четности в атомах показатели преломления среды для право- и левополяризованного света не совпадают между собой:  $n^{(\text{прав})} \neq n^{(\text{лев})}$ . Из формулы для показателя преломления в газах

$$n(\omega) = 1 + \frac{2\pi e^2 N}{m_e} \sum_n \frac{f_n}{\omega_n^2 - \omega^2 + i\omega\gamma_n} \quad (8.14)$$

видно, что эффект должен быть особенно заметен при частотах, близких к таким собственным частотам атомов, которые соответствуют возбуждению состояний с большой примесью запрещенной по четности компоненты.

Налицо условия, ведущие к известному в оптике явлению оптической активности среды. При прохождении через такую среду линейно поляризованного света происходит вращение плоскости его поляризации. Величина угла поворота дается формулой Френеля

$$\psi = \pi \frac{l}{\lambda} \text{Re} \{n^{(\text{прав})} - n^{(\text{лев})}\}, \quad (8.15)$$

где  $\lambda$  — длина волны излучения, а  $l$  — пройденный путь. Отсюда видно, что, поскольку  $\lambda \ll l$ , угол поворота может быть значительным даже при небольшой разнице между показателями преломления для право- и левоциркулярно поляризованного света.

Соединим изложенные выше соображения в единую цепочку. Наличие в природе нейтральных слабых токов (существование нейтрального промежуточного бозона  $Z^0$ ) создает примесь слабого взаимодействия к электромагнитному взаимодействию между частицами в атоме. Благодаря ей нарушается чистота атомных состояний по четности и, следовательно, снимаются строгие правила отбора по четности для электромагнитных переходов в атомах. Спонтанное электромагнитное излучение между уровнями с нарушенной четностью оказывается циркулярно поляризованным, так как вероятности переходов между такими уровнями для право- и левополяризованного света не совпадают между собой; степень циркулярной поляризации  $P$  спонтанного излучения может служить мерой несохранения четности в атоме. Другая сторона того же явления — возникновение оптической активности атомар-

ных сред: несохранение четности в атомах проявляется как вращение плоскости поляризации излучения при прохождении через такие (лишенные оптической активности в обычном понимании этого термина) среды.

## § 8.2. ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНОЕ ОБНАРУЖЕНИЕ НЕСОХРАНЕНИЯ ЧЕТНОСТИ В АТОМАХ

Взятый нами на рис. 8.1 пример, хотя и удобен для выявления физической природы эффекта, крайне неудачен в том отношении, что здесь слабое взаимодействие примешивает к разрешенному  $E1$ -переходу  $M1$ -переход, интенсивность которого в атомах всегда много меньше интенсивности  $E1$ -перехода. Из формулы (8.13) видно, что в этом случае ожидаемая степень циркулярной поляризации особенно мала — не только в силу малости коэффициента смешивания  $\beta$ , но и ввиду невыгодного с точки зрения эффекта несохранения четности соотношения между матричными элементами разрешенного и запрещенного переходов. Более выгодной для достижения измеряемой величины  $P$  была бы обратная ситуация, когда к слабому  $M1$ -переходу примешивался бы сильный  $E1$ -переход.

Поиски благоприятного сочетания условий для наблюдения эффекта несохранения четности в атомах велись в 70-е гг. в нескольких лабораториях разных стран. Что это за условия? Прежде всего необходимо найти состояния с возможно более высоким смешиванием по четности. Наиболее вероятны такие состояния в области тяжелых атомов, так как коэффициент смешивания  $\beta$  быстро (примерно как  $Z^3$ ) растет с ростом атомного номера  $Z$ . Далее, это должен быть случай сильно подавленного  $M1$ - или  $E2$ -перехода, чтобы даже малая примесь  $E1$ -перехода могла создать заметную разность между вероятностями переходов, возбуждаемых право- и левополяризованным светом. Однако чем сильнее подавлена основная мода электромагнитного перехода между какой-то парой уровней атома, тем уже соответствующая линия в спектре испускания или поглощения рассматриваемого атома. Значит, пучок света, направляемый на мишень, должен быть и предельно интенсивным, и предельно монохроматическим. Таким требованиям может отвечать пучок лазера.

Несохранение четности в атомах было обнаружено в 1978 г. в Институте ядерной физики СО АН СССР в Новосибирске. Вращение плоскости поляризации света наблюдалось при прохождении лазерного пучка через пары висмута.

На рис. 8.2 показана схема низших уровней атома висмута. Основная конфигурация этого атома  $6s^2 6p^3$ .

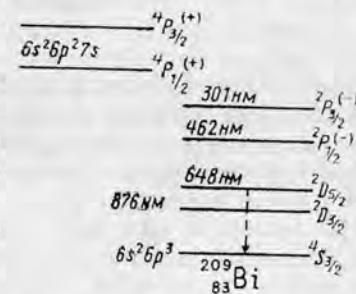


Рис. 8.2. Схема низших уровней атома висмута

Все уровни этой конфигурации — от основного  $6s^26p^3: ^4S_{3/2}$  до уровня  $6s^26p^3: ^2P_{3/2}$  — имеют отрицательную четность, и, следовательно, электромагнитные переходы между ними относятся к типу  $M1$  или  $E2$ . Среди них выделяется переход  $^2D_{5/2} \rightarrow ^4S_{3/2}$ , которому соответствует известная красная линия с длиной волны  $\lambda = 648$  нм. Согласно обычным правилам отбора это типичный смешанный переход  $M1 + E2$ , однако в данном случае и  $M1$ -переход и  $E2$ -переход сильно подавлены, поскольку оба идут только благодаря примеси других конфигураций (той же четности) к состояниям  $^2D_{5/2}$  и  $^4S_{3/2}$ .

В период подготовки новосибирского эксперимента в разных теоретических группах были выполнены тщательные расчеты волновых функций, вероятностей электромагнитных переходов и степени циркулярной поляризации излучения  $P$  для многих переходов в целом ряде атомов, которые рассматривались как «кандидаты» для проведения с ними эксперимента по несохранению четности. Переход  $^2D_{5/2} \rightarrow ^4S_{3/2}$  в висмуте оказался одним из самых подходящих:

$$P(\text{Bi})|_{\text{теор}} = 3,8 \cdot 10^{-7}. \quad (8.16)$$

Это было одно из самых больших из ожидаемых значений степени циркулярной поляризации излучения в атомах. Тщательно выполненный эксперимент показал значение, отлично согласующееся с этим теоретическим предсказанием:

$$P(\text{Bi})|_{\text{эксп}} = (4,04 \pm 0,54) \cdot 10^{-7}. \quad (8.17)$$

Обнаружение несохранения четности в атомах подтвердило правильность фундаментальных положений теории слабых взаимодействий, касающихся нейтральных токов, и явилось одним из самых важных этапов на пути к открытию промежуточных бозонов.

## Лекция 9

### § 9.1. ЭЛЕКТРОМАГНИТНОЕ ИЗЛУЧЕНИЕ ПРИ ПРОХОЖДЕНИИ ЧАСТИЦ ЧЕРЕЗ ВЕЩЕСТВО; ПРЯМЫЕ ПРОЦЕССЫ ГЕНЕРАЦИИ

В настоящей лекции мы разберем механизмы возникновения и свойства электромагнитного излучения, индуцируемого при прохождении частиц через вещество. Тема эта очень широка; мы рассмотрим лишь электромагнитное излучение в процессах прохождения через вещество заряженных частиц — легких и тяжелых, при малых и при больших энергиях, в условиях беспорядочного и упорядоченного расположения атомов вещества. Сначала остановимся на прямых процессах генерации фотонов, а затем на процессах, связанных с возбуждением либо проходящих через вещество частиц, либо атомов и молекул самой среды, девозбужде-

ние которых и приводит к возникновению электромагнитного излучения.

С одним из процессов первого рода мы уже познакомились в лекции 4: это радиационное торможение электронов — процесс, определяющий их энергетические потери при энергии выше критической. Но там мы интересовались лишь движением самого излучающего электрона, оставив в стороне все, что относится к генерируемому им излучению. Однако обе стороны явления радиационного торможения хорошо просматриваются с единых теоретических позиций, и квантовая электродинамика, из которой мы в § 4.5 взяли выражение для удельных радиационных потерь  $\left(-\frac{dE}{dx}\right)_{\text{рад}}$ , дает вместе с ним также выражения для энергетического спектра и углового распределения фотонов тормозного излучения. При  $E \gg m_e c^2$  вероятность излучения электроном с энергией  $E$  фотона с энергией в интервале  $(E', E' + dE')$  в расчете на единицу пути электрона рассчитывается по формуле

$$W(E, E') dE' = \frac{1}{x_0} \frac{dE'}{E'}, \quad (9.1)$$

которая неплохо работает везде, за исключением только самых краев спектра:  $E' \rightarrow 0$  и  $E' \rightarrow E'_{\text{max}} = E$ . Входящая в (9.1) величина  $x_0$  — это радиационная длина (4.19). Как видно из (9.1), распределение числа фотонов является монотонно спадающим, а распределение энергии тормозного излучения — равномерным:

$$E' W(E, E') dE' = \frac{1}{x_0} dE'. \quad (9.2)$$

Заметим, что все фотоны с энергией от нуля до  $1/2 E$ , генерируемые электроном при прохождении какого-то слоя вещества  $\Delta x$ , уносят ровно столько же суммарной энергии, сколько и все фотоны с энергией от  $1/2 E$  до максимального значения  $E$ .

Более точное выражение для спектра тормозного излучения дает формула Шиффа, выведенная в низшем порядке теории возмущений в рамках квантовой электродинамики с использованием модели Томаса — Ферми при учете экранирования ядра атома электронами. Мы не будем приводить ее здесь ввиду громоздкости, но формулу Шиффовского спектра продемонстрируем на рис. 9.1. Как видим, с ростом энергии электронов распределение энергии тормозного излучения медленно стремится к равномерному.

Угловое распределение тормозного излучения характеризуется резкой направленностью вперед; средний угол вылета фотонов оценивается по формуле

$$\bar{\vartheta} \approx \frac{m_e c^2}{E}. \quad (9.3)$$

Как частный случай тормозного излучения можно рассматривать синхротронное излучение (СИ), хотя оно и не связано непо-

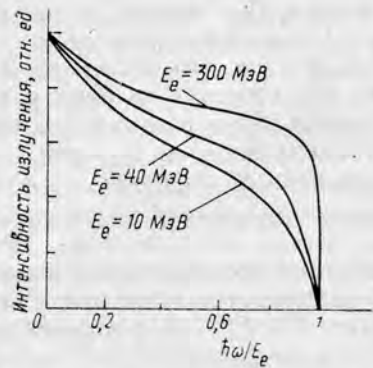


Рис. 9.1. Спектр тормозного излучения электронов разных энергий в платине ( $Z=78$ )

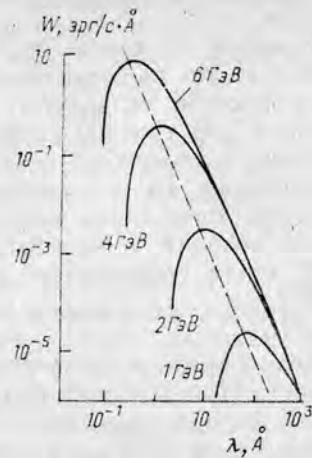


Рис. 9.2. Спектральное распределение синхротронного излучения при различных энергиях электронов

средственно с прохождением частиц через вещество, а возникает при круговом движении частиц в однородном магнитном поле. Его другое название — *магнитотормозное излучение*. Мощность синхронного излучения тем больше, чем больше лоренц-фактор частицы  $\gamma = E/mc^2$ . СИ, как и тормозное излучение частиц в веществе, наиболее существенно для электронов и позитронов. В ультрарелятивистском пределе  $\gamma \gg 1$  синхронное излучение сосредоточено в плоскости орбиты частицы и остро направлено по вектору ее мгновенной скорости. Угол раствора конуса рассчитывается по той же формуле (9.3), что и раствор конуса тормозного излучения:  $\bar{\vartheta} = mc^2/E$ . Спектр СИ является непрерывным (рис. 9.2), а максимум интенсивности приходится на частоту

$$\nu_{\max} = \frac{eH_{\perp}}{m_e c} \gamma^2, \quad (9.4)$$

где  $H$  — напряженность магнитного поля, в котором пролегла орбита частицы. Синхротронное излучение поляризовано: вектор напряженности электрического поля при наблюдении СИ в плоскости орбиты характеризуется очень большой компонентой, параллельной этой плоскости, и очень малой — перпендикулярной ей. Практически в таких условиях наблюдения синхротронное излучение ультрарелятивистских электронов и позитронов линейно поляризовано.

В очень сильном неоднородном магнитном поле возможно особое движение электрона, когда он оказывается как бы «привязанным» к силовой линии поля: его траектория имеет вид очень уз-

кой спирали, вытянутой вдоль этой силовой линии, и частица движется как бы по самой силовой линии, следуя всем ее искривлениям. Магнитотормозное излучение таких электронов (его называют *изгибным излучением*) характеризуется рядом специфических свойств. Вопрос об изгибном излучении электронов и позитронов в окрестности пульсаров занимает важное место в астрофизике.

Обратимся снова к излучению частиц в веществе. Если скорость  $v$  частицы в среде с показателем преломления  $n$  превышает скорость распространения в ней электромагнитных волн

$$v > \frac{c}{n}, \quad (9.5)$$

то излучение отдельных диполей, возбуждаемых в среде электрическим полем частицы, складывается в характерное когерентное излучение, распространяющееся вслед за пролетающей частицей. Это излучение Вавилова — Черенкова («черенковское излучение») (рис. 9.3). Раствор конуса, вдоль образующих которого распространяется черенковское излучение, определяется соотношением

$$\cos \vartheta = \frac{c/n}{v} = \frac{1}{\beta n} \leq 1, \quad (9.6)$$

т. е. тем больше, чем больше скорость частицы. При минимальном для данной среды (пороговом) значении скорости  $v_{\text{порог}} = c/n$ , когда еще возможно возникновение черенковского излучения, этот конус вырождается в узкий луч вдоль направления движения частицы. В табл. 9.1 приведено пороговое значение лоренц-фактора частицы  $\gamma_{\text{порог}} = E_{\text{порог}}/mc^2 = (1 - 1/n^2)^{-1/2}$ , начиная с которого возможна генерация черенковского излучения.

Спектр фотонов черенковского излучения рассчитывается по формуле

$$N(h\nu)d(h\nu) = (2\pi)^2 \frac{Z^2 e^2}{hc^2} \left(1 - \frac{1}{n^2 \beta^2}\right) d(h\nu). \quad (9.7)$$

Если забыть, что входящий в (9.7) показатель преломления среды  $n(\nu)$  зависит от частоты электромагнитного излучения, мо-

Таблица 9.1

Порог генерации черенковского излучения $\gamma_{\text{порог}}$ в некоторых газовых средах		
He	Ne	Воздух
120	85	40

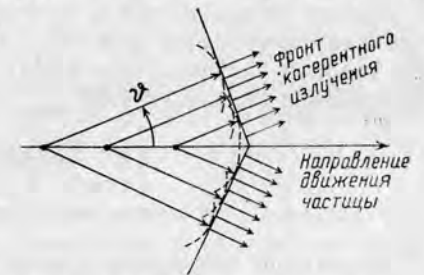


Рис. 9.3. Построение фронта черенковского излучения с помощью принципа Гюйенса

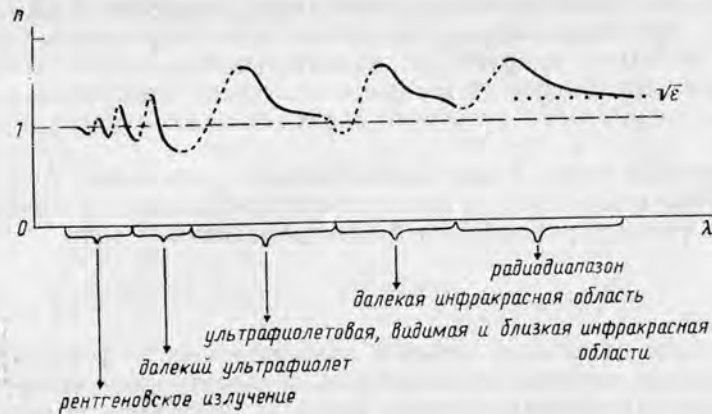


Рис. 9.4. Зависимость показателя преломления  $n$  прозрачных сред от длины волны излучения

жет показаться, что спектр излучения является равномерным, а основная энергия излучения сосредоточена в области самых высоких частот. В действительности в рентгеновской области, а также в области дальнего ультрафиолета, где  $n < 1$  (рис. 9.4) черенковское излучение вообще отсутствует. Практически спектр черенковского излучения оканчивается со стороны больших частот в области ближнего ультрафиолета. Равномерность спектра (9.7) в видимом диапазоне выражается в том, что интенсивность его коротковолнового (сине-фиолетового) края существенно выше, чем интенсивность длинноволнового (красного) края (отсюда характерный голубоватый цвет черенковского излучения).

Близким по своей физической природе к черенковскому является переходное излучение, возникающее, когда заряженная частица пересекает границу двух сред с разными показателями преломления. Переходное излучение распространяется в обе стороны от границы раздела. Спектральная область излучения, идущего назад, узка (в основном видимый диапазон), идущего вперед, напротив, очень широка, причем в этом случае максимальная энергия излучаемых фотонов с хорошей точностью пропорциональна энергии частицы; при энергии электронов в несколько ГэВ она составляет несколько кэВ.

### § 9.2. ХАРАКТЕРИСТИЧЕСКОЕ ИЗЛУЧЕНИЕ АТОМОВ СРЕДЫ ПРИ ВЗАИМОДЕЙСТВИИ ЧАСТИЦ С ВЕЩЕСТВОМ

Если при ионизации атома среды пролетающей частицей образуется вакансия в его внутренней оболочке, этот атом оказывается в сильно возбужденном состоянии и заполнение вакансии электроном из более высокой оболочки приводит к выделению

Рентгеновские линии атомов ( $K$ - и  $L$ -серии)

Переход	Стандартное обозначение перехода	Стандартное обозначение линии
$2p_{3/2} \rightarrow 1s_{1/2}$	$K - L_{III}$	$K_{\alpha_1}$
$2p_{1/2} \rightarrow 1s_{1/2}$	$K - L_{II}$	$K_{\alpha_2}$
$2s_{1/2} \rightarrow 1s_{1/2}$	$K - L_I$	$K_{\alpha_3}$
$3p_{3/2} \rightarrow 1s_{1/2}$	$K - M_{III}$	$K_{\beta_1}$
$3p_{1/2} \rightarrow 1s_{1/2}$	$K - M_{II}$	$K_{\beta_2}$
$3d_{3/2} \rightarrow 2p_{3/2}$	$L_{III} - M_V$	$L_{\alpha_1}$
$3d_{5/2} \rightarrow 2p_{3/2}$	$L_{III} - M_{IV}$	$L_{\alpha_2}$
$3d_{3/2} \rightarrow 2p_{1/2}$	$L_{II} - M_{IV}$	$L_{\beta_1}$

атомом значительной энергии. Она выделяется дискретными порциями, которые представляют собой разность энергий уровней атомного электрона  $\epsilon_i - \epsilon_f$ , и уносится либо другим электроном, выбиваемым из более слабо связанной внешней оболочки (это так называемый *безызлучательный*, или *оже-переход*), либо фотоном, генерируемым непосредственно в процессе заполнения вакансии (флюоресценция). В табл. 9.2 приведены стандартные обозначения линий флюоресценции, соответствующих заполнению вакансий в  $K$ - и  $L$ -оболочках атомов (см. также табл. В.2); для большинства атомов эти переходы оказываются в рентгеновской области, отсюда другое название — *рентгеновские линии*, или *характеристическое рентгеновское излучение*. Приведенные обозначения используются не только применительно к рентгеновским линиям, но и к линиям оже-спектров. По этой причине в табл. 9.2 включены как оптически разрешенные, так и оптически запрещенные переходы ( $K_{\alpha_2}$  и др.). Часть оже-переходов, когда электрон перемещается из одной подоболочки в другую в пределах одной оболочки (например,  $2p_{3/2} \rightarrow 2p_{1/2}$ ,  $2s_{1/2}$ ;  $2p_{1/2} \rightarrow 2s_{1/2}$ ), иногда выделяют в особую группу. Это так называемые переходы Костера — Кронига. От других оже-переходов они отличаются более низкими энергиями и более высокими скоростями (последнее связано с сильным перекрытием волновых функций атомных электронов при вычислении матричных элементов перехода, когда эти электроны находятся в одной оболочке).

Итак, выход характеристического излучения или оже-электронов при взаимодействии частиц с веществом указывает на образование вакансий во внутренних оболочках атомов среды; количественное измерение этого выхода позволяет получить парциальные сечения ионизации отдельных электронных оболочек атомов.

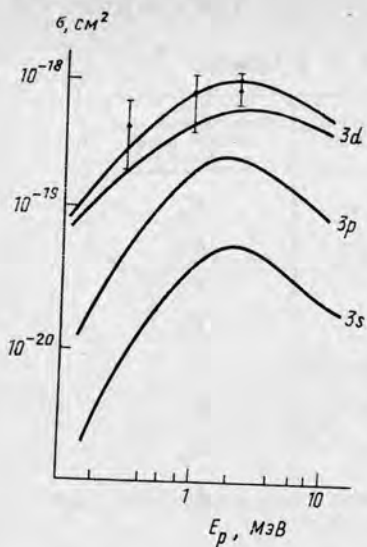


Рис. 9.5. Сечение ионизации  $M$ -оболочки атомов ксенона; кривые — результаты теоретического расчета с указанием вкладов подоболочек  $3s$ ,  $3p$  и  $3d$  [по: Комаров Ф. Ф., Новиков А. П. // ЖТФ. 1978. I. 48. С. 1449].  $E_p$  — энергия падающих протонов

Зная потенциал взаимодействия налетающей частицы с атомом вещества  $V(r)$ , можно, пользуясь законами классической механики, связать между собой прицельный параметр  $b$  и угол рассеяния частицы  $\theta$ . В системе центра масс сталкивающихся частиц эта связь дается формулой  $\theta_{c.m.} = \pi - 2\varphi_0$ , где

$$\varphi_0 = \int_{r_{\min}}^{\infty} \frac{b}{r^2 \sqrt{1 - b^2/r^2 - V(r)/E_{c.m.}}} dr; \quad (9.8)$$

здесь  $r_{\min} = r_{\min}(E, b)$  — расстояние максимального сближения частиц, а  $E_{c.m.}$  — энергия их относительного движения на бесконечности.

На рис. 9.7 приведены данные о зависимости от прицельного параметра вероятности  $P_k(b)$  ионизации  $K$ -оболочки атомов меди протонами: она монотонно падает с ростом прицельного параметра и в диапазоне нескольких МэВ растет с ростом энергии протона. В других случаях зависимость  $P(b)$  оказывается не столь простой: при наличии узлов в радиальной волновой функции атомного электрона в поведении функции  $P(b)$  могут наблюдаться осцилляции.

На рис. 9.5 приведено измеренное таким образом интегральное сечение ионизации  $M$ -оболочки атома ксенона протонами.

Большой интерес представляют данные о зависимости выхода отдельных характеристических линий от прицельного параметра соударения падающей заряженной частицы атомом вещества; варьируя параметр соударения, мы как бы направляем падающий пучок в область пространственного расположения разных оболочек: в случае центральных соударений — наиболее сильно связанных, в случае периферических соударений — наиболее слабо связанных оболочек. Привязка выхода характеристического излучения к прицельному параметру соударения обеспечивается в корреляционных экспериментах, когда рассеянная атомом вещества заряженная частица регистрируется под определенным углом рассеяния на совпадение с этим излучением (рис. 9.6).

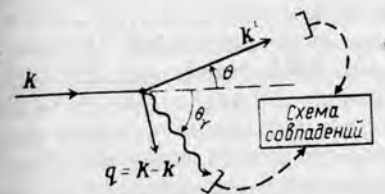


Рис. 9.6. Схема корреляционного эксперимента для определения зависимости выхода характеристического излучения от прицельного параметра соударения

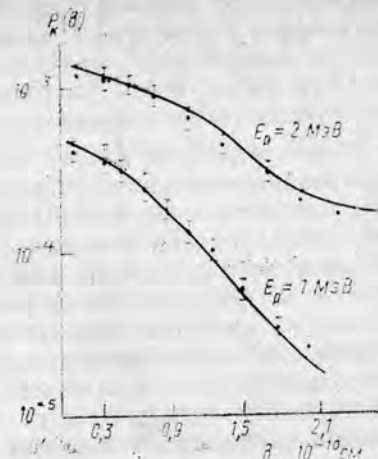


Рис. 9.7. Зависимость вероятности  $P_k(\theta)$  ионизации  $K$ -оболочки атомов меди протонами от прицельного параметра  $b$  [по: Andersen J. U. et al. // NIM. 1976. Vol. 132. P. 507]. Сплошные линии — результаты теоретического расчета

### § 9.3. УГЛОВАЯ АНИЗОТРОПИЯ ХАРАКТЕРИСТИЧЕСКОГО ИЗЛУЧЕНИЯ. ЯВЛЕНИЕ ВЫСТРАИВАНИЯ АТОМОВ СРЕДЫ

Опыт показывает, что в некоторых случаях угловое распределение характеристического электромагнитного излучения атомов среды, индуцируемого падающим на мишень пучком частиц, оказывается анизотропным. В условиях, когда прошедшие через мишень частицы не регистрируются, единственным выделенным направлением в пространстве является направление падающего пучка. В соответствии с общими законами симметрии угловое распределение излучения в таких условиях всегда симметрично относительно поворотов вокруг этого выделенного направления, а также относительно отражения в плоскости, перпендикулярной этому направлению. Следовательно, его можно представить в виде разложения

$$W(\vartheta_\gamma) = \sum_{L=0, 2, \dots, L_{\max}} a_L P_L(\cos \vartheta_\gamma), \quad (9.9)$$

где  $\vartheta_\gamma$  — угол между падающим пучком частиц и направлением на детектор электромагнитного излучения, а  $P_L(\cos \vartheta_\gamma)$  — полиномы Лежандра четного порядка. В оптически разрешенных переходах  $L_{\max} \leq 2$ , т. е. форма углового распределения фотонов характеризуется единственным параметром:

$$W(\vartheta_\gamma) \sim 1 + \alpha_2 P_2(\cos \vartheta_\gamma). \quad (9.10)$$

Возникновение угловой анизотропии характеристического излучения говорит о том, что атом-излучатель каким-то образом «запоминает» направление пучка взаимодействовавших с ним частиц. Что за механизм позволяет индивидуальному атому среды удерживать такую информацию?

Рассмотрим этот вопрос сначала в частном случае — на примере возбуждения резонансного перехода  $^1S \rightarrow ^1P$  в атомах какого-либо инертного газа пучком быстрых заряженных частиц. Допустим, что характеристическое излучение, возникающее при обратном спонтанном переходе возбужденного атома в основное состояние  $^1P \rightarrow ^1S$ , регистрируется на совпадение с рассеянной частицей, так что каждый акт испускания фотона возбужденными атомами оказывается привязанным к определенному значению вектора импульса рассеянной частицы. Такой принцип лежит в основе корреляционного метода  $(e, e'\gamma)$  — одного из самых информативных методов современной атомной спектроскопии (осуществление того же принципа в эксперименте с пучками тяжелых заряженных частиц сопряжено с большими техническими трудностями ввиду очень узкого в этом случае углового диапазона вылета рассеянных частиц).

В рассматриваемом нами примере возбужденное состояние атома среды  $^1P$  является трехкратно вырожденным. Введем соответствующие обозначения для трех подуровней:  $^1P_{M=1}$ ,  $^1P_{M=0}$  и  $^1P_{M=-1}$ , где  $M$  — проекция орбитального момента атома на ось квантования. Если принять для расчета борновское приближение, то вероятность возбуждения каждого из подуровней  $^1P_M$  при условии, что импульс падающей частицы меняется с  $k$  на  $k'$ , можно найти по формуле (см., например, (2.16))

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} \Big|_{S \rightarrow ^1P_M} = \frac{k'}{k} \left( \frac{d\sigma}{d\Omega} \right)_R \left| \langle ^1P_M \left| \sum_{l=1}^Z e^{i(k-k')r} \right| ^1S \rangle \right|^2, \quad (9.11)$$

где  $\left( \frac{d\sigma}{d\Omega} \right)_R$  — дифференциальное сочетание Резерфордского рассеяния точечным зарядом. При необходимости отсюда можно вычислить и суммарную вероятность возбуждения уровня  $^1P$  безотносительно к ориентации углового момента атома:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} \Big|_{S \rightarrow ^1P} = \sum_{M=0, \pm 1} \frac{d\sigma}{d\Omega} \Big|_{S \rightarrow ^1P_M}. \quad (9.12)$$

Нас, однако, как раз и будет занимать вопрос об ориентации этого момента. Из формулы (9.11) видно, что, вообще говоря, состояния  $^1P_M$  с разными значениями проекции момента заселяются в результате неупругого рассеяния заряженной частицы неодинаково (неравномерно). Выберем ось квантования вдоль направления передаваемого импульса  $q = k - k'$ . В этом случае матричные элементы перехода принимают вид

$$\langle ^1P_M \left| \sum_{l=1}^Z e^{iqz_l} \right| ^1S \rangle \Rightarrow \langle ^1P_M \left| \sum_{l=1}^Z e^{iqz_l} \right| ^1S \rangle, \quad (9.13)$$

где теперь  $M$  — проекция углового момента атома на направление вектора  $q$ , а  $z_l$  — проекция на это направление радиуса-вектора атомного электрона. Оператор  $\sum_l e^{iqz_l}$  не содержит азиму-

тальных переменных и, следовательно, не меняет магнитных квантовых чисел состояний атома. Поэтому в рассматриваемом процессе неупругого рассеяния быстрой заряженной частицы из трех состояний  $^1P_M$  заселяется (в условиях применимости борновского приближения) лишь единственное состояние  $^1P_{M=0}$  с нулевым значением проекции момента на направление передаваемого импульса  $q = k - k'$ . Последующий спонтанный электромагнитный переход  $^1P \rightarrow ^1S$  идет, таким образом, в условиях неравномерного заселения разных магнитных подуровней возбужденного состояния, что и является непосредственной причиной угловой анизотропии электромагнитного излучения в системе отсчета, задаваемой векторами  $k$  и  $k'$ , т. е. причиной угловой корреляции между неупруго рассеянной частицей и испускаемым фотоном.

Специфические правила отбора по магнитному квантовому числу при возбуждении атома быстрой частицей, которые мы установили из квантовомеханического анализа этого процесса, можно понять и с помощью классической механики. Здесь аналогом борновского приближения является приближение однократного столкновения частиц с атомом. В этом случае вектор передаваемого атому углового момента  $L = [r \times p]$  строго перпендикулярен вектору передаваемого импульса, т. е. его проекция на вектор передаваемого импульса равна нулю. А это и есть, по существу, то самое правило отбора  $\Delta M = 0$  (при выборе оси квантования вдоль вектора  $q = k - k'$ ), которое мы установили выше.

Описанное выше особое свойство состояния углового момента возбужденного атома, «приготавливаемого» в процессе рассеяния быстрых частиц, носит название *выстроенности* (alignment). Мы говорим, например, что и в процессе  $(e, e'\gamma)$  возбужденный атом оказывается *выстроенным* относительно направления вектора  $q = k - k'$ . Явление выстраивания относится к кругу поляризационных явлений и присуще самым разнообразным атомным и ядерным процессам. Для большей ясности проведем параллель между выстроенной и поляризованной системами. В обоих случаях в пространстве можно указать некоторое выделенное направление, которое служит естественной осью квантования для углового момента системы. В случае поляризованной системы вдоль этого выделенного направления смотрит вектор углового момента системы  $\langle L \rangle$  (его среднее значение). В случае выстроенной системы среднее значение вектора углового момента равно нулю, но (в отличие от неполяризованной системы) это достигается не равномерным заселением всех магнитных подуровней, а симметричным

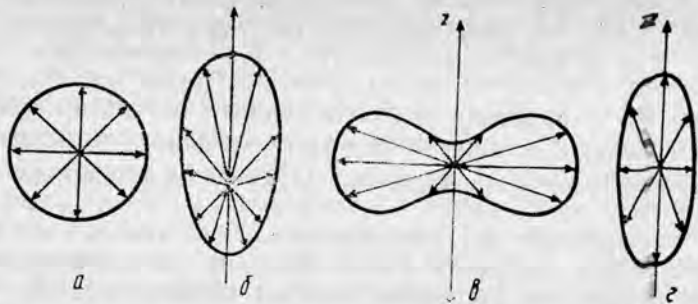


Рис. 9.8. Схема ориентации углового момента неполяризованной (а), поляризованной (б) и выстроенной систем (в, г)

заселением пары подуровней с каждым из значений  $M$  и  $-M$  (рис. 9.8).

Разбирая суть механизма возникновения угловой анизотропии на примере корреляционных экспериментов типа  $(e, e'\gamma)$ , мы несколько ушли в сторону от нашего основного вопроса об угловой анизотропии характеристического излучения, сопровождающего прохождение частиц через вещество и регистрируемого простейшим образом — без совпадения с рассеянной частицей. В таких условиях экспериментатор наблюдает интегральный эффект, соответствующий всем возможным направлениям вылета рассеянной частицы, а следовательно, и всему доступному диапазону значений вектора передаваемого импульса. Анизотропия излучения в условиях эксперимента без совпадений говорит о том, что в результате такого интегрирования эффект выстраивания углового момента атома не размывается полностью, не исчезает, хотя величина эффекта, как правило, здесь значительно меньше, чем в корреляционных экспериментах. Конечно, теперь осью выстраивания оказывается единственное остающееся выделенным в пространстве направление — направление падающего пучка. Здесь заметим, что особенностью электромагнитного излучения выстроенной системы является не только анизотропия углового распределения испущенных фотонов, но и линейная поляризация излучения. Ввиду общего происхождения этих двух явлений коэффициент угловой анизотропии и степень линейной поляризации излучения  $P_L$  связаны между собой строгим алгебраическим соотношением. Например, в случае перехода  $^1P \rightarrow ^1S$  оно имеет вид  $\alpha_2 = -2P_L/(3 - P_L)$ .

Приведем также пример выражения, связывающего степень линейной поляризации излучения  $P_L$  с относительными вероятностями заселения магнитных подуровней возбужденного атома. Так, если при переходе  $J \rightarrow J-1$  излучение регистрируется под углом  $90^\circ$  к падающему пучку частиц, то степень линейной поляризации излучения дается выражением

$$P_L = \frac{J(J+1)\tau - 3 \sum_M M^2 \sigma_M}{J(3J-1)\tau - \sum_M M^2 \sigma_M}, \quad (9.14)$$

где  $\sigma_M$  — интегральные сечения возбуждения подуровней  $|JM\rangle$ , а  $\sigma$  — их сумма;  $\sigma = \sum_M \sigma_M$ . В частном случае возбуждения  $nP$ -состояния для линейной поляризации излучения в переходе  $nP \rightarrow n'S$ , отсюда имеем  $P_L = (\sigma_0 - \sigma_1)/(\sigma_0 + \sigma_1)$ . При статистическом заселении подуровней ( $\sigma_M = \frac{1}{2J+1} \sigma$ ) излучение атома, конечно, неполяризовано и изотропно.

Полагаясь на приведенные выше выражения, нетрудно усмотреть одну важную закономерность в изменении характера выстроенности атомов среды с изменением энергии падающих частиц. В пределе очень высоких энергий падающие на атом частицы рассеиваются в очень узком конусе и в каждом акте рассеяния передаваемый атому импульс (вдоль которого выстраивается угловой момент атома) практически перпендикулярен направлению падающего пучка. В противоположном пределе самых низких энергий, у порога возбуждения рассматриваемого состояния атома, передаваемый импульс совпадает с импульсом налетающей частицы, т. е. направлен вдоль падающего пучка. Таким образом, при переходе от малых к большим энергиям характер выстраивания качественно меняется, при этом в некоторой точке выстроенность атома, а следовательно, угловая анизотропия и линейная поляризация излучения пропадают, после чего знак эффекта сменяется на противоположный (рис. 9.9).

Механизм выстраивания атома под действием потока частиц является общим при возбуждении как дискретных (подпороговых), так и автоионизационных (лежащих выше порога ионизации) состояний атома. Во втором случае выстроенность возбужденного атома может проявляться и в радиационном и в безрадиационном каналах его девозбуждения — как эффект угловой анизотропии вылетающих оже-электронов (рис. 9.10).

#### § 9.4. ЭЛЕКТРОМАГНИТНОЕ ИЗЛУЧЕНИЕ ПРИ КАНАЛИРОВАНИИ ЗАРЯЖЕННЫХ ЧАСТИЦ

Одно из ярких проявлений эффекта каналирования — ориентационная зависимость выхода характеристического рентгеновского излучения среды при бомбардировке монокристаллической мишени направленным пучком частиц (рис. 9.11). Природа явления проста: каналированная частица реже, чем неканалированная, взаимодействует с электронами внутренних оболочек атомов решетки, и следовательно, с меньшей вероятностью способна создавать вакансии в этих внутренних оболочках. Известен и другой



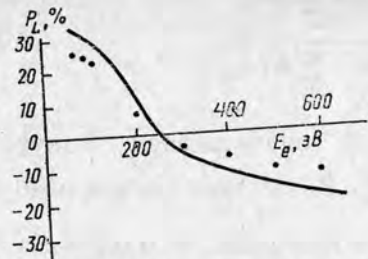


Рис. 9.9. Степень линейной поляризации  $P_L$  линии  $3'D-2'P$  при возбуждении атомов гелия электронным ударом [по: Moussa M. et al. // Physica. 1969. Vol. 40. P. 517]. Сплошная линия соответствует теоретическому расчету выстроенности

Рис. 9.10. Угловое распределение оже-электронов при возбуждении электронным ударом автоионизационного состояния  $2p^5 3s^2 2P_{3/2}$  в атомах натрия [по: Theodosiou C. // Phys. Rev. 1977. Vol. A16. P; 2232]

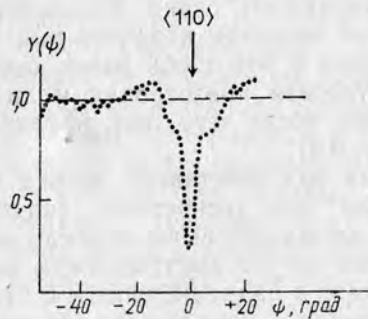


Рис. 9.11. Ориентационная зависимость выхода характеристического рентгеновского излучения монокристалла меди (L-серия) при бомбардировке протонами с энергией 200 кэВ;  $\psi$  — угол между направлением падающего пучка и осью  $\langle 110 \rangle$  [по: Cairus J. A. et al. // Atomis Collisions in Solids, IV. Gordon, Breach, 1972. P. 5]

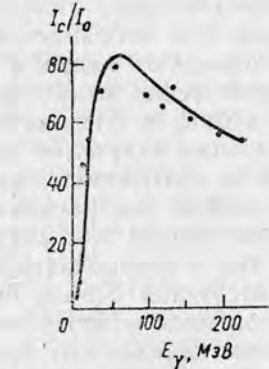
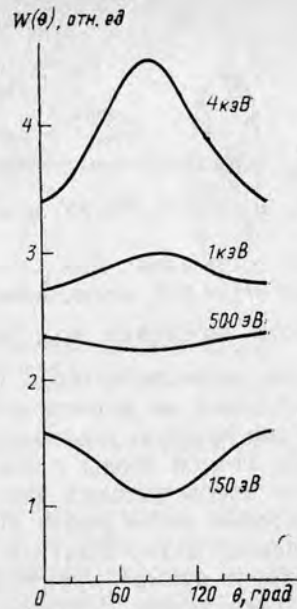


Рис. 9.12. Отношение выхода  $\gamma$ -квантов  $I_c$  при каналировании вдоль направления  $\langle 110 \rangle$  к выходу в неориентированной мишени  $I_0$  при бомбардировке монокристалла алмаза пучком электронов с энергией 4,7 ГэВ [по: Аганьянц А. О. и др. // Письма в ЖЭТФ. 1979. Т. 29. С. 554]. Сплошная кривая — теоретический расчет в приближении непрерывного осевого потенциала Линдхарда

эффект той же природы: выход характеристического излучения ионов падающего пучка также обнаруживает четкий провал в пределах угла каналирования.

Огромный интерес вызывает предсказанный в середине 70-х гг. М. А. Кумаховым эффект интенсивного излучения, сопровождающего каналирование легких релятивистских частиц. Излучение Кумахова обнаружено и детально изучается во многих лабораториях при каналировании и электронов и позитронов в широком диапазоне энергий падающих пучков — от нескольких МэВ до десятков ГэВ. Первое экспериментальное подтверждение теоретических предсказаний было получено в Ереване при энергии пучка электронов 4,7 ГэВ (рис. 9.12). Характерной особенностью излучения Кумахова, качественно отличающей его от тормозного и других видов излучения, является сильная зависимость интенсивности и формы спектра излучения от знака заряда каналированной частицы. В этом проявляется квантовый характер поперечного движения электронов и позитронов в канале монокристалла: спектр уровней частицы в канале (переходы между которыми и приводят к электромагнитному излучению), а также характер заселения этих уровней существенно различаются для электронов и позитронов.

На рис. 9.13 показано расположение низших уровней электрона в осевом канале  $\langle 110 \rangle$  монокристалла кремния, найденное теоретически при квантовании поперечной энергии электрона в потенциале струны. Если аппроксимировать этот потенциал выражением

$$U(\rho) = -\frac{\alpha}{\rho}, \quad (9.15)$$

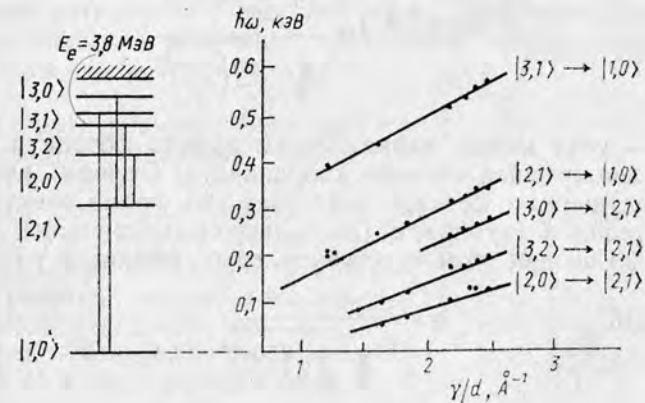


Рис. 9.13. Спектр уровней поперечного движения электрона в осевом канале  $\langle 110 \rangle$  монокристалла кремния ( $d=3,84 \text{ \AA}$ ); положение основных пиков в спектрах излучения Кумахова в зависимости от энергии электронов [по: Cue N. et al. // Phys. Lett. 1980. Vol A80. P. 29]

где  $\rho$  — расстояние от оси канала, то такая задача в квантовой механике имеет точное решение:

$$E_{n, |m|} = \frac{m_e \alpha^2}{2\hbar^2 \left( n + |m| + \frac{1}{2} \right)^2}, \quad (9.16)$$

или, эквивалентно,

$$E_N = -\frac{m_e \alpha^2}{2\hbar^2 (N - 1/2)^2}; \quad (9.17)$$

здесь  $n=0, 1, 2, \dots$  — радиальное квантовое число,  $m=0, \pm 1, \pm 2, \dots$  — проекция углового момента электрона на ось канала,  $N=n+|m|+1$  — аналог главного квантового числа в кулоновском поле  $V(r)=-\alpha/r$ . Из (9.16) видно, что уровни частиц в потенциале (9.15) характеризуются случайным вырождением; с учетом отклонения непрерывного потенциала струны от формы  $1/\rho$  это вырождение снимается, что и отражено на рис. 9.13. В переходах электрона между состояниями  $|N, |m| \rangle$  доминируют электрические дипольные переходы, когда проекция момента  $m$  меняется на единицу. Энергия испущенного фотона в движущейся системе координат, скорость которой совпадает со скоростью  $v_{\parallel}$  поступательного движения электрона вдоль оси канала, есть просто разность уровней электрона  $E_{N, |m|}$ :

$$(\hbar\omega)_{\text{дв}} = E_{N_i, |m_i|} - E_{N_f, |m_f|}. \quad (9.18)$$

Для перехода в лабораторную систему воспользуемся преобразованием Лоренца

$$\hbar\omega = (\hbar\omega)_{\text{дв}} \frac{1 + \frac{v_{\parallel}}{c} \cos \vartheta_{\text{дв}}}{\sqrt{1 - \left(\frac{v_{\parallel}}{c}\right)^2}}, \quad (9.19)$$

где  $\vartheta_{\text{дв}}$  — угол между направлением вылета фотона и осью канала (в движущейся системе координат). Отсюда видно, что спектр испущенных фотонов повторяет по форме спектр излучения электрона в двумерном (аксиально-симметричном) потенциале  $U(\rho)$ , но он при этом «растянут», грубо говоря, в  $\gamma$  раз, где

$$\gamma = \frac{1}{\sqrt{1 - \left(\frac{v_{\parallel}}{c}\right)^2}} \quad (9.20)$$

лоренц-фактор, соответствующий поступательному движению электрона (кроме того, ввиду угловой расходимости падающего на монокристалл пучка каждая линия излучения приобретает длинный, монотонно спадающий «хвост» со стороны меньших час-

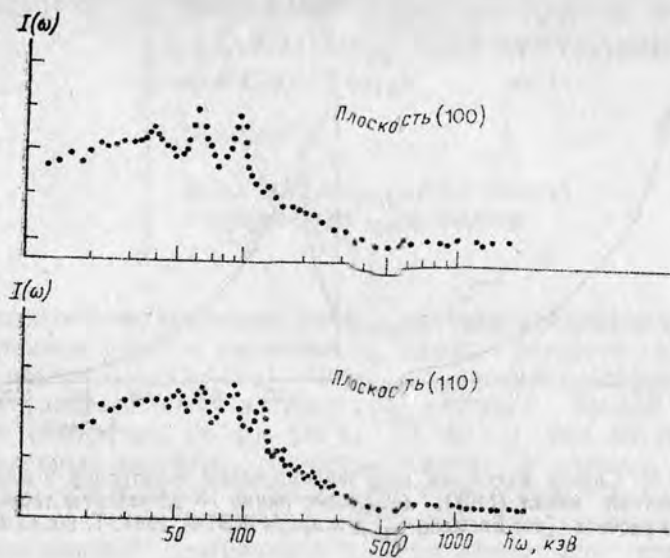


Рис. 9.14. Спектр излучения при плоскостном каналировании электронов с энергией 56 МэВ в монокристалле кремния [по: Swent R. L. et al. // Phys. Rev. Lett. 1979. Vol. 43. P. 1723]

тот). Дело обстоит так, как будто положение уровней, соответствующих поперечному движению электрона в канале, зависит через лоренц-фактор электрона от его полной энергии  $E$ . На рис. 9.13 показано положение основных пиков в спектрах излучения Кумахова, измеренных при бомбардировке монокристалла кремния пучком электронов с энергией до 4,5 МэВ. Квазирезонансная структура спектров излучения электронов наблюдается и при плоскостном каналировании (рис. 9.14).

Форма спектров излучения при каналировании позитронов совсем другая (рис. 9.15). В отличие от электронов потенциал поперечных колебаний позитронов близок к гармоническому и, следовательно, спектр энергий поперечного движения почти эквидистантен. В таком случае излучение возникает лишь при переходах между соседними уровнями и разброс между энергиями различных переходов велик: все они сливаются в одну, правда достаточно широкую, линию. Типичные спектры излучения при

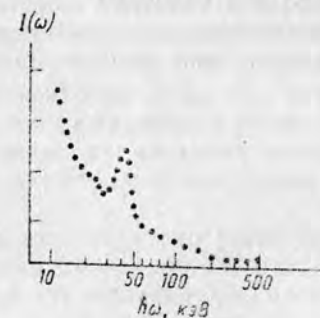


Рис. 9.15. Спектр излучения при каналировании позитронов с энергией 56 МэВ в кремнии (плоскостной канал (110)) [по: Alguard M. J. et al. // Phys. Rev. Lett. 1979. Vol. 42. P. 1148]

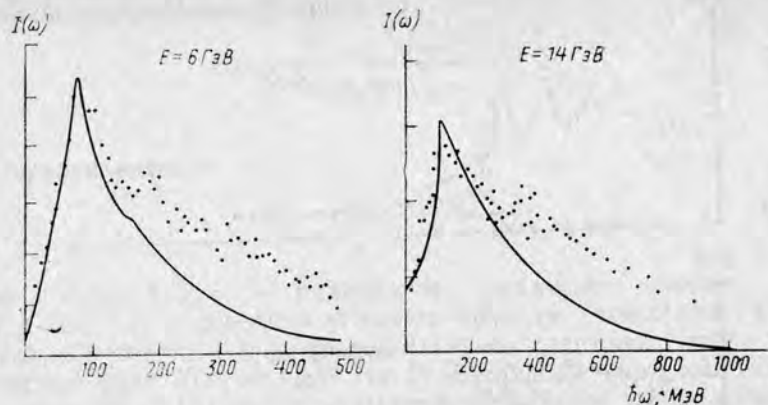


Рис. 9.16. Спектр излучения при каналировании позитронов в алмазе (плоскостной канал (110)). Сплошные линии — результаты теоретического расчета [по: Базылев В. А. и др. // ЖЭТФ. 1981. Т. 80. С. 608]

каналировании ультрарелятивистских позитронов показаны также на рис. 9.16.

Итак, каналированные электроны и позитроны представляют собой источник жесткого, остро направленного электромагнитного излучения, диапазон частот которого, при использовании современных ускорителей, простирается от рентгеновской области до сотни МэВ. Дальнейшее экспериментальное и теоретическое изучение свойств и механизма формирования этого излучения (включая вопросы поляризации излучения, влияния на его параметры тепловых колебаний кристалла и др.) сулят интересные возможности его практического применения, в том числе для исследования самого каналирования как физического явления.

### РАЗДЕЛ III ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ НЕЙТРОНОВ С ВЕЩЕСТВОМ

#### Лекция 10

#### § 10.1. ЭЛЕМЕНТАРНАЯ ТЕОРИЯ ЗАМЕДЛЕНИЯ НЕЙТРОНОВ

Основными механизмами взаимодействия нейтронов с веществом являются упругое рассеяние на ядрах, неупругое рассеяние, захват нейтронов ядрами, сопровождающийся испусканием  $\gamma$ -квантов (радиационный захват) или делением, прочие ядерные реакции (например,  $(n, p)$ ,  $(n, \alpha)$ ,  $(n, 2n)$ ...). Все это процессы, обусловленные сильным взаимодействием. В отличие от большинства рассмотренных нами в разд. I процессов взаимодействия заряженных частиц с атомами вещества они разыгрываются в очень компактной, центральной области атома при непосредственном сближении нейтрона с ядром. Нейтрон не имеет электрического заряда, однако в отдельных задачах электромагнитное взаимодействие нейтрона с веществом, обусловленное наличием у нейтрона магнитного момента, представляет большой интерес.

В элементарной теории замедления нейтронов мы пренебрегаем всеми процессами их взаимодействия с веществом, кроме ядерного упругого рассеяния. В каждом акте упругого рассеяния  $n + A \rightarrow n + A$  кинетическая энергия падающего нейтрона  $E_0$  делится между энергией рассеянного нейтрона  $E$  и энергией ядра отдачи  $E_A$ ; при этом  $E$  составляет тем меньшую долю энергии  $E_0$ , чем легче ядро  $A$  и больше угол  $\theta$  рассеяния нейтрона. Мы будем трактовать процесс замедления как совокупность независимых друг от друга последовательных столкновений нейтрона с ядрами, каждое из которых происходит в соответствии с вероятностными законами бинарных столкновений. В конечном счете нас будет интересовать среднее число столкновений нейтрона  $\bar{n}(E_0, E)$ , в результате которых его энергия уменьшается от заданного значения  $E_0$  до другого заданного значения  $E$ , а также время замедления и среднее расстояние, на которое удаляется нейтрон за это время от источника.

Начнем с кинематики элементарного акта упругого рассеяния. Здесь удобно воспользоваться векторными диаграммами, наглядно передающими соотношение импульсов сталкивающихся частиц и углов рассеяния в лабораторной системе координат и в системе центра масс (рис. 10.1):

$$\begin{cases} \mathbf{p}_0 = \mathbf{p} + \mathbf{p}_A, \\ E_0 = E + E_A, \end{cases} \quad (\mathbf{p}_0)_{c.m.} = \frac{A}{A+1} \mathbf{p}. \quad (10.1)$$

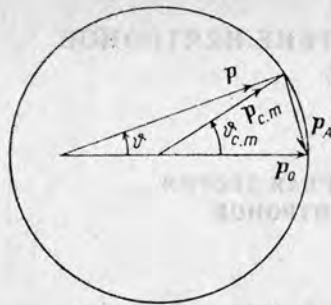


Рис. 10.1. Векторная диаграмма импульсов в процессе  $n+A \rightarrow n+A$

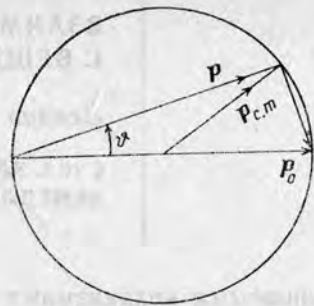


Рис. 10.2. Векторная диаграмма импульсов в процессе  $n+p \rightarrow n+p$

Векторные диаграммы позволяют легко найти энергию рассеянного нейтрона как функцию угла рассеяния:

$$E = \frac{p^2}{2m_n} = E(\vartheta). \quad (10.2)$$

Угловое распределение рассеянных нейтронов в элементарном акте упругого столкновения дается дифференциальным сечением  $\frac{d\sigma}{d\Omega}(\vartheta)$ . Зная из кинематики связь между  $E$  и  $\vartheta$ , можно пересчитать угловое распределение нейтронов на распределение нейтронов по энергии:

$$\frac{d\sigma}{dE} = \frac{d\sigma}{d\Omega} \frac{2\pi d(\cos \vartheta)}{dE}. \quad (10.3)$$

Подчеркнем, что в этом выражении первый множитель отражает закон взаимодействия нейтрона с рассматриваемым ядром, а второй является чисто кинематическим множителем и вычисляется с помощью соотношения (10.2).

Далее продолжим наши выкладки применительно к важнейшему частному случаю рассеяния нейтронов ядрами водорода — протонами:  $n+p \rightarrow n+p$ ; равенство масс сталкивающихся частиц сильно упрощает в этом случае все кинематические соотношения (рис. 10.2):

$$\begin{cases} E_n = E = E_0 \cos^2 \vartheta, \\ E_p = E_0 \sin^2 \vartheta, \end{cases} \quad \vartheta = \frac{1}{2} \vartheta_{c.m.} \quad (10.4)$$

В (10.3) входит дифференциальное сечение рассеяния нейтронов в лабораторной системе. Выразим его через дифференциальное сечение рассеяния в Ц-системе:

$$\frac{d\sigma}{dE} = \left( \frac{d\sigma}{d\Omega} \right)_{c.m.} \frac{d\Omega_{c.m.}}{d\Omega} = \left( \frac{d\sigma}{d\Omega} \right)_{c.m.} \frac{\sin \vartheta_{c.m.} d\vartheta_{c.m.}}{\sin \vartheta d\vartheta} = \left( \frac{d\sigma}{d\Omega} \right)_{c.m.} 4 \cos \vartheta. \quad (10.5)$$

С другой стороны, в рассматриваемом случае  $np$ -рассеяния из (10.4) имеем

$$\frac{dE}{d(\cos \vartheta)} = 2E_0 \cos \vartheta. \quad (10.6)$$

Подставляя (10.5) и (10.6) в (10.3), получаем

$$\frac{d\sigma}{dE} = \left( \frac{d\sigma}{d\Omega} \right)_{c.m.} 4 \frac{1}{E_0}; \quad (10.7)$$

отсюда видно, что распределение рассеянных нейтронов по энергии (в лабораторной системе) полностью определяется угловой зависимостью  $np$ -рассеяния в Ц-системе, т. е. дифференциальным сечением  $\left( \frac{d\sigma}{d\Omega} \right)_{c.m.}$ . Здесь необходимо обратиться к квантовой теории.

Согласно квантовой теории столкновений, если дебройлевская длина волны нейтрона существенно превышает размеры области взаимодействия

$$\lambda_n \gg R, \quad (10.8)$$

то в рассеянии доминирует  $s$ -волна ( $l=0$ ), при этом угловое распределение частиц после столкновения (в Ц-системе) практически изотропно, а дифференциальное сечение рассеяния с хорошей точностью выражается через один параметр — фазу  $s$ -волны:

$$\left( \frac{d\sigma}{d\Omega} \right)_{c.m.} = \frac{1}{k_{c.m.}^2} \sin^2 \delta_0(E_{c.m.}). \quad (10.9)$$

Проверим, как выполняется неравенство (10.8), если процесс замедления нейтронов рассматривать начиная с энергии нейтрона в 1 МэВ. В Ц-системе эта энергия составит 0,5 МэВ. Приведенная масса  $np$ -системы  $\mu = 1/2 m_n$ . Для дебройлевской длины волны получаем

$$\lambda = \frac{1}{k_n} = \frac{1}{\sqrt{2E_{c.m.}/\mu}} \approx 5 \cdot 10^{-2} \frac{1}{\text{МэВ}/c} \approx 10 \text{ фм}. \quad (10.10)$$

Это, действительно, много больше, чем радиус  $np$ -взаимодействия, который составляет примерно 1 фм. Мы взяли  $E_0 = 1$  МэВ; при меньших энергиях нейтрона соотношение (10.8) выполняется еще лучше. В пределе совсем малых энергий фаза  $s$ -волны выражается через единственный не зависящий от энергии параметр — длину рассеяния  $a$ , так что дифференциальное и полное сечения рассеяния в Ц-системе имеют совсем простой вид:

$$\left( \frac{d\sigma}{d\Omega} \right)_{c.m.} = a^2; \quad \sigma = 4\pi a^2. \quad (10.11)$$

Подставим (10.11) в (10.7):

$$\frac{d\tau}{dE} = 4\pi a^2 \frac{1}{E_0}. \quad (10.12)$$

Мы видим, что если угловое распределение *np*-рассеяния в Ц-системе изотропно, то распределение рассеянных нейтронов по энергии в лабораторной системе равномерно.

Для описания формы распределения рассеянных нейтронов по энергии введем понятие функции распределения. Пусть  $f_n(E_0, E)$  дает распределение нейтронов по энергии  $E$  после  $n$  актов упругого рассеяния при условии, что в первое столкновение нейтрон вошел с начальной энергией  $E_0$ . Для функции  $f_1(E_0, E)$  мы имеем из (10.12)

$$f_1(E_0, E) = \frac{1}{E_0}; \quad E \leq E_0. \quad (10.13)$$

В общем случае  $f_n(E_0, E)$  удовлетворяет очевидному рекуррентному соотношению

$$f_n(E_0, E) = \int_E^{E_0} f_{n-1}(E_0, E') \frac{dE'}{E'}. \quad (10.14)$$

Отсюда вместе с (10.13) получаем

$$f_n(E_0, E) = \frac{1}{E_0} \frac{1}{(n-1)!} \left( \ln \frac{E_0}{E} \right)^{n-1}. \quad (10.15)$$

Все  $f_n(E_0, E)$  нормированы на единицу:

$$\int_0^{E_0} f_n(E_0, E) dE = 1. \quad (10.16)$$

При этом средняя энергия нейтрона после  $n$  столкновений с протонами дается простым выражением

$$\langle \bar{E} \rangle_n = \int_0^{E_0} E f_n(E_0, E) dE = \frac{1}{2^n} E_0, \quad (10.17)$$

т. е. после каждого столкновения нейтрона с протоном его средняя энергия уменьшается вдвое; как мы видим, замедление нейтронов в водородсодержащей среде идет очень быстро (рис. 10.3).

Прочитаем зависимость (10.15) по-другому: какова относительная вероятность того, что нейтрон совершил «переход»  $E_0 \rightarrow E$ , испытав определенное число  $n$  соударений? Она дается выражением

$$\omega_n(E_0, E) = \frac{f_n(E_0, E)}{\sum_{n=1}^{\infty} f_n(E_0, E)}. \quad (10.18)$$

Отсюда получаем искомое среднее число столкновений, в результате которых энергия нейтрона меняется от  $E_0$  до  $E$ :

$$\bar{n}(E_0, E) = \frac{\sum_{n=1}^{\infty} n f_n(E_0, E)}{\sum_{n=1}^{\infty} f_n(E_0, E)} = \ln \frac{E_0}{E} + 1. \quad (10.19)$$

В каких интервалах значений  $E_0$  и  $E$  может интересоваться нас эта величина? Практический интерес представляют значения  $E_0$  около 1 МэВ: именно такова, например, начальная энергия нейтронов в реакторах (при делении урана  $^{235}\text{U}$  энергия нейтронов составляет 1,46 МэВ). Другая, нижняя граница интервала ( $E_0, E$ ) определяется переходом режима замедления, главную роль в котором играет последовательное упругое рассеяние нейтронов ядрами вещества, в режим термализации, где обмен энергией между нейтроном и ядрами вещества идет уже в обе стороны. В результате процесса термализации средняя скорость нейтрона становится порядка тепловой, а распределение по скоростям — типа максвелловского (хотя, если говорить строго, оно существенно отличается от максвелловского за счет процессов захвата). Таким образом, в качестве нижней границы интервала ( $E_0, E$ ) можно взять величину порядка средней энергии теплового движения частиц при комнатной температуре, т. е.  $\approx 0,025$  эВ.

Принято относить количественные характеристики процесса замедления к интервалу (1 МэВ, 1 эВ). Впрочем, если обратиться к (10.19), то видно, что средние числа столкновений для этого интервала и для интервала (1 МэВ; 0,025 эВ), ввиду логарифмической зависимости  $\bar{n}(E_0, E)$  от энергии, не сильно различаются между собой:  $\ln \frac{1 \text{ МэВ}}{1 \text{ эВ}} \approx 14$ ;  $\ln \frac{1 \text{ МэВ}}{0,025 \text{ эВ}} \approx 18$ . В обоих случаях среднее число столкновений превышает десяток, и поэтому в дальнейшем мы опустим последнее слагаемое в (10.19), ограничившись более простой формулой:

$$\bar{n}(E_0, E) \approx \ln \frac{E_0}{E}. \quad (10.20)$$

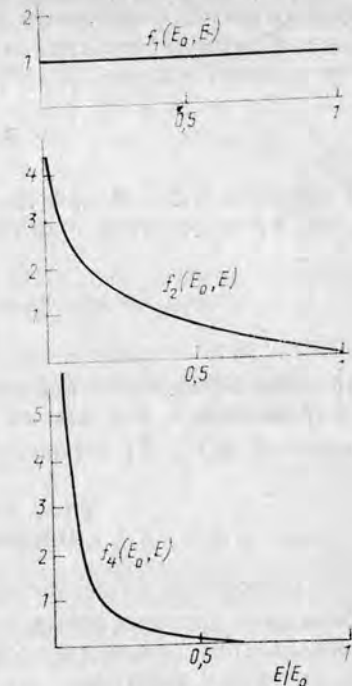


Рис. 10.3. Распределение нейтронов по энергии  $f_n(E_0, E)$  после первого, второго, четвертого столкновений

Вспомним, что начиная с формул (10.4) мы перешли от общего рассмотрения к частному случаю замедления нейтронов в водороде. Повторяя все сделанные выше выкладки, можно показать, что в общем случае среднее число столкновений дается формулой

$$\bar{n}(E_0, E) = \frac{1}{\xi} \ln \frac{E_0}{E}. \quad (10.21)$$

В пределе  $A \gg 1$  и при  $A=1$  для кинематического множителя  $\xi = \xi(A)$  существуют простые выражения:

$$\xi = \begin{cases} 1; & A = 1; \\ \approx \frac{2}{A}; & A \gg 1. \end{cases} \quad (10.22)$$

Процесс замедления нейтронов в тяжелых средах растягивается по сравнению с тем, как он идет в водороде, и среднее число столкновений  $\bar{n}(E_0, E)$  согласно (10.21) растет пропорционально  $A$ .

### § 10.2. СРЕДНЕЕ ВРЕМЯ ЗАМЕДЛЕНИЯ НЕЙТРОНА; ДЛИНА ЗАМЕДЛЕНИЯ

Изложенная выше элементарная теория замедления позволяет вычислить среднее время  $\bar{t}(E_0, E)$ , за которое энергия нейтрона уменьшается от одного заданного значения до другого. Его можно найти как интеграл

$$\bar{t}(E_0, E) = \int_0^t dt' = \int_{E_0}^E \left( \frac{dt'}{dE'} \right) dE'. \quad (10.23)$$

если известна средняя скорость энергетических потерь нейтрона в процессе замедления. Пусть за некоторый промежуток времени  $(t', t' + \Delta t')$  энергия нейтрона уменьшается от  $E' + \Delta E'$  до  $E'$  (рис. 10.4). Соответственно среднее число столкновений за этот промежуток времени равно

$$\bar{\Delta n}(E' + \Delta E', E') = \frac{1}{\xi} \ln \frac{E' + \Delta E'}{E'} \approx \frac{1}{\xi} \frac{\Delta E'}{E'}. \quad (10.24)$$

Время между двумя последовательными столкновениями составляет в среднем  $\lambda_s/v$ , где  $\lambda_s$  — средняя длина свободного пробега между столкновениями, а  $v = \sqrt{2E/m_n}$  — скорость нейтрона. Таким образом, замедление нейтрона от энергии  $E' + \Delta E'$  до энергии  $E'$  занимает в среднем промежуток времени

$$\Delta t' = \frac{\lambda_s}{v} \bar{\Delta n}(E' + \Delta E, E') = \frac{\lambda_s}{v} \frac{1}{\xi} \frac{\Delta E'}{E'}. \quad (10.25)$$

Мы нашли, таким образом, среднюю скорость энергетических потерь нейтрона  $\frac{dE}{dt} = \frac{v}{\lambda_s} \xi E$  и можем вычислить интеграл

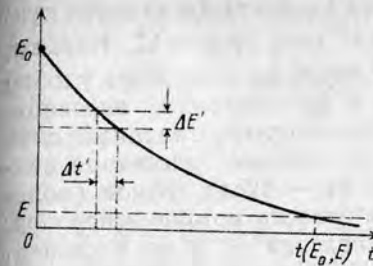


Рис. 10.4. Временная картина замедления нейтронов

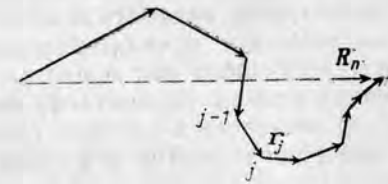


Рис. 10.5. Схема движения нейтрона при замедлении

(10.23). Если считать, что длина свободного пробега нейтрона  $\lambda_s$  на всем интервале замедления  $(E_0, E)$  постоянна, то интегрирование дает

$$\bar{t}(E_0, E) = \frac{2\lambda_s}{\xi} \left[ \frac{1}{v} - \frac{1}{v_0} \right], \quad (10.26)$$

где  $v_0$  и  $v$  — скорость нейтрона соответственно в начале и в конце интервала замедления. Из полученной формулы видно, что при  $E_0 \gg E$  среднее время замедления очень слабо зависит от начальной скорости (энергии) нейтрона; начальный сброс энергии при  $E_0 \gg E$  происходит очень быстро, и время этого сброса ничтожно мало по сравнению с полным временем замедления (см. рис. 10.4).

Перейдем теперь к пространственной картине процесса замедления. Траектория движения нейтрона в замедлителе представляет собой запутанную ломаную линию (рис. 10.5). Пусть вектор  $r_j$  соответствует участку траектории между  $(j-1)$ -м и  $j$ -м столкновениями нейтрона, так что после  $n$  столкновений нейтрон оказывается в точке с координатами

$$\mathbf{R}_n = \sum_{j=1}^n \mathbf{r}_j. \quad (10.27)$$

Вычислим средний квадрат удаления нейтрона от начала движения (т. е. от источника или от точки входа в среду замедления):

$$\bar{R}_n^2 = \sum_{j=1}^n \bar{r}_j^2 + 2 \sum_{j=1}^{n-1} \sum_{k=j+1}^n \overline{\mathbf{r}_j \cdot \mathbf{r}_k}. \quad (10.28)$$

здесь усреднение производится по большому числу независимых траекторий.

В первое слагаемое входит средний квадрат расстояния  $\bar{r}^2$ , проходимого нейтроном между двумя последовательными столкновениями. Выше мы ввели в рассмотрение среднее расстояние, проходимое нейтроном между двумя столкновениями, — сред-

ную длину свободного пробега нейтрона  $\lambda_s$ . Было бы неверно считать, что средний квадрат расстояния  $\bar{r}^2$  есть просто  $\lambda_s^2$ . Найдем, как в действительности выражается  $\bar{r}^2$  через  $\lambda_s$ . Для этого удобно рассмотреть вспомогательную задачу о прохождении плоскопараллельного пучка нейтронов через некоторый заданный слой интересующего нас вещества. Если  $\sigma_s$  — сечение рассеяния нейтрона атомом (молекулой) вещества, а  $n_0$  — число атомов (молекул) вещества в единице объема, то плотность потока нейтронов, прошедших слой  $x$  без столкновений, связана с  $x$  по экспоненциальному закону:

$$N(x) = N_0 e^{-n_0 \sigma_s x}. \quad (10.29)$$

Зная этот закон, можно вычислить среднее от любой степени расстояния, проходимого нейтроном до первого столкновения:

$$\bar{x}^v = \frac{\int x^v dN(x)}{\int dN(x)} = \frac{v!}{(n_0 \sigma_s)^v}. \quad (10.30)$$

Учитывая соотношение, связывающее между собой  $\lambda_s$  и  $\sigma_s$ :

$$\lambda_s = \frac{1}{n_0 \sigma_s}, \quad (10.31)$$

мы получаем отсюда вместе с соотношением

$$\bar{x} = \lambda_s, \quad (10.32)$$

также нужное нам в рассматриваемой задаче выражение для среднего квадрата расстояния, пройденного до первого столкновения:

$$\bar{x}^2 = 2\lambda_s^2. \quad (10.33)$$

Итак, первое слагаемое в (10.28) оказывается равным  $2n\lambda_s^2$ . Обратимся к вычислению второго слагаемого. В скалярное произведение  $\mathbf{r}_j \mathbf{r}_k$  входит косинус угла  $\Theta_{jk}$  между направлениями векторов  $\mathbf{r}_j$  и  $\mathbf{r}_k$ :

$$\mathbf{r}_j \mathbf{r}_k = r_j r_k \cos \Theta_{jk}. \quad (10.34)$$

Чтобы вычислить среднее от такого скалярного произведения, вспомним об исходном физическом предположении, которое мы положили в основу всего рассмотрения: столкновения нейтрона с ядрами разных атомов независимы друг от друга. Поэтому можно записать

$$\overline{\mathbf{r}_j \mathbf{r}_k} = \bar{r}_j \cdot \bar{r}_k \cdot \overline{\cos \Theta_{jk}} = \lambda_s^2 \cdot \overline{\cos \Theta_{jk}}. \quad (10.35)$$

Далее для вычисления среднего значения косинуса воспользуемся приемом, который мы уже применяли в лекции 1 при рассмотрении многократного рассеяния заряженных частиц, и перейдем от

угла между векторами  $\mathbf{r}_j$  и  $\mathbf{r}_k$  к углу  $\Theta_{j, k-1}$  между векторами  $\mathbf{r}_j$  и  $\mathbf{r}_{k-1}$ :

$$\overline{\cos \Theta_{jk}} = \overline{\cos \Theta_{j, k-1}} \overline{\cos \Theta_{k-1, k}}. \quad (10.36)$$

Из этого рекуррентного соотношения находим

$$\overline{\cos \Theta_{jk}} = (\overline{\cos \Theta})^{k-1}, \quad (10.37)$$

где  $\overline{\cos \Theta}$  — средний косинус угла рассеяния нейтрона в однократном столкновении. Теперь подставим (10.36), (10.37) и (10.33) в (10.28):

$$\bar{R}_n^2 = 2n\lambda_s^2 + 2 \sum_{j=1}^{n-1} \lambda_s^2 \{ \overline{\cos \Theta} + (\overline{\cos \Theta})^2 + \dots + (\overline{\cos \Theta})^{n-j} \}. \quad (10.38)$$

Суммируя геометрическую прогрессию и полагая далее  $n \gg 1$ , в итоге получим

$$\bar{R}_n^2 \approx \frac{2n\lambda_s^2}{1 - \overline{\cos \Theta}}. \quad (10.39)$$

Подставляя сюда (10.21), получим формулу для среднего квадрата расстояния, на которое удаляется нейтрон от источника при замедлении от энергии  $E_0$  до энергии  $E$ :

$$R^2(E_0, E) = 2\lambda_s \lambda_t \frac{1}{\xi} \ln \frac{E_0}{E}. \quad (10.40)$$

Мы ввели отдельное обозначение для комбинации средней длины свободного пробега и среднего косинуса угла расстояния:

$$\lambda_t \equiv \frac{\lambda_s}{1 - \overline{\cos \Theta}}, \quad (10.41)$$

которая называется *транспортной длиной* и находит широкое применение не только в нейтронной физике, но и во многих других задачах о взаимодействии частиц с веществом. Рассмотрим, как зависит  $\lambda_t$  от свойств среды и характеристик элементарного акта упругого рассеяния нейтрона ядром.

В то время как длина свободного пробега  $\lambda_s$  обратно пропорциональна полному сечению упругого рассеяния:

$$\frac{1}{\lambda_s} = n_0 \sigma_s = n_0 \int \frac{d\sigma}{d\Omega} d\Omega, \quad (10.42)$$

транспортная длина связана таким же соотношением с другой интегральной характеристикой элементарного акта — *транспортным сечением*  $\sigma_t$ :

$$\sigma_t = \int (1 - \overline{\cos \Theta}) \frac{d\sigma}{d\Omega} d\Omega; \quad (10.43)$$

Параметры замедления нейтронов в воде, тяжелой воде и графите

Вещество	Длина свободного пробега $\lambda_s$ , см	Время замедления $t_s$ , с	Длина замедления $L_s$ , см
H <sub>2</sub> O	1,1	$10^{-5}$	5,4
D <sub>2</sub> O	2,6	$4,6 \cdot 10^{-5}$	11
Графит	2,6	$1,5 \cdot 10^{-5}$	17,7

но по сравнению с экспериментальным: в самом начале процесса замедления полное сечение *np*-рассеяния заметно меньше, чем величина 20 б, которую мы приняли для оценок во всем интервале от 1 МэВ до 0,025 эВ (рис. 10.6). На самых ранних этапах замедления нейтрон проходит между столкновениями большие промежутки, а следовательно, и дальше уходит от источника, чем дает наш расчет.

В табл. 10.1 приведены параметры замедления нейтронов для воды и для двух других сред — тяжелой воды и графита. По всем этим параметрам обычная вода H<sub>2</sub>O могла бы быть самой подходящей средой для использования ее в качестве замедлителя в энергетических установках с нейтронами. Однако мощный радиационный захват нейтронов протонами  $n+p \rightarrow d+\gamma$ , который наступает в конце стадии замедления, делает обычную воду практически непригодной для этих целей. Вместо нее, как известно, используется тяжелая вода.

## Лекция 11

## § 11.1. ДВИЖЕНИЕ НЕЙТРОНОВ ПОСЛЕ ТЕРМАЛИЗАЦИИ; КОЭФФИЦИЕНТ ДИФФУЗИИ

Проследим за нейтронами в веществе после того, как закончился процесс их замедления и термализации. На этой стадии всякая неравномерность их пространственного распределения выравнивается диффузией. В настоящей лекции мы подойдем к уравнению диффузии нейтронов в рамках наиболее последовательного описания движения потоков частиц в веществе, которое дает физическая кинетика. Основное понятие физической кинетики — функция распределения. Свойства функции распределения нейтронов  $f(\mathbf{v}, \mathbf{r}, t)$ , где  $\mathbf{v}$  — скорость нейтрона в окрестности точки  $\mathbf{r}$  в момент времени  $t$ , раскроем через ее интегральные характеристики:

а) пространственную плотность нейтронов —

$$n(\mathbf{r}, t) = \int f(\mathbf{v}, \mathbf{r}, t) d^3v; \quad (11.1)$$

$$\frac{1}{\lambda_t} = n_0 \sigma_s (1 - \overline{\cos \theta}) = n_0 \sigma_t \quad (10.44)$$

(здесь  $\frac{d\sigma}{d\Omega}$  — дифференциальное сечение рассеяния нейтрона ядром в лабораторной системе). Когда рассеяние нейтрона ядром близко к изотропному (малые энергии и большие  $A$ ), транспортное сечение  $\sigma_t$  мало отличается от полного сечения  $\sigma_s$  и вместе с тем близки друг к другу  $\lambda_s$  и  $\lambda_t$ . В тех же случаях, когда диаграмма углового распределения нейтронов  $\frac{d\sigma}{d\Omega}$  вытянута вперед, эти

соотношения резко меняются:

$$\sigma_t \ll \sigma_s; \quad \lambda_t \gg \lambda_s. \quad (10.45)$$

В частном случае рассеяния нейтронов протонами согласно (10.11) и (10.5) имеем  $\overline{\cos \theta} = 2/3$  и, следовательно,

$$\lambda_t = 3\lambda_s. \quad (10.46)$$

Общепринятой характеристикой замедлителей нейтронов является длина замедления  $L_s$ :

$$L_s \equiv \sqrt{\frac{1}{6} R^2(E_0, E)} = \sqrt{\frac{1}{3} \lambda_s \lambda_t \frac{1}{\xi} \ln \frac{E_0}{E}}. \quad (10.47)$$

где в качестве  $(E_0, E)$  выбирается интервал (1 МэВ; 0,025 эВ) или иногда (1 МэВ; 1 эВ). Оценку длину замедления нейтронов в воде. Поскольку основной вклад в замедление в H<sub>2</sub>O дает водород, мы пренебрежем вкладом кислорода и в (10.47) положим  $\xi = 1$  и  $\lambda_t = 3\lambda_s$ . Длину свободного пробега нейтрона вычислим через плотность воды, сечение *np*-рассеяния, число Авогадро и молекулярный вес воды:

$$\lambda_s(\text{H}_2\text{O}) = \left[ \frac{N_{0p}(\text{H}_2\text{O})}{18} 2\sigma_s(\text{H}) \right]^{-1}. \quad (10.48)$$

Полное сечение рассеяния  $\sigma_s(H)$  для медленных нейтронов составляет примерно  $20 \text{ б} = 2 \cdot 10^{-23} \text{ см}^2$ . Подставив это значение в (10.48) и далее  $\lambda_s(\text{H}_2\text{O})$  в (10.47), получаем

$$\begin{aligned} \lambda_s(\text{H}_2\text{O}) &\approx 0,75 \text{ см}; \\ L_s(\text{H}_2\text{O}) &\approx 3,2 \text{ см}. \end{aligned} \quad (10.49)$$

То, что мы получили здесь для  $L_s$  с помощью простых оценок, неплохо согласуется с измеренным, табличным значением  $L_s(\text{H}_2\text{O}) = 5,4 \text{ см}$ . Понятно, почему наше значение  $L_s$  заниже-

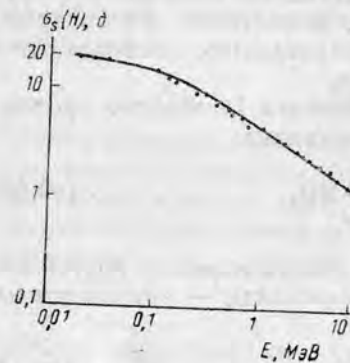


Рис. 10.6. Полное сечение упругого рассеяния нейтронов протонами



б) плотность потока нейтронов —

$$j(\mathbf{r}, t) = \int v f(\mathbf{v}, \mathbf{r}, t) d^3v. \quad (11.2)$$

Функция распределения подчиняется уравнению Больцмана — основному уравнению кинетической теории газов и других подобных им систем:

$$\frac{\partial f(\mathbf{v}, \mathbf{r}, t)}{\partial t} = -\mathbf{v} \frac{\partial f}{\partial \mathbf{r}} - \frac{\mathbf{F}}{m} \frac{\partial f}{\partial \mathbf{v}} + I. \quad (11.3)$$

Первое слагаемое в правой части соответствует изменению числа нейтронов в окрестности точки фазового пространства  $(\mathbf{v}, \mathbf{r})$  за счет пространственной неоднородности функции распределения. Фигурирующий в следующем слагаемом вектор  $\mathbf{F}$  представляет внешнее силовое поле, действующее на частицы рассматриваемого «газа». Последнее слагаемое носит название интеграла столкновений. Это, по сути, разность двух интегралов, которую мы запишем в условной, символической форме:

$$I = \int_{\mathbf{v}' \rightarrow \mathbf{v}} (\text{приток}) - \int_{\mathbf{v} \rightarrow \mathbf{v}'} (\text{убыль}). \quad (11.4)$$

Первый из интегралов учитывает все столкновения нейтрона с ядрами вещества, из которых он выходит со скоростью  $\mathbf{v}$ ; второй, наоборот, представляет собой интеграл по всем возможным значениям конечной скорости  $\mathbf{v}'$  при начальной скорости нейтрона  $\mathbf{v}$ . Наша задача состоит в том, чтобы выразить коэффициент диффузии нейтронов через параметры одиночного столкновения нейтрона с ядрами вещества.

Для этого примем следующие упрощения:

а) рассмотрим случай стационарного распределения нейтронов

$$\frac{\partial f}{\partial t} = 0; \quad (11.5)$$

б) исключим действие всех внешних сил;

б) будем считать, что кинетическая энергия нейтрона в результате его столкновения с ядром не меняется, т. е. меняется только направление, но не абсолютная величина скорости нейтрона  $\mathbf{v}$ ;

г) рассмотрим диффузию в одном направлении (пусть это будет ось  $x$ ).

При этих упрощениях уравнение Больцмана примет вид

$$v_x \frac{\partial f}{\partial x} = I; \quad f = f(v, \alpha, x), \quad (11.6)$$

где функция распределения зависит теперь только от кинетической энергии нейтрона  $E = mv^2/2$ , угла  $\alpha$  между вектором скорости  $\mathbf{v}$  и осью  $x$  (осевая симметрия задачи) и координаты  $x$ .

Вычислим теперь первое и второе слагаемые в интеграле столкновений (11.4). При сделанных упрощениях интегрирование по  $\mathbf{v}'$  сводится к интегрированию лишь по направлениям вектора  $\mathbf{v}'$  относительно вектора  $\mathbf{v}$ . Пусть  $\vartheta$  — угол между этими двумя направлениями, т. е. угол рассеяния нейтрона в элементарном акте его столкновения с ядром, а  $\frac{d\sigma(v, \vartheta)}{d\Omega}$  — дифференциальное сечение рассеяния. Тогда приток нейтронов в окрестность точки фазового пространства  $(\mathbf{v}, \mathbf{r})$  и их убыль рассчитываются по формулам

$$\int_{\mathbf{v}' \rightarrow \mathbf{v}} (\text{приток}) = vN \int \frac{d\sigma(v, \vartheta)}{d\Omega} f(v, \alpha', x) d\Omega; \quad (11.7)$$

$$\int_{\mathbf{v} \rightarrow \mathbf{v}'} (\text{убыль}) = vN \int \frac{d\sigma(v, \vartheta)}{d\Omega} f(v, \alpha, x) d\Omega, \quad (11.8)$$

где  $N$  — плотность числа атомов в среде. В результате уравнение Больцмана принимает вид

$$v_x \frac{\partial f(v, \alpha, x)}{\partial x} = vN \int \frac{d\sigma(v, \vartheta)}{d\Omega} [f(v, \alpha', x) - f(v, \alpha, x)] d\Omega. \quad (11.9)$$

Это интегродифференциальное уравнение будем решать методом Лапласа, т. е. в приближении, когда  $f(v, \alpha, x)$  — слабо анизотропная функция. Это означает, что в разложении функции распределения как функции угла  $\alpha$  по полному набору полиномов Лежандра

$$f(v, \alpha, x) = \sum_{n=0}^{\infty} a_n P_n(\cos \alpha) \quad (11.10)$$

можно ограничиться первым и нулевым членами:

$$\begin{aligned} f(v, \alpha, x) &\approx f_0(v, x) + v \cos \alpha \cdot f_1(v, x) = \\ &= f_0(v, x) + v_x f_1(v, x). \end{aligned} \quad (11.11)$$

В «нулевом приближении», когда  $f = f_0(v, x)$ , уравнение (11.9) принимает совсем простой вид

$$\frac{\partial f_0}{\partial x} = 0, \quad (11.12)$$

диффузии нет, распределение нейтронов пространственно однородно:

$$n(\mathbf{r}) = \text{const}; \quad f_0 = f_0(v). \quad (11.13)$$

Частным случаем такого распределения является максвелловское распределение нейтронов по скоростям в однородно нагретой пространственно однородной среде:

$$f_0(v) = n_0 \left( \frac{m}{2\pi kT} \right)^{3/2} e^{-\frac{mv^2}{2kT}}. \quad (11.14)$$

Вернемся к уравнению Больцмана (11.4). Физический смысл приближения (11.11), лежащего в основе решения этого уравнения методом Лапласа, состоит в том, что упорядоченное поступательное (вдоль оси  $x$ ) движение потока нейтронов, описываемое членом  $v_x f_1(v, x)$ , накладывается как слабый «фон» на их беспорядочное тепловое движение. Другими словами, предполагается, что средняя скорость всего потока (вдоль оси  $x$ ) много меньше средней скорости теплового движения отдельных нейтронов:

$$|\bar{v}_x| \ll v_{\text{тепл}}. \quad (11.15)$$

Поэтому, подставив приближенное выражение  $f = f_0 + v_x f_1$  в (11.9):

$$v_x \frac{\partial}{\partial x} [f_0 + v_x f_1(v, x)] = vN \int \frac{d\sigma(v, \vartheta)}{d\Omega} [v'_x - v_x] f_1(v, x) d\Omega, \quad (11.16)$$

мы опустим слагаемое, квадратичное по  $v_x$ . Окончательно получаем

$$\cos \alpha \frac{\partial f_0(v, x)}{\partial x} = vN f_1(v, x) \int \frac{d\sigma(v, \vartheta)}{d\Omega} [\cos \alpha' - \cos \alpha] d\Omega. \quad (11.17)$$

Выразим угол  $\alpha'$  через угол  $\alpha$ , полярный угол рассеяния  $\vartheta$ , а также азимутальный угол  $\varphi$ :

$$\cos \alpha' = \cos \alpha \cos \vartheta + \sin \alpha \sin \vartheta \cos \varphi. \quad (11.18)$$

Подставив это выражение в (11.17) и проинтегрировав по азимутальному углу  $\varphi$ , получаем

$$\frac{\partial f_0(v, x)}{\partial x} = -vN f_1(v, x) \int (1 - \cos \vartheta) \frac{d\sigma(v, \vartheta)}{d\Omega} d\Omega. \quad (11.19)$$

В правой части стоит транспортное сечение рассеяния нейтронов атомами среды (см. (10.43)):

$$\sigma_{tr}(v) = \int (1 - \cos \vartheta) \frac{d\sigma(v, \vartheta)}{d\Omega} d\Omega. \quad (11.20)$$

Из (11.19) видно, что степень угловой анизотропии распределения нейтронов по скоростям напрямую связана с тем, насколько пространственно неоднородна (здесь — вдоль направления  $x$ ) основная компонента функции распределения  $f_0(v, x)$ :

$$f_1(v, x) = -\frac{1}{\sigma_{tr}(v)Nv} \frac{\partial f_0(v, x)}{\partial x}. \quad (11.21)$$

Теперь вычислим согласно процедуре (11.2) средний поток нейтронов  $j(x)$ ; в нашем случае он, естественно, направлен вдоль оси  $x$ :

$$\begin{aligned} j_x(x) &= \int v_x [f_0(v, x) + v_x f_1(v, x)] d^3v = \\ &= \int v_x^2 f_1(v, x) d^3v = \frac{1}{3} \int v^2 f_1(v, x) d^3v = \\ &= -\frac{1}{3} \int \frac{1}{\sigma_{tr}(v)N} v \frac{\partial f_0(v, x)}{\partial x} d^3v. \end{aligned} \quad (11.22)$$

Вместо транспортного сечения сюда можно подставить транспортную длину  $\lambda_{tr} = 1/\sigma_{tr}N$ :

$$j_x(x) = -\frac{1}{3} \int \lambda_{tr} v \frac{\partial f_0(v, x)}{\partial x} d^3v. \quad (11.23)$$

Наконец, если принять, что функция  $f_0(v, x)$  факторизуется (т. е. разбивается на два независимых множителя, один из которых есть средняя плотность нейтронов, а второй — функция их распределения по скоростям):

$$f_0(v, x) = n(x) \omega(v), \quad (11.24)$$

то средний поток нейтронов дается выражением

$$j_x(x) = -\frac{1}{3} \overline{v \lambda_{tr}} \frac{\partial n(x)}{\partial x}. \quad (11.25)$$

Мы вывели формулу (11.25) в частном случае, когда диффузия нейтронов идет в одном направлении. Ее обобщение на общий случай очевидно:

$$\mathbf{j}(\mathbf{r}) = -\frac{1}{3} \overline{v \lambda_{tr}} \text{grad } n(\mathbf{r}). \quad (11.26)$$

В двух последних выражениях  $\overline{v \lambda_{tr}}$  — это среднее относительно распределения нейтронов по скоростям:

$$\overline{v \lambda_{tr}} = \frac{\int v \lambda_{tr}(v) \omega(v) d^3v}{\int \omega(v) d^3v}. \quad (11.27)$$

Формулу (11.26) записывают обычно в виде

$$\mathbf{j}(\mathbf{r}) = -D \text{grad } n(\mathbf{r}), \quad (11.28)$$

где коэффициент  $D$  называют коэффициентом диффузии. Итак, мы получили для него следующее выражение:

$$D = \frac{1}{3} \overline{v \lambda_{tr}}. \quad (11.29)$$

Пусть  $n(\mathbf{r}, t)$  — пространственная плотность нейтронов. Ее изменение со временем и от точки к точке регулируется уравнением баланса

$$\frac{\partial n(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = -\operatorname{div} \mathbf{j}(\mathbf{r}, t) + q(\mathbf{r}, t) - N\sigma_{\text{погл}} v n, \quad (11.30)$$

где  $\mathbf{j}(\mathbf{r}, t)$  — плотность диффузионного потока. Два последних слагаемых описывают приток нейтронов за счет распределенных источников и убыль нейтронов — за счет ядерных реакций их поглощения. Соответственно  $q(\mathbf{r}, t)$  — это мощность источников, а  $\sigma_{\text{погл}}$  — полное сечение поглощения нейтронов ядрами вещества. Подставляя сюда  $\mathbf{j}(\mathbf{r}, t)$  из (11.28), получим уравнение в частных производных для пространственной плотности  $n(\mathbf{r}, t)$ :

$$\frac{\partial n}{\partial t} = D\nabla^2 n + q - N\sigma_{\text{погл}} v n. \quad (11.31)$$

Входящая сюда комбинация параметров  $N\sigma_{\text{погл}} v$  имеет размерность обратного времени. Введем новый параметр:

$$T = \frac{1}{N\sigma_{\text{погл}} v}. \quad (11.32)$$

Комбинация  $\frac{1}{N\sigma_{\text{погл}}}$  есть средняя длина свободного пробега

нейтрона относительно поглощения (захвата) ядром: таким образом,  $T$  — это среднее время жизни нейтрона по отношению к процессу поглощения. Физический смысл параметра  $T$  станет еще яснее, если рассмотреть уравнение баланса (11.31) в особых условиях, когда  $D \rightarrow 0$  (предельно медленная диффузия), а источник тепловых нейтронов «включен» лишь на очень короткое время. Тогда по прошествии этого времени уравнение баланса приобретает вид

$$\frac{\partial n(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = -\frac{1}{T} n(\mathbf{r}, t), \quad (11.33)$$

а его решение есть

$$n(\mathbf{r}, t) = n(\mathbf{r}, 0)e^{-t/T}. \quad (11.34)$$

Отсюда, действительно, хорошо видно, что  $T$  — это среднее время жизни нейтрона по отношению к поглощению ядрами вещества. Назовем  $T$  *временем диффузии*.

В новых обозначениях уравнение баланса принимает окончательный вид

$$\frac{\partial n(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = D\nabla^2 n(\mathbf{r}, t) + q(\mathbf{r}, t) - \frac{1}{T} n(\mathbf{r}, t). \quad (11.35)$$

Будем называть его *уравнением диффузии*.

**А. Стационарный точечный источник  
в бесконечной среде**

Пусть в окрестности точки  $r=0$  находится источник тепловых нейтронов в постоянной мощности, размеры которого можно считать пренебрежимо малыми. Тогда везде, кроме  $r=0$ , имеем

$$D\Delta n - \frac{n}{T} = 0. \quad (11.36)$$

Решение этого уравнения в частных производных хорошо известно:

$$n(r) = \text{const} \frac{e^{-r/L}}{r} \quad (11.37)$$

(его можно проверить подстановкой). Здесь мы ввели новое обозначение

$$L = \sqrt{DT}; \quad (11.38)$$

это *длина диффузии*. Параметр  $L$  показывает, как далеко от источника в среднем уходят нейтроны в процессе диффузии. Вычислим, пользуясь решением (11.37), средний квадрат удаления нейтрона от источника:

$$\langle r^2 \rangle = \frac{\int r^2 n(r) d^3 r}{\int n(r) d^3 r} = 6L^2. \quad (11.39)$$

Таким образом, среднеквадратичное значение удаления нейтрона от источника есть

$$r_{\text{ср.кв}} = \sqrt{6} L. \quad (11.40)$$

Теперь можно уточнить постановку рассматриваемой задачи: источник можно считать точечным, если его размеры много меньше диффузионной длины  $L$ .

В табл. 11.1 собраны значения параметров диффузии тепловых нейтронов для ряда сред. Сопоставляя их с параметрами замедления нейтронов в тех же средах (см. табл. 10.1), мы видим, что по совокупности тех и других параметров тяжелая вода оказывается наилучшим замедлителем.

**Б. Граничные условия при выходе нейтронов  
из среды в вакуум**

Это очень важная задача теории взаимодействия нейтронов с веществом, и мы приведем здесь без вывода результат ее приближенного решения.



Рис. 11.1. Граничные условия при выходе нейтронов из среды в вакуум

Параметры диффузии тепловых нейтронов в воде, тяжелой воде и графите

Вещество	Время диффузии $T$ , с	Длина диффузии $L$ , см
H <sub>2</sub> O	$2 \cdot 10^{-4}$	2,7
D <sub>2</sub> O	0,15	120
Графит	$1,2 \cdot 10^{-2}$	54

Пусть поток тепловых нейтронов выходит из области, занятой веществом, в вакуум (рис. 11.1). Граничные условия на поверхности раздела  $\Sigma$  должны отражать то обстоятельство, что справа от поверхности векторы скорости всех нейтронов  $v$  направлены в сторону от нее, тогда как слева, благодаря столкновениям с ядрами вещества в пограничном слое, часть нейтронов может двигаться и в обратном направлении, внутрь области, где происходит диффузия. Толщина слоя, в котором имеет место такой особый режим диффузии, порядка транспортной длины  $\lambda_{tr}$ . Оказывается, что для многих практических целей при решении задачи диффузии нейтронов в ограниченном объеме вполне годится следующий прием: плотность нейтронов полагается равной нулю на специально вводимой воображаемой поверхности  $\Sigma'$ , которая отодвинута от границы раздела  $\Sigma$  во внешнюю область на некоторое расстояние  $\Delta$  — длину экстраполяции:

$$n|_{\Sigma'} = 0. \quad (11.41)$$

Это расстояние порядка транспортной длины  $\lambda_{tr}$ . Численные расчеты дают хорошие результаты, если  $\Delta$  выбирается согласно формуле

$$\Delta = 0,7\lambda_{tr}. \quad (11.42)$$

### В. Диффузия тепловых нейтронов от точечного импульсного источника

Пусть источник включается в течение очень короткого промежутка времени  $\Delta t \ll T$ ; требуется найти распределение плотности нейтронов в объеме заданной конфигурации при  $t > \Delta t$ . Это типичная краевая задача математической физики. Рассмотрим ее решение в специальном случае, когда точечный импульсный источник находится в центре однородного шара, а распределение нейтронов из источника изотропно. При такой постановке наша задача

строго сферически симметрична и плотность нейтронов  $n(r, t)$  в каждый момент времени зависит лишь от расстояния до источника:  $n(r, t) \rightarrow n(r, t)$ . Поставленная задача сводится к решению уравнения в частных производных для функции двух переменных с соответствующим дополнительным, граничным условием

$$\begin{cases} \frac{\partial n(r, t)}{\partial t} = D \Delta n - \frac{n}{T}; \\ n(r = R, t) = 0; \end{cases} \quad (11.43)$$

здесь  $R$  — радиус шара с учетом длины экстраполяции  $\Delta$ .

Воспользуемся методом разделения переменных и будем искать решение уравнения в виде

$$n(r, t) = S(r)e^{-t/T}g(t), \quad (11.44)$$

выделив для удобства временной экспоненциальный фактор  $e^{-t/T}$ , соответствующий режиму предельно медленной диффузии (см. (11.34)). Теперь (11.43) переходит в уравнение

$$S(r) \frac{dg(t)}{dt} = D \Delta S(r)g(t), \quad (11.45)$$

для решения которого вводим параметр разделения переменных

$$\frac{1}{Dg(t)} \frac{dg(t)}{dt} = \frac{\Delta S}{S} = -\Omega = \text{const}. \quad (11.46)$$

Радиальная функция  $S(r)$  находится из задачи на собственные значения:

$$\begin{cases} \Delta S + \Omega S = 0, \\ S(r = R) = 0, \end{cases} \quad (11.47)$$

а именно

$$S_\nu(r) = A_\nu \frac{\sin \sqrt{\Omega_\nu} r}{r}, \quad (11.48)$$

где

$$\sqrt{\Omega_\nu} = \nu \frac{\pi}{R}; \quad \nu = 1, 2, \dots; \quad (11.49)$$

при этом

$$g_\nu(t) = e^{-\Omega_\nu t}. \quad (11.50)$$

Итак, плотность нейтронов  $n(r, t)$  представляет собой суперпозицию пространственно-временных, сферически симметричных гармоник:

$$n(r, t) = \sum_{\nu=1}^{\infty} A_{\nu} \frac{\sin \frac{\pi \nu}{R} r}{r} e^{-\left[ \nu^2 \frac{\pi^2 D}{R^2} + \frac{1}{T} \right] t} =$$

$$= \sum_{\nu=1}^{\infty} A_{\nu} \frac{\sin \frac{\pi \nu}{R} r}{r} e^{-\left[ \nu^2 \pi^2 \left( \frac{L}{R} \right)^2 + 1 \right] \frac{t}{T}}; \quad (11.51)$$

константы  $A_1, A_2, \dots$  определяются формой и мощностью начального импульса нейтронов. Высшие гармоники затухают быстрее основной гармоники — за время порядка  $T(R/L)^2 = R^2/D$ ; после этого временная картина диффузии становится экспоненциальной:

$$n(r, t) \Big|_{t \gg R^2/D} \sim \frac{\sin \frac{\pi r}{R}}{r} e^{-\left[ \pi^2 \left( \frac{L}{R} \right)^2 + 1 \right] \frac{t}{T}}. \quad (11.52)$$

## Лекция 12

### § 12.1. ДИФРАКЦИЯ НЕЙТРОНОВ НА КРИСТАЛЛЕ

При малых энергиях нейтронов, когда их дебройлевская длина волны оказывается сопоставимой с расстоянием между атомами среды, рассеянные волны, обусловленные взаимодействием нейтрона с ядрами разных атомов, интерферируют между собой — возникает явление дифракции. Природу дифракции нейтронов и ее основные черты рассмотрим сначала на примере кристалла с идеальной решеткой, считая ее неподвижной, а все ядра атомов одинаковыми.

Пусть  $v(r)$  — потенциальная энергия взаимодействия нейтрона с ядром атома. Рассматривая совокупность  $N$  таких ядер, закрепленных в точках  $\mathbf{b}_1, \mathbf{b}_2, \dots, \mathbf{b}_N$ , запишем потенциальную энергию взаимодействия нейтрона со всей этой совокупностью в виде суммы операторов парного взаимодействия:

$$\hat{V}_N = \sum_{j=1}^N v(\mathbf{r} - \mathbf{b}_j), \quad (12.1)$$

где  $\mathbf{r}$  — координаты нейтрона в той же системе отсчета, в которой заданы векторы  $\mathbf{b}_j$ . Наша ближайшая задача — вычислить дифференциальное сечение упругого рассеяния нейтрона этой совокупностью неподвижных ядер. Начнем с теории возмущений — борновского приближения. В этом приближении амплитуда упругого рассеяния  $F_N(\mathbf{k} \rightarrow \mathbf{k}')$  есть матричный элемент первого порядка относительно  $\hat{V}_N$ , где волновые функции падающего и рассеянного нейтрона аппроксимируются плоскими волнами:

$$F_N(\mathbf{k} \rightarrow \mathbf{k}') = -\frac{m_n}{2\pi\hbar^2} \int e^{-i\mathbf{k}'\cdot\mathbf{r}} \hat{V}_N(\mathbf{b}_j, \dots, \mathbf{b}_N; \mathbf{r}) e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} d^3r =$$

$$= -\frac{m_n}{2\pi\hbar^2} \int \sum_{j=1}^N v(\mathbf{r} - \mathbf{b}_j) e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} d^3r =$$

$$= \sum_{l=1}^N \left[ -\frac{m_a}{2\pi\hbar^2} \int v(\mathbf{r} - \mathbf{b}_l) e^{i\mathbf{q}(\mathbf{r} - \mathbf{b}_l)} d^3r \right] e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{b}_l}. \quad (12.2)$$

Выражение в квадратных скобках не что иное, как борновские амплитуды рассеяния нейтрона отдельными ядрами:

$$f(\mathbf{k} \rightarrow \mathbf{k}') = -\frac{m_a}{2\pi\hbar^2} \int v(\mathbf{r}) e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} d^3r, \quad (12.3)$$

где направление и абсолютная величина вектора передаваемого импульса

$$\mathbf{q} = \mathbf{k} - \mathbf{k}' \quad (12.4)$$

определяются импульсами  $\mathbf{k}$  и  $\mathbf{k}'$  падающего и рассеянного нейтрона или, что то же самое, его кинетической энергией  $E$  и углом рассеяния  $\vartheta$ .

Подставим (12.3) в (12.2). Тогда, благодаря тому что все  $N$  элементарных амплитуд одинаковы, полная амплитуда рассеяния  $F_N(\mathbf{k} \rightarrow \mathbf{k}')$  и дифференциальное сечение на всей совокупности  $N$  ядер предстают перед нами в факторизованном виде:

$$F_N(\mathbf{k} \rightarrow \mathbf{k}') = f(\mathbf{k} \rightarrow \mathbf{k}') \sum_{l=1}^N e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{b}_l}; \quad (12.5)$$

$$\left( \frac{d\sigma}{d\Omega} \right)_N = |f(\mathbf{k} \rightarrow \mathbf{k}')|^2 \cdot \left| \sum_{l=1}^N e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{b}_l} \right|^2 = \left( \frac{d\sigma}{d\Omega} \right)_0 \cdot \left| \sum_{l=1}^N e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{b}_l} \right|^2, \quad (12.6)$$

где первый множитель несет информацию о взаимодействии нейтрона с отдельным ядром и не имеет никакого отношения к тому, в какой среде находится это ядро, а второй, наоборот, определяется только расположением этих  $N$  ядер. В ядерной и атомной физике вероятность процессов рассеяния принято характеризовать эффективным сечением, отнесенным к одному ядру, одному атому, одной молекуле. Найдем и в нашем случае дифференциальное сечение рассеяния нейтронов всей заданной совокупностью ядер, отнесенное к одному ядру:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{1}{N} \left( \frac{d\sigma}{d\Omega} \right)_N = \left( \frac{d\sigma}{d\Omega} \right)_0 \frac{\left| \sum_{l=1}^N e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{b}_l} \right|^2}{N}; \quad (12.7)$$

здесь

$$\left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right)_0 = |f(\mathbf{k} \rightarrow \mathbf{k}')|^2 \quad (12.8)$$

дифференциальное сечение рассеяния нейтрона одним изолированным ядром. Второй множитель в (12.7), несущий информацию о расположении  $N$  ядер в мишени, назовем *структурным фактором* (слово «структурный» указывает здесь на то, что он имеет отношение к структуре мишени).

Прежде чем проанализировать структурный фактор для нужной нам совокупности ядер, помещенных в узлы идеальной кристаллической решетки, надо оговориться по поводу борновского приближения, на котором основан вывод полученных формул. Взаимодействие нейтрона с ядром — сильное взаимодействие, и при малых энергиях нейтронов борновское приближение для описания их рассеяния ядрами совершенно не годится. Тем не менее окончательное выражение (12.7), где сечение рассеяния совокупностью ядер выражается через сечение рассеяния отдельным ядром, может быть использовано в нашей задаче. Дело в том, что выражение (12.5), из которого следует все остальное, справедливо, с небольшим уточнением, и тогда, когда борновское приближение не работает. Это так называемое *импульсное приближение*:

$$F_N(\mathbf{k} \rightarrow \mathbf{k}') = \sum_{j=1}^N f_j(\mathbf{k} \rightarrow \mathbf{k}') e^{i\mathbf{q}\mathbf{b}_j} \quad (12.9)$$

в отличие от (12.5) сюда входят не борновские, а точные амплитуды рассеяния падающей частицы на составных элементах мишени. Физический смысл импульсного приближения: амплитуда рассеяния на системе центров есть сумма всех элементарных амплитуд рассеяния на каждом из центров, «подправленных» фазовыми множителями  $e^{i\mathbf{q}\mathbf{b}_j}$ , зависящими от относительного расположения этих центров.

Анализ свойств структурного фактора проведем для случая простейшей, кубической решетки. Пусть наши  $N$  ядер образуют прямоугольный блок, где число рядов в направлениях  $x$ ,  $y$  и  $z$  есть соответственно  $N_x$ ,  $N_y$  и  $N_z$ :  $N = N_x N_y N_z$ . Координаты каждого из ядер задаются тройкой целых чисел  $j_x, j_y, j_z$ :

$$b_{j_x} = b \cdot j_x; \quad j_x = 0, 1, \dots, N_x - 1 \text{ и т. д.}, \quad (12.10)$$

где  $b$  — шаг решетки. Сумма экспонент в (12.7) факторизуется на произведение трех сумм:

$$\sum_{j=1}^N e^{i\mathbf{q}\mathbf{b}_j} = \sum_{j_x=0}^{N_x-1} e^{iq_x b j_x} \sum_{j_y=0}^{N_y-1} e^{iq_y b j_y} \sum_{j_z=0}^{N_z-1} e^{iq_z b j_z}. \quad (12.11)$$

Вычислим первую из них:

$$\sum_{j_x=0}^{N_x-1} e^{iq_x b j_x} = \frac{1 - e^{N_x i q_x b}}{1 - e^{i q_x b}} = \pm \frac{e^{\frac{i}{2} N_x q_x b} \sin \frac{1}{2} N_x (q_x b - 2\pi\tau_x)}{e^{\frac{i}{2} q_x b} \sin \frac{1}{2} (q_x b - 2\pi\tau_x)}. \quad (12.12)$$

Это соотношение есть тождество при любом целом числе  $\tau_x$ :

$$\tau_x = 0; \pm 1; \pm 2, \dots \quad (12.13)$$

Подобно формуле (12.11), структурный фактор в (12.7) также факторизуется на три множителя. Вычислим первый из них для макроскопически большого куска кристалла ( $N_x \rightarrow \infty$ ):

$$\lim_{N_x \rightarrow \infty} \frac{1}{N_x} \left| \sum_{j_x} e^{iq_x b \cdot j_x} \right|^2 = \lim_{N_x \rightarrow \infty} \frac{1}{N_x} \left| \frac{\sin \frac{1}{2} N_x b \left( q_x - \frac{2\pi}{b} \tau_x \right)}{\sin \frac{1}{2} b \left( q_x - \frac{2\pi}{b} \tau_x \right)} \right|^2 = \frac{2\pi}{b} \delta \left( q_x - \frac{2\pi}{b} \tau_x \right). \quad (12.14)$$

Отсюда для всего структурного фактора в целом получаем

$$\lim_{N_x, N_y, N_z \rightarrow \infty} \frac{\left| \sum_{j=1}^N e^{i\mathbf{q}\mathbf{b}_j} \right|^2}{N} = \left( \frac{2\pi}{b} \right)^3 \delta(\mathbf{q} - \mathbf{K}). \quad (12.15)$$

Бесконечная последовательность входящих сюда векторов  $\mathbf{K}$ , которые есть *векторы обратной решетки*, строится по правилу

$$\mathbf{K} = \left\{ \frac{2\pi}{b} \tau_x, \frac{2\pi}{b} \tau_y, \frac{2\pi}{b} \tau_z \right\}, \quad (12.16)$$

где  $\tau_x, \tau_y, \tau_z$  — целые числа.

Итак, отнесенное к одному ядру вещества мишени дифференциальное сечение рассеяния нейтронов идеальной жесткой кристаллической решеткой дается выражением

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \left( \frac{d\sigma}{d\Omega} \right)_0 \left( \frac{2\pi}{b} \right)^3 \delta(\mathbf{k} - \mathbf{k}' - \mathbf{K}). \quad (12.17)$$

Отсюда видно, что рассеяние нейтронов ориентированным монокристаллическим образцом происходит лишь в отдельных направлениях, которые определяются условием

$$\mathbf{k} - \mathbf{k}' = \mathbf{K}, \quad (12.18)$$

где  $\mathbf{K}$  — один из векторов обратной решетки кристалла. Во всех других направлениях взаимная интерференция волн от рассея-

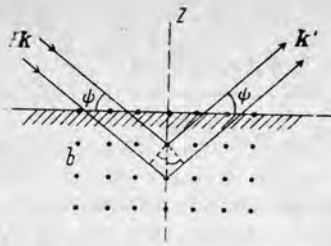


Рис. 12.1. Схема симметричного отражения нейтронов от поверхности монокристалла

$\psi$ , угол рассеяния  $\vartheta$  есть удвоенный угол скольжения:

$$\vartheta = 2\psi. \quad (12.19)$$

При такой геометрии модуль вектора передаваемого импульса  $q = k - k'$  равен

$$|k - k'| = 2k \sin \frac{\vartheta}{2} = 2k \sin \psi, \quad (12.20)$$

а сам он направлен по нормали к поверхности кристалла. Тем самым при рассеянии нейтронов «отбираются» векторы обратной решетки  $K$ , ориентированные вдоль оси  $z$ . Выражая модуль импульса (волнового вектора) нейтрона  $k$  через его дебройлевскую длину волны

$$k = \frac{2\pi}{\lambda} \quad (12.21)$$

и принимая во внимание, что случаю отражения отвечают только целые числа  $n$  одного знака, мы получаем из (12.18) традиционную формулировку закона Вульфа — Брэггов:

$$n\lambda = 2b \sin \psi; \quad n = 1, 2, \dots \quad (12.22)$$

Из рис. 12.1 хорошо видно, что в правой части равенства (12.22) стоит не что иное, как разность хода между двумя соседними «лучами» нейтронной волны. Интерференция этих лучей оказывается конструктивной (рассеяние — когерентным), когда на этой разности хода укладывается целое число длин волн нейтрона. Это и выражается условием (12.22).

### § 12.2. КОГЕРЕНТНОЕ И НЕКОГЕРЕНТНОЕ РАССЕЯНИЕ НЕЙТРОНОВ

В предыдущем параграфе мы исходили из предположения, что все ядра кристаллической решетки совершенно одинаковы и, следовательно, совершенно одинаковы взаимодействия нейтрона с

этим ядрами. В действительности такая строгая однородность кристалла нарушается целым рядом факторов, и это вносит в рассеяние нейтронов элемент некогерентности.

Мы рассмотрим сначала этот вопрос формально, не вдаваясь в обсуждение физической природы неоднородностей кристалла. Пусть по тем или иным причинам амплитуды рассеяния нейтрона разными ядрами мишени как-то отличаются друг от друга. Запишем это в терминах исходной формулы (12.9):

$$f_j(k \rightarrow k') \neq f_{j'}(k \rightarrow k'); \quad j \neq j'. \quad (12.23)$$

Очень важно предположить, что между отклонениями двух амплитуд от среднего по всему кристаллу нет никакой корреляции. Определим это среднее значение обычным образом и введем в рассмотрение отклонение каждой амплитуды от среднего:

$$\bar{f}(k \rightarrow k') = \frac{1}{N} \sum_{j=1}^N f_j(k \rightarrow k'), \quad (12.24)$$

$$\Delta f_j(k \rightarrow k') = f_j(k \rightarrow k') - \bar{f}(k \rightarrow k').$$

Очевидно, что при этом

$$\sum_j \Delta f_j = 0. \quad (12.25)$$

Теперь, как и в (12.7), вычислим дифференциальное сечение рассеяния, отнесенное к одному ядру, т. е. усредненное по всему образцу:

$$\begin{aligned} \frac{d\sigma}{d\Omega} &= \frac{1}{N} \left| \sum_j \bar{f}_j e^{iq \cdot b_j} \right|^2 = |\bar{f}(k \rightarrow k')|^2 \frac{1}{N} \left| \sum_j e^{iq \cdot b_j} \right|^2 + \\ &+ \frac{1}{N} \sum_{j, j'=1}^N \Delta f_j \Delta f_{j'} e^{iq \cdot (b_j - b_{j'})}. \end{aligned} \quad (12.26)$$

В первом слагаемом мы видим уже известный нам структурный фактор сечения когерентного рассеяния. Во втором слагаемом, учитывая хаотичность отклонений  $\Delta f_j$  от нуля, мы оставим только «диагональные» члены суммы с  $j = j'$ . Таким образом, при наличии равномерно распределенных неоднородностей в кристалле когерентное рассеяние, сохраняя присущую дифракционным явлениям избирательность относительно направления вылета нейтрона и ориентации мишени, ослабляется по сравнению со случаем идеального, однородного кристалла и выступает теперь на фоне некогерентного рассеяния, плавно меняющегося с углом:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \left( \frac{d\sigma}{d\Omega} \right)_{\text{ког}} + \left( \frac{d\sigma}{d\Omega} \right)_{\text{неког}}; \quad (12.27)$$

$$\left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right)_{\text{кор}} = |\bar{f}(k \rightarrow k')|^2 \left(\frac{2\pi}{b}\right)^3 \delta(k - k' - K); \quad (12.28)$$

$$\left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right)_{\text{некор}} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N |\Delta f(k \rightarrow k')|^2. \quad (12.29)$$

Что в действительности создает некогерентность при дифракции нейтронов на кристалле? Прежде всего примеси и механические повреждения решетки. Однако даже в кристалле определенного химического элемента возможно возникновение некогерентности за счет его изотопной неоднородности, так как нейтронные сечения для разных изотопов одного и того же элемента, вообще говоря, никак не связаны между собой. Далее, если ядра мишени обладают спином, взаимодействие с ними нейтронов обнаруживает зависимость от взаимной ориентации спинов нейтрона и ядра. Наконец, некогерентность создается хаотическими тепловыми колебаниями ядер решетки.

### § 12.3. ВЛИЯНИЕ ТЕПЛОВЫХ КОЛЕБАНИЙ РЕШЕТКИ; ЯВЛЕНИЕ НЕУПРУГОЙ ДИФРАКЦИИ

Здесь удобно повторить рассуждения, приведенные в ходе рассмотрения эффекта Мёссбауэра (см. § 7.2). В результате взаимодействия ядра решетки с внешним возмущением (там — при поглощении или испускании  $\gamma$ -кванта, здесь — при рассеянии нейтрона) кристаллу передается некоторый импульс. В какой-то доле случаев он воспринимается всей решеткой. Лишь тогда возникают условия для резонансного поглощения  $\gamma$ -квантов (эффекта Мёссбауэра). С другой стороны, лишь тогда возможно упругое рассеяние нейтронов кристаллом без передачи ему энергии. В § 7.2. долю случаев, приходящуюся на испускание или поглощение  $\gamma$ -кванта «без отдачи», мы назвали фактором ослабления. В модели Дебая это — фактор Дебая—Уоллера (7.39). Точно такой же фактор определяет долю рассеяния нейтронов «без отдачи» в их упругом (с точки зрения элементарного акта  $n+A \rightarrow n+A$ ) рассеянии на кристалле:

$$f_{D-W} = \exp \left\{ -\frac{3}{2} \frac{R}{\hbar \omega_D} \left[ 1 + 4 \left( \frac{T}{T_D} \right)^2 \int_0^{T_D/T} \frac{udu}{e^u - 1} du \right] \right\}. \quad (12.30)$$

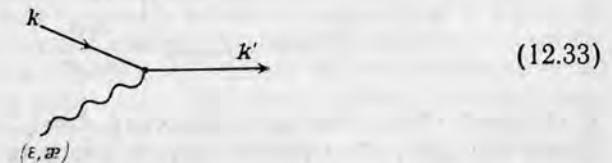
Отличие от формулы (7.39) лишь в том, что здесь  $R$  — это энергия отдачи, которую получило бы свободное ядро при рассеянии нейтрона на заданный угол:

$$R = \frac{\hbar^2 |k - k'|^2}{2M}. \quad (12.31)$$

Фактор Дебая—Уоллера определяет и долю других событий — когда с точки зрения элементарного акта  $n+A \rightarrow n+A$  нейтрон рассеивается упруго (т. е. без возбуждения или расщепления ядра), но часть его энергии идет на возбуждение колебаний ядер в решетке; суммарная доля всех таких событий есть  $1 - f_{D-W}$ . Согласно модели Дебая, спектр колебаний ядер в твердом теле имеет универсальную форму (7.18) и одно твердое тело отличается от другого в этом отношении лишь значением дебаевской частоты  $\omega_D$ , или, что то же самое, дебаевской температуры  $T_D$ . В действительности спектры колебаний решетки в разных веществах очень индивидуальны. Дифракция нейтронов с возбуждением характерных для каждой решетки квантов ее колебаний — фононов — как раз и является мощным методом исследования твердого тела. Такие процессы неупругой дифракции удобно изображать графически:



Здесь волнистая линия соответствует фонону, который несет энергию  $\epsilon$  и импульс  $x$ . Возможен и обратный процесс, когда при рассеянии нейтрона фонон не рождается, а, наоборот, поглощается, т. е. энергия передается от кристалла к падающему на него нейтрону:



Неупругая дифракция такого типа особенно важна и интересна при использовании холодных и ультрахолодных нейтронов для спектроскопических исследований твердого тела.

### § 12.4. РАССЕЯНИЕ НЕЙТРОНОВ ПОЛИКРИСТАЛЛАМИ

Поликристаллическую мишень химически чистого вещества можно представить себе как тесную упаковку очень большого числа небольших монокристалликов, беспорядочно ориентированных в пространстве (рис. 12.2). Рассеяние каждым

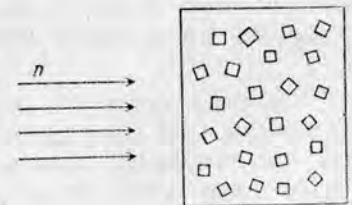


Рис. 12.2. Рассеяние нейтронов поликристаллической мишенью



из таких кристалликов падающего потока нейтронов происходит согласно картине, которую мы разобрали в § 12.1. А именно рассеяние возможно, только если импульс, которым обменивается нейтрон с кристалликом, совпадает с одним из векторов обратной решетки этого кристаллика. Поскольку каждому из кристалликов соответствует бесчисленное множество таких векторов, самих кристалликов в образце очень много, а повернуты они по отношению к пучку нейтронов беспорядочным образом, то брегговские пики, соответствующие дифракции нейтронов на отдельных кристалликах, сливаются в сплошную, лишенную резких выбросов картину углового распределения рассеянных нейтронов.

Исключение составляют лишь нейтроны, длина волны которых больше, чем удвоенный шаг решетки:

$$\lambda > 2b. \quad (12.34)$$

В этом случае передаваемый решетке импульс

$$|\mathbf{k} - \mathbf{k}'| < \frac{2\pi}{b} \quad (12.35)$$

ограничен настолько, что условие дифракции (12.18) не выполняются ни для одного из векторов обратной решетки. Дифракция таких нейтронов невозможна ни при какой ориентации монокристаллика внутри образца, а следовательно, невозможна и на всей поликристаллической мишени.

Таким образом, поликристаллический образец может служить фильтром, не пропускающим всю коротковолновую часть спектра падающих нейтронов с  $\lambda < 2b$ . Проходят сквозь такой фильтр, не рассеиваясь в стороны, лишь нейтроны с энергией

$$E < E_{\text{порог}} = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2m_n b^2}. \quad (12.36)$$

Подставив сюда типичные значения  $b = (2 \div 3) \cdot 10^{-8}$  см, получим  $E_{\text{порог}} \approx 10^{-2}$  эВ, что соответствует области тепловых нейтронов.

## РАЗДЕЛ IV МЕЗОАТОМНЫЕ И МЕЗОМОЛЕКУЛЯРНЫЕ ПРОЦЕССЫ

### Лекция 13

#### § 13.1. МЕЗОАТОМЫ И ИХ СВОЙСТВА

В данном разделе мы вернемся к процессам взаимодействия с веществом заряженных частиц и, в дополнение к лекциям 1—6, рассмотрим особый класс таких процессов, связанных с образованием мезоатомов и мезомолекул и их взаимодействием с веществом. Сами названия *мезоатом* и *мезомолекула* условны и используются сегодня не только для обозначения атомов и молекул, в состав которых входит в качестве орбитальной частицы отрицательно заряженный мезон в строгом смысле этого слова. Они распространяются на любые «экзотические» атомные системы, в состав которых могут входить мезон  $\pi^-$  или  $K^-$ , мюон  $\mu^-$ , антипротон  $\bar{p}$  или гиперон  $\Sigma^-$  (данные о параметрах самих этих элементарных частиц см. в табл. А.2, А.3).

Самая простая из таких систем — мюонный атом водорода  $H_\mu$ . Это, по существу, точная копия атома водорода. Нестабильность мюона практически никак не сказывается на свойствах атома  $H_\mu$ , поскольку среднее время жизни мюона на много порядков превышает характерные времена основных процессов в мюонном атоме — период обращения мюона по атомной орбите или время на жизни возбужденных состояний атома  $H_\mu$  относительно спонтанных радиационных переходов. Подобно другим мезоатомам, мюонный атом  $H_\mu$  образуется в результате атомного захвата мюона  $\mu^-$  на высокую атомную орбиту, откуда начинается каскад его электромагнитных переходов в основное состояние мюонного атома — на  $K$ -орбиту. Здесь он живет очень долго (в масштабе характерных для мезоатомных процессов времен) и в конце концов либо распадается ( $\mu^- \rightarrow e^- + \nu_\mu + \bar{\nu}_e$ ), либо поглощается ядром ( $p + \mu^- \rightarrow n + \nu_\mu$ ) — это так называемый  $\mu$ -захват. Оба последних процесса, конкурирующих между собой, обусловлены слабым взаимодействием.

Мюон в 207 раз тяжелее электрона, и поэтому (см. (В.6)) орбиты атома  $H_\mu$  «сжаты» в такое же число раз по сравнению с электронными орбитами в атоме водорода. Наоборот, вся схема уровней атома  $H_\mu$  «растянута» в 207 раз по сравнению с водородной: потенциал ионизации мюонного атома  $H_\mu$  в основном состоянии не 13,5 эВ, а 2,7 кэВ;  $K_\alpha$ -линия в спектре электромагнитного излучения — не 10 эВ, а около 2 кэВ, т. е. оказывается в рентге-

новской области, и т. д. Изучение спектров характеристического рентгеновского излучения — это основной способ проследить за каскадом электромагнитных переходов в мезоатоме, и определить положение его энергетических уровней, установить смещение этих энергетических уровней, обусловленное искажением чисто кулоновского взаимодействия мюона с ядром на малых расстояниях. В средних и тяжелых атомах главный вклад в этот эффект дает неточность ядра атома. Оценим, например, размеры  $K$ -орбиты мюонного атома урана ( $\mu^-_{92}U$ ):  $\langle r_{\mu} \rangle = \frac{a_0}{Z} \frac{1}{m/m_e} \approx 2,5 \cdot 10^{-13}$  см. Это

меньше, чем размеры самого ядра урана:  $R = r_0 A^{1/3} \approx 7 \cdot 10^{-13}$  см. Таким образом, значительную часть времени мюон проводит внутри ядра, где его электростатическое взаимодействие с зарядом ядра ослаблено по сравнению с тем, каким оно было в случае точечного заряда (см. рис. В.3), а значит, энергия связи низших уровней мюонного атома (в особенности  $ns$ -уровней) меньше, чем это дает простой боровский закон:

$$E_n = - \left( \frac{m}{m_e} \right) \frac{Z^2 \epsilon_0}{2n^2}. \quad (13.1)$$

Так, в мюонном атоме ( $\mu^-_{92}U$ ) энергия перехода  $2p \rightarrow 1s$ , которая по этой формуле должна составлять более 18 МэВ, в действительности равна 6,3 МэВ (рис. 13.1).

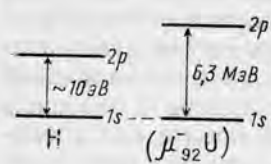


Рис. 13.1. Сравнение положения  $2p$ -уровня электрона в атоме водорода и мюона в мезоатоме ( $\mu^-_{92}U$ )

Неточность ядра — не единственный эффект, который надо учитывать в точных расчетах энергетических спектров мюонных атомов. В тяжелых мезоатомах сильны релятивистские эффекты; это значит, что в расчетах надо пользоваться не уравнением Шредингера, а уравнением Дирака. Очень сильно по сравнению с обычными атомами возрастают радиационные поправки. Близость мюона к ядру в тяжелых мюонных атомах создает благоприятные условия для поляризации электромагнит-

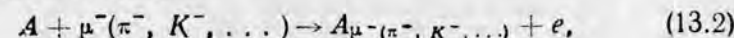
ным полем мюона самого ядра; обратное воздействие этого поляризационного эффекта на волновые функции и положение энергетических уровней мюона в мезоатоме очень существенны. В ядерной физике большое внимание уделяется различным эффектам, которые обусловлены взаимодействием между внутриядерными и мюонными степенями свободы мезоатома. Один из них — *безрадиационный переход* мюона с орбиты на орбиту — возникает, когда расстояние между уровнями мезоатома оказывается близким к энергии возбуждения какого-либо коллективного уровня ядра; в случае такого «резонанса» каскад радиационных переходов мюона может прерваться, а не растратенная при этом энергия орбитального движения мюона перейти к ядру.

Еще более сложные процессы, связанные с ядром, происходят в адронных атомах, т. е. в пионных, каонных, антипротонных и  $\Sigma^-$ -атомах. Совершая каскад электромагнитных переходов в мезоатоме, отрицательно заряженный адрон сначала движется далеко от ядра и на этом этапе ведет себя в принципе так же, как мюон. Достигнув орбиты, где его волновая функция существенно перекрывается с плотностью ядерного вещества, адрон «сгорает», вступив в сильное взаимодействие с нуклонами ядра. Для пиона это в основном процесс двухнуклонного поглощения ( $\pi^-, 2n$ ) или ( $\pi^-, np$ ), для каона — реакция  $K^-N \rightarrow \pi\Lambda$ . Антипротон аннигилирует в паре с нуклоном ядра, и освобождающаяся при этом энергия ( $\sim 2$  ГэВ) уносится рождающимися пионами или другими, более тяжелыми мезонами. Для  $\Sigma^-$ -гиперона характерен так называемый процесс  $\Sigma-\Lambda$ -конверсии:  $\Sigma^-N \rightarrow \Lambda N$ . В адронных атомах с достаточно большим  $Z$  каскад переходов обрывается на возбужденных уровнях, не доходя до  $K$ -орбиты. Это отлично видно при расшифровке их рентгеновских спектров. Так, в спектрах пионных атомов с  $Z > 11$  отсутствует  $K_{\alpha}$ -линия, с  $Z > 30$  —  $L_{\alpha}$ -линия и т. д.

В ядерной физике главной целью экспериментов с адронными атомами является изучение свойств адрон-ядерного взаимодействия при малых энергиях. Сильное взаимодействие в адронных атомах проявляется не только в обрыве каскада электромагнитных переходов, оно приводит также к сдвигу и уширению уровней этих атомов. Совокупность данных обо всех этих эффектах позволяет внести существенные уточнения в оптические потенциалы адрон-ядерного взаимодействия. В свою очередь сами эти потенциалы входят в расчеты каскадов переходов в адронных атомах. Из таких расчетов известно, что конкуренция между поглощением адрона ядром непосредственно с высокой орбиты атома и электромагнитным переходом с такой орбиты на более низкую орбиту играет важную роль в формировании каскада на стадии, предшествующей достижению адроном «последней орбиты».

С каких орбит начинается каскад мезоатомных переходов? Другими словами, каково распределение начальных заселенностей уровней мезоатомов в процессе атомного захвата мюона или адрона? Окончательного ответа на этот вопрос в настоящее время нет. Прежде всего стадия образования мезоатома, когда мюон или адрон переходит из непрерывного спектра на связанную атомную орбиту, очень трудна для строгого теоретического рассмотрения и количественного описания. Но главная причина в том, что эта стадия мезоатомных процессов остается вплоть до настоящего времени совершенно недоступной прямому экспериментальному контролю.

В атомном захвате отрицательно заряженного мюона или адрона основную роль играет механизм «замещения» атомного электрона новой частицей:



обусловленный прямым взаимодействием между ними в присутствии «третьего тела» — атомного остатка. С самых первых работ по мезоатомной тематике считалось, что при образовании мезоатома новая частица занимает орбиту, удаленную от ядра на то же среднее расстояние, что и орбита атомного электрона, участвующего в процессе замещения. Отсюда можно оценить номер начальной орбиты. Если воспользоваться формулой (В.7), справедливой для водородоподобных систем, и учесть зависимость атомного масштаба расстояний от массы орбитальной частицы:

$$a_x = a_0 \left( \frac{m_x}{m_e} \right), \quad (13.3)$$

то получим, что при замещении атомного  $K$ -электрона новая частица занимает орбиту  $|i\rangle$ , главное квантовое число которой оценивается по формуле

$$n_i \approx \sqrt{m_x/m_e}, \quad (13.4)$$

где  $m_x$  — масса (точнее, приведенная масса) мюона или адрона. Для мюона  $n_i=14$ , для пиона — 17, для каона — 31 и т. д.

Долгое время эти оценки использовались как прямое указание на то, где начинается мезоатомный каскад. Иных данных не было: до ввода в действие мезонных фабрик точность измерения рентгеновских спектров мезоатомов не позволяла разрешать линии, соответствующие переходам с очень высоких уровней (для мюонных атомов, например, с уровней, главное квантовое число которых было бы больше 10). Сейчас ситуация другая. На рис. 13.2 показана часть рентгеновского спектра мюонных атомов железа, измеренного на Швейцарской мезонной фабрике. Всего наблюдалось более ста линий, отвечающих  $K$ -,  $L$ -,  $M$ -,  $N$ - и  $O$ -сериям

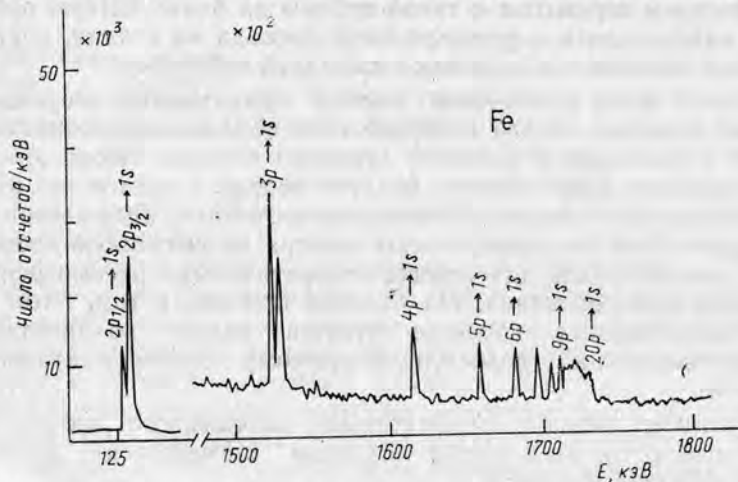


Рис. 13.2. Спектр излучения мюонных атомов железа [по: Hartman F. J. et al. // Phys. Rev. Lett. 1976. Vol. 37. P. 331]

переходов. Приведенные на рисунке данные говорят о том, что каскад переходов начинается с очень далеких орбит ( $n > 14$ ), по крайней мере с  $n_i=20$ . Согласно современным представлениям основная доля мюонов и адронов первоначально попадает в состоянии с очень большими значениями главного квантового числа  $n$ , причем распределение по  $n$  имеет длинный «хвост» (в мюонных атомах распространяющийся вплоть до  $n \approx 50$ ).

### § 13.2. КАСКАД ЭЛЕКТРОМАГНИТНЫХ ПЕРЕХОДОВ В МЕЗОАТОМАХ. ВЛИЯНИЕ СРЕДЫ НА МЕЗОАТОМНЫЙ КАСКАД

Основной характеристикой каскада является распределение заселенностей уровней мезоатома. Заселенность уровня  $P_{nl}$  складывается из числа мезонов, попавших в состояние  $|nl\rangle$ , либо прямо при образовании мезоатома, либо в результате электромагнитных переходов с более высоких орбит. Обычно заселенности  $P_{nl}$  нормируют так, чтобы они относились к одному акту образования мезоатома (к одному мюону или адрону). Вводя понятие заселенности уровня мезоатома, важно подчеркнуть, что поскольку один и тот же мезон в процессе каскада может побывать на многих уровнях, то величины  $P_{nl}$  в сумме не дают единицы:

$$\sum_{nl} P_{nl} > 1. \quad (13.5)$$

В связи с этим полезно дополнить понятие заселенности уровня понятием доли мезонов, которые поглощаются ядром или распадаются, находясь при этом на уровне  $|nl\rangle$ :

$$\omega_{nl} = P_{nl} \frac{\Gamma_{\text{abs}}(nl) + \Gamma_0}{\Gamma_{\text{tot}}(nl)}; \quad (13.6)$$

здесь

$$\Gamma_{\text{tot}}(nl) = \Gamma_{\text{abs}}(nl) + \Gamma_{\text{el}}(nl) + \Gamma_0 - \quad (13.7)$$

полная ширина уровня  $|nl\rangle$ ;  $\Gamma_0 = \hbar/\tau$  — вклад в нее, связанный со спонтанным распадом мезона;  $\Gamma_{\text{abs}}(nl)$  и  $\Gamma_{\text{el}}(nl)$  — парциальные ширины уровня  $|nl\rangle$ , соответствующие поглощению мезона ядром и электромагнитному переходу с уровня  $|nl\rangle$  во все нижележащие состояния. Поскольку каждый мезон, как бы он ни проходил каскад переходов, в конечном счете поглощается ядром или распадается, то параметры  $\omega_{nl}$ , в отличие от заселенностей  $P_{nl}$ , нормированы на единицу:

$$\sum_{nl} \omega_{nl} = 1. \quad (13.8)$$

Наряду с парциальными ширинами мы будем пользоваться также понятием скорости перехода:  $\lambda_{\text{el}}(nl) = \frac{1}{h} \Gamma_{\text{el}}(nl)$  и т. п.;

скорость перехода имеет размерность обратного времени и показывает число соответствующих событий в единицу времени. Полная скорость электромагнитного перехода из состояния  $|nl\rangle$  набирается как сумма парциальных скоростей переходов в отдельные нижележащие состояния:

$$\lambda_{el}(nl) = \sum_{n' < n} \sum_{l'} \lambda_{el}(nl \rightarrow n'l'); \quad (13.9)$$

при этом каждое из слагаемых в (13.9) есть сумма скорости радиационного перехода  $\lambda_r$  и скорости оже-перехода  $\lambda_a$ :

$$\lambda_{el}(nl \rightarrow n'l') = \lambda_r(nl \rightarrow n'l') + \lambda_a(nl \rightarrow n'l'). \quad (13.10)$$

Между этими двумя типами переходов есть большое различие. В радиационном переходе мезона электронная оболочка мезоатома практически не принимает участия. Наоборот, оже-переход как раз и состоит в передаче высвобождающейся энергии от мезона к атомному электрону, который покидает атом. Хотя оба типа переходов в мезоатомах реализуются в основном за счет  $E1$ -переходов, правила отбора для радиационных и для оже-переходов различны. Наиболее вероятны следующие переходы:

$$\begin{aligned} \text{радиационные: } nl \rightarrow n' = l; l' = l - 1; \\ \text{оже-переходы: } nl \rightarrow n' = n - 1; l' = l - 1. \end{aligned} \quad (13.11)$$

Отсюда видно, что радиационные переходы способствуют преимущественно заселению круговых орбит ( $l' = n' - 1$ ).

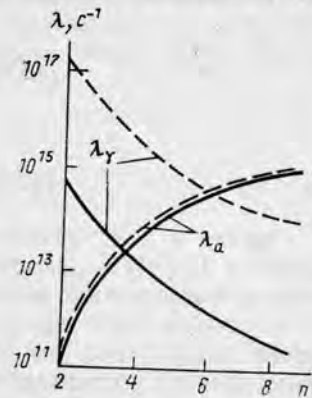


Рис. 13.3. Зависимость от  $n$  скоростей радиационных и оже-переходов мюона между круговыми орбитами в мюонном атоме кислорода (сплошные линии) и брома (пунктир) [по: Burbidge G. R., de Borde A. N. // Phys. Rev. 1953. Vol. 89. P. 189]

Скорости радиационных и оже-переходов совсем по-разному зависят от энергии перехода, а следовательно, и от главного квантового числа того уровня, с которого идет переход (рис. 13.3). Поэтому на ранней стадии каскада доминируют оже-переходы, а на заключительной — радиационные переходы. Из рисунка видно, что переход от одного режима к другому происходит тем раньше, чем больше атомный номер мезоатома  $Z$ . Это связано с тем, что скорость оже-переходов слабо зависит от  $Z$ , тогда как скорость радиационных переходов примерно пропорциональна  $Z^4$ ; поэтому точка, где пересекаются кривые  $\lambda_r$  и  $\lambda_a$ , сдвигается с увеличением  $Z$  в сторону больших  $n$ .

Для вычисления заселенностей уровней в процессе каскада составляется система линейных алгебраи-

ческих уравнений

$$P_{nl} = C_{nl} + \sum_{n' > n} \sum_{l'} P_{n'l'} \frac{\Gamma_{el}(n'l' \rightarrow nl)}{\Gamma_{tot}(n'l')}, \quad (13.12)$$

где  $C_{nl}$  — начальные заселенности уровней (соотношение (13.12) называют обычно *основным уравнением каскада*). Входящие в правую часть уравнения параметры  $\Gamma_{el}$  и  $\Gamma_{tot}$  рассчитываются с использованием тех или иных, более или менее реалистических, волновых функций состояний мезоатомов и (для адронных атомов) оптических потенциалов взаимодействия адрона с ядром; в отдельных случаях полные ширины низколежащих уровней адронных атомов  $\Gamma_{tot}(nl)$  могут быть взяты прямо из эксперимента — по ширине линий в рентгеновских спектрах этих атомов.

Уравнение (13.12) записано для изолированного мезоатома. Применяя его к мезоатомам, образующимся в конденсированных средах или в сильно сжатых газах, надо внести в это уравнение поправки, учитывающие влияние окружения на каскад переходов мюона или адрона в мезоатоме. Проиллюстрируем это влияние на двух примерах.

В атомах с достаточно большим  $Z$  вакансии во внутренних оболочках, создаваемые за счет оже-переходов на ранней стадии мезоатомного каскада, могут восстанавливаться путем перехвата мезоатомом электронов из внешних оболочек атомов окружения. От скорости этих восстановительных процессов зависит характер перехода мезоатомного каскада от режима, где доминируют оже-переходы, к режиму, где доминирует испускание рентгеновских квантов. Контролировать непосредственно процесс восстановления электронной оболочки мезоатома в ходе каскада мезоатомных переходов не удается, хотя в принципе оже-спектроскопия мезоатомов и обещает такие возможности. Пока всю информацию об этом процессе можно получить, лишь расшифровывая рентгеновские спектры мезоатомов. При этом часто скорость восстановления электронной оболочки мезоатома включается в уравнение каскада как отдельный подгоночный параметр. Уточним: с учетом процессов перестройки электронной оболочки мезоатома в ходе каскада усложняется и сама структура уравнения (13.12), куда теперь кроме заселенностей уровней мезона входят в качестве динамических переменных также заселенности различных орбит электронной оболочки мезоатома.

Другой пример влияния окружения на мезоатомный каскад касается исключительно мезоатомов водорода. Особенность таких мезоатомов — их электрическая нейтральность. Она позволяет им свободно двигаться в среде и, в частности, подходить на очень близкое расстояние к ядрам атомов среды, где они подпадают под действие сильного электрического поля, создаваемого зарядом ядра. Напомним, что уровни водородоподобных систем, в том числе уровни мюонного атома водорода, а также высоковозбужденные уровни адронных атомов водорода характеризуются «случайным» вырождением по орбитальному моменту  $l$ . Сильное куло-

новское поле ядер, к которым близко подходит мезоатом водорода, смешивает его состояния по  $l$  (происходит так называемое *штарковское смешивание* состояний). Это означает, что мюон или адрон, находившиеся на круговой орбите ( $n$ ;  $l=n-1$ ), теперь оказываются «распределенными» по всем орбитам с квантовым числом  $n$ : от круговой ( $l=n-1$ ) до  $ns$ -орбиты, отличающейся большей вероятностью нахождения частицы в центре мезоатома. Для адронных атомов водорода это имеет особое значение, так как, попав благодаря штарковскому смешиванию в  $s$ -состояние, адрон вступает в сильное взаимодействие с протоном задолго до того, как он достиг низших орбит.

Последствия штарковского смешивания состояний адронных атомов водорода очень важны для исследований по физике элементарных частиц. Возьмем для примера исследования с антипротонами низких энергий. В жидком водороде, где в отличие от газовой среды вероятность сближения антипротонного атома  $\bar{p}p$ -протония — с ядрами среды (а вместе с тем и вероятность штарковского смешивания) очень велика, аннигиляция остановившихся антипротонов происходит практически исключительно из  $s$ -состояний. Это оборачивается особо жестким отбором конечных состояний в процессе аннигиляции. В то же время в газовых водородных камерах протоний аннигилирует с заметной вероятностью и из состояний с  $l \neq 0$ . Об этом говорят, в частности, прямые наблюдения актов аннигиляции из  $2p$ -состояния, которые выполняются путем регистрации на совпадение продуктов аннигиляции с характеристическими рентгеновскими квантами из переходов с высших уровней, приводящих к заселению  $2p$ -состояния протония.

Большой интерес вызывают эффекты задержки каскада электромагнитных переходов в мезоатомах. Один из таких эффектов давно известен и довольно хорошо изучен — это задержка каскада в мюонных атомах, возникающая, когда мюон попадает в метастабильное  $2s$ -состояние мезоатома, обычный однофотонный радиационный переход из которого в основное  $1s$ -состояние запрещен по орбитальному моменту. Расчеты показывают, что, пока такой атом изолирован, метастабильное  $2s$ -состояние распадается либо по каналу спонтанного распада самого мюона, либо (подобно  $2s$ -состоянию в обычных атоме водорода или водородоподобных ионах) по двухфотонному каналу. В реальных условиях штарковское смешивание  $2s$ - и  $2p$ -состояний (и следующий за ним быстрый спонтанный переход  $2p \rightarrow 1s$ ), а также внешний оже-эффект, когда энергия возбуждения мюонного атома передается электронам атомов среды, ускоряют переход мюона с  $2s$ -уровня на основной. В газовой среде скорость этих процессов пропорциональна давлению газа, и это обстоятельство дает возможность проследить за тем, как они влияют на задержку каскада.

Другой пример задержки каскада имеет отношение к адронным атомам. Эксперимент показывает, что при торможении отрицательных пионов и каонов в жидком гелии значительная часть этих частиц распадается «в покое», т. е. когда они уже находятся

на мезоатомных орбитах. Доля таких событий, в расчете на один остановившийся мезон, составляет (с учетом результатов разных лабораторий) от 1,0 до 1,2% для  $\pi^-$  и от 1,9 до 2,6% для  $K^-$ . Чем удивительны эти данные? Собственное время жизни пиона и каона  $2,6 \cdot 10^{-8}$  и  $1,24 \cdot 10^{-8}$  с. Время замедления этих частиц от начальных скоростей, соответствующих обычным условиям создания выведенных пучков пионов и каонов на ускорителях, вместе с временем атомного каскада на 2-3 порядка меньше. В жидком гелии, где плотность велика, штарковское смешивание сокращает это время до  $\sim 10^{-12}$  с. Соотношение времен  $\tau \sim 10^{-8}$  и  $\tau \sim 10^{-12}$  с не оставляет никакой возможности для того, чтобы 1–2% остановившихся пионов и каонов могли свободно распадаться, избежав поглощения ядром мезоатома. В связи с этим еще очень давно было выдвинуто предположение («гипотеза Кондо»), согласно которому некоторая доля пионов и каонов, совершая каскад переходов в мезоатоме, задерживается в особом рода долгоживущих метастабильных состояниях, поглощение из которых ядром мезоатома затруднено и в которых они преимущественно распадаются. Согласно гипотезе Кондо, это должны быть циркулярные орбиты с очень большим квантовым числом ( $n \geq 30$ ). Оже-переход с таких орбит крайне затруднен, так как величина средней энергии связи электрона в мезоатоме гелия ( $\sim 25$  эВ) требует перехода мюона сразу далеко вниз, что противоречит правилам отбора (13.11). То же самое справедливо для радиационных переходов: разрешенные переходы — это переходы между соседними круговыми орбитами ( $n$ ;  $l=n-1$ )  $\rightarrow$  ( $n-1$ ,  $l'=l-1$ ). При больших  $n$  энергия таких переходов, а следовательно, и скорость этих переходов очень малы.

Недавно гипотеза Кондо получила поддержку в экспериментах по временной развертке распада остановившихся  $K$ -мезонов в жидком гелии (рис. 13.4). Среднее время жизни остановившихся  $K^-$ -мезонов оказалось равно  $\tau(K^-) = (0,95 \pm 0,03) \cdot 10^{-8}$  с, т. е. меньше, чем у свободных каонов ( $\tau_0(K^-) = 1,24 \cdot 10^{-8}$  с) или у остановившихся в жидком гелии  $K^+$ -мезонов ( $\tau(K^+) = (1,26 \pm 0,02) \cdot 10^{-8}$  с). В рамках гипотезы Кондо это ускорение распада задержанных каонов интерпретируется естественным образом. Временная зависимость распада каона с метастабильного уровня определяется, с одной стороны, его спонтанным распадом, а с другой — поглощением каона ядром прямо с этого уровня и электромагнитным переходом вниз (в конечном счете — на уровни, где каон поглощается ядром):

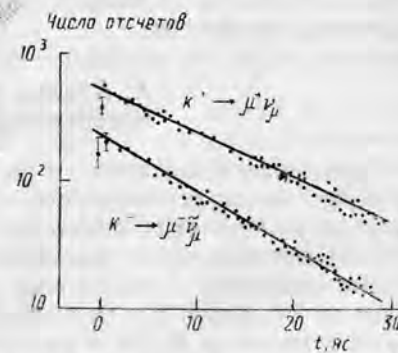


Рис. 13.4. Временная зависимость распада остановившихся  $K^-$ - и  $K^+$ -мезонов в жидком гелии [по: Yamazaki T. et al. // Phys. Rev. Lett. 1989. Vol. 63. P. 1590]

$$\Gamma_{n_i}(\text{tot}) > \Gamma_0(K^-) = \frac{\hbar}{\tau_0(K^-)} \quad (13.13)$$

Наличие каскада переходов между первичным метастабильным уровнем и уровнями, с которых каон поглощается ядром, приводит к тому, что, строго говоря, распад «задержанных» каонов носит неэкспоненциальный характер. Поэтому соотношение (13.13) и эквивалентное ему соотношение для времен

$$\tau_{n_i}(K^-) = \frac{\hbar}{\Gamma_{n_i}(\text{tot})} < \tau_0(K^-) \quad (13.14)$$

полезны лишь для ориентировки.

Эффект задержки каскада переходов на высоких циркулярных орбитах представляет особый интерес для исследований с антипротонами. Антипротон стабилен, и процедура временной развертки (типа представленной на рис. 13.4), примененная к выходу продуктов аннигиляции антипротонов в антипротонных атомах, не просто дает время жизни долгоживущих метастабильных состояний в этих атомах, но и позволяет выделить сам процесс аннигиляции «задержанных» антипротонов. С точки зрения ядерной физики особенность этого процесса состоит в том, что здесь орбитальный момент  $\bar{N}N$ -пары в момент аннигиляции очень высок. Это очень важно, так как в настоящее время какая-либо прямая информация о свойствах продуктов аннигиляции  $\bar{N}N$ -пары из состояний с большим орбитальным моментом практически полностью отсутствует.

### § 13.3. ПИОННЫЕ И МЮОННЫЕ МЕТОДЫ В ХИМИЧЕСКИХ ИССЛЕДОВАНИЯХ

В данном параграфе мы разберем несколько примеров использования пионных и мюонных методов в химических исследованиях с целью показать их связь с проблемами физики мезоатомов и мезоатомных процессов.

#### А. Анализ состава и структуры вещества по мезорентгеновскому излучению

Измерение положения и интенсивностей отдельных линий в спектрах мезорентгеновского излучения позволяет установить принадлежность этих линий и, более того, целых групп линий (серий) определенным химическим элементам, входящим в исследуемое вещество. Такой метод можно рассматривать как разновидность обычного рентгеновского метода элементарного и структурного анализа. Однако ряд его принципиальных особенностей делает мезорентгеновский метод существенным дополнением к обычным методам. Особые возможности мезорентгеновского метода обусловлены прежде всего тем, что на стадии образования мезоатомов распределение вероятностей атомного захвата между

атомами разных элементов зависит не только от их относительной концентрации в исследуемом веществе и от атомного номера каждого элемента  $Z_i$ , но и от наличия и рода химических связей между атомами этих элементов. В конечном счете эта зависимость проявляется в соотношении интенсивностей отдельных линий и серий в измеряемых мезорентгеновских спектрах. Принципиальные возможности использовать мезорентгеновский метод для выяснения характера химических связей в исследуемых образцах делают очень важным построение физической теории атомного захвата мюонов и адронов в смесях и химических соединениях. Пока здесь еще много открытых вопросов.

Соотношение вероятностей атомного захвата мюона или адрона  $W(Z_i)$  атомами разных химических элементов определяется прежде всего их концентрациями в исследуемом веществе  $c_i$ . Удобно исключить этот тривиальный фактор из  $W(Z_i)$ , перейдя к приведенным вероятностям атомного захвата  $w(Z_i)$ , которые рассчитываются на одинаковое количество ядер разных элементов:

$$w(Z_i) = \frac{W(Z_i)}{c_i} \quad (13.15)$$

Известен так называемый  $Z$ -закон, которым часто пользуются для ориентировки при оценке соотношений между приведенными вероятностями  $w(Z_i)$  для разных элементов в составе смеси или химического соединения. Согласно этому закону, приведенная вероятность атомного захвата мюона или адрона пропорциональна числу электронов в оболочке атома, т. е. его атомному номеру  $Z$ :

$$\frac{w(Z_1)}{Z_1} = \frac{w(Z_2)}{Z_2} \quad (13.16)$$

В действительности наблюдаются большие отклонения от этого закона.

#### Б. Перезарядка $\pi$ -мезонов на ядрах водорода

Одной из актуальных проблем современной химии является проблема водорода в составе конденсированных сред. Мезохимия предлагает обладающий большой селективной способностью метод анализа концентрации и химической связи водорода в различных веществах. В нем используются «остановившиеся», т. е. замедлившиеся в веществе и захваченные на кулоновские орбиты мезоатомов,  $\pi$ -мезоны. Заключительный этап каскада электромагнитных переходов в пионных атомах водорода принципиально отличается от того, как он проходит в пионных атомах всех других элементов. Здесь нет обычного поглощения пиона ядром, идущего по каналу сильного взаимодействия, и поэтому все другие каналы пион-ядерного взаимодействия, которые обычно не играют в окончательной судьбе пионных атомов большой роли, стано-

вятся основными. Это реакции радиационного захвата пиона протоном и перезарядки пиона:



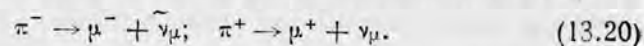
Нейтральный  $\pi^0$ -мезон, образующийся в реакции перезарядки, распадается по схеме  $\pi^0 \rightarrow 2\gamma$ , так что, измеряя отношение выхода характерных пар жестких  $\gamma$ -квантов ( $E_\gamma \approx 70$  МэВ) к выходу одиночных  $\gamma$ -квантов из реакции (13.17) ( $E_\gamma > 100$  МэВ), можно найти отношение вероятностей реакций (13.18) и (13.17) — так называемое отношение Пановского  $R_H$ :

$$R_H = \frac{Y(\pi^-, \pi^0)}{Y(\pi^-, \gamma)} \Big|_{\text{экс}} = 1,53 \pm 0,02. \quad (13.19)$$

Как видим, более 60% пионов, захваченных на кулоновские орбиты мезоатома водорода, заканчивают свою жизнь перезарядкой. Известно лишь еще одно ядро —  $^3\text{He}$ , где выход реакции перезарядки остановившихся  $\pi$ -мезонов относительно высок ( $\sim 15$ —17%); во всех же других ядрах выход перезарядки не превышает 0,5%. Перезарядка остановившихся пионов в различных водородсодержащих веществах оказывается исключительно чувствительным средством не только для установления содержания в них водорода, но и для выяснения того, является ли водород в этих веществах свободным или же он химически связан.

### В. Поляризация и деполяризация мюона в мюонных атомах

В лабораторных исследованиях источниками мюонов являются пионы, распадающиеся по каналам слабого взаимодействия:



Согласно законам физики слабых взаимодействий, нейтрино и антинейтрино всегда полностью поляризованы: нейтрино  $\nu_\mu$  левополяризовано (его спиральность, т. е. проекция спина на направление импульса  $\mathbf{p}$ , равна  $\langle s_{\nu} \rangle_{\mathbf{p}} = -1/2$ ), антинейтрино  $\bar{\nu}_\mu$  правополяризовано ( $\langle s_{\bar{\nu}} \rangle_{\mathbf{p}} = +1/2$ ). Пион — бесспиновая частица. Поэтому в распадах (13.20) образующиеся мюоны  $\mu^-$  и  $\mu^+$  тоже (в системе покоя пиона) полностью поляризованы. Пересчет в лабораторную систему, а также учет потерь поляризации при коллимировании пучков мюонов показывают, что при энергиях пионов и геометрических условиях, типичных для мезонных фабрик и других лабораторий аналогичного профиля, поляризация образующихся мюонов в действительности не является полной, однако отличается от нее не более чем на 20%. В процессе замедления мюонов в веществе их существенной дальнейшей деполяризации не

происходит. Таким образом, отрицательные мюоны захватываются на мезоатомные орбиты с высокой степенью продольной поляризации — более 80%. Что дальше происходит со спином мюона по мере того, как развивается каскад его мезоатомных переходов?

На ранней стадии каскада доминируют оже-переходы, которые идут быстро в сравнении с временем прецессии спина мюона в магнитном поле ядра. Иначе говоря, ширины верхних уровней мюонных атомов, доминирующий вклад в которые дают оже-переходы, велики по сравнению с разностью уровней тонкой структуры мюонного атома. В таких условиях начальная поляризация мюона сохраняется. Картина качественно меняется, когда каскад доходит до уровней, где оже-переходы уступают свою доминирующую роль радиационным переходам. Расчеты показывают, что радиационные ширины уровней мюонного атома всегда меньше, чем величина их тонкого расщепления. В таких условиях происходит сильная деполяризация мюона. Если спин ядра мезоатома равен нулю, то, по расчетам, мюон, достигнув своей  $K$ -орбиты, сохраняет только 16—17% начальной поляризации, а если спин ядра не равен нулю, то, из-за сверхтонкого взаимодействия, еще меньше. Остаточную поляризацию мюона можно измерить по асимметрии «вперед — назад» углового распределения электронов, возникающих при распаде мюона:  $\mu^- \rightarrow e^- + \nu_e + \bar{\nu}_e$ . Использование этого явления в мезохимии основано на том, что в конденсированных средах и сжатых газах взаимодействие мюонного атома с окружением может влиять (через электронную оболочку  $\mu$ -атома или прямо — через взаимодействие магнитного момента мюона с внутренними магнитными полями в образце) на остаточную поляризацию мюона.

Вспомним, что свободный мюон живет всего две микросекунды. С учетом ядерного захвата мюона среднее время жизни  $\mu$ -атома на  $K$ -орбите еще меньше, причем тем меньше, чем сильнее перекрывается волновая функция мюона на  $K$ -орбите с внутренней областью ядра, т. е. чем тяжелее это ядро. Например, в никеле  $\tau_{\mu}(^{28}\text{Ni}) = (0,162 \pm 0,001) \cdot 10^{-6}$  с, в барии  $\tau_{\mu}(^{56}\text{Ba}) = 0,0944 \pm \pm 0,0007) \cdot 10^{-6}$ , в уране  $\tau_{\mu}(^{235}\text{U}) = (0,0665 \pm 0,0042) \cdot 10^{-6}$  с. В течение этого короткого промежутка времени  $\mu$ -атом элемента  $Z$  ведет себя в среде, ввиду очень малых размеров его  $K$ -орбиты, как аналог атома  $(Z-1)$ -го элемента, в частности в химические реакции вступает так же, как обычный атом этого  $(Z-1)$ -го элемента. В то же время он является «меченым» атомом, который дает о себе знать распадом мюона. Благодаря остаточной поляризации  $\mu$ -атом сохраняет память о первоначальном направлении спина мюона. Если на образец накладывается поперечное по отношению к этому направлению магнитное поле  $\mathbf{H}$ , то возникает прецессия магнитного момента  $\mu$ -атома и, следовательно, вся диаграмма углового распределения электронов от распада мюона вращается вокруг вектора магнитного поля. Если спин ядра и электронной оболочки мюонного атома равны нулю (диамагнитный атом), то

угловая частота такого вращения есть просто ларморовская частота вращения спина мюона:

$$\omega_{\mu} = \frac{eH_{\perp}}{2m_{\mu}c}. \quad (13.21)$$

Детектор электронов, регистрирующий частицы, летящие в определенный телесный угол, если он снабжен быстродействующей электроникой, фиксирует в этом случае не просто экспоненциальный распад мюона  $N_e(t) \sim \exp(-t/\tau_{\mu})$ , а распад, модулированный прецессией его магнитного момента:

$$N_e(t) = N_e(0)e^{-t/\tau_{\mu}} [1 + a \cos(\omega_{\mu}t + \varphi)], \quad (13.22)$$

где коэффициент  $a$  связан с величиной остаточной поляризации мюона на  $K$ -орбите. Если же происходящие с меченым  $\mu$ -атомом химические процессы делают его в какой-то момент парамагнитным, частота прецессии определяется теперь уже полным магнитным моментом атома и это сразу сказывается на временной зависимости регистрации электронов от распада мюона.

### Г. Мюоний

До сих пор мы говорили о мезоатомных процессах с участием отрицательно заряженных частиц. Сюда примыкают исследования мюония и процессов с его участием. Мюоний  $\mu^+e$  — система, состоящая из положительно заряженного мюона и электрона. Экспоненциальный распад мюона  $\mu^+ \rightarrow e^+ + \nu_e + \bar{\nu}_{\mu}$ , если он наблюдается по выходу позитронов в поперечном относительно направления спина мюона магнитном поле, модулируется периодическими колебаниями типа (13.22) за счет прецессии магнитного момента мюония. Если за время жизни  $\mu^+$ -мюона ( $\sim 2,2 \cdot 10^{-6}$  с) свободный мюоний вступает в химическую реакцию, это сразу сказывается на характере прецессии. Так можно измерять скорость химических реакций с участием мюония, а следовательно, и судить о скорости химических реакций с участием атома водорода, прямым аналогом которого является мюоний.

## Лекция 14

### § 14.1. ОБРАЗОВАНИЕ МЕЗОМОЛЕКУЛ

Во введении была рассмотрена простейшая молекулярная система — молекулярный ион водорода  $ppe = H_2^+$ . Мезомолекулярный ион водорода  $pp\mu = \mu H_2^+$ , где роль электрона играет отрицательно заряженный мюон  $\mu^-$ , является его прямым аналогом. Предположения о существовании мезоиона  $\mu H_2^+$  как устойчивой системы были сделаны еще в самые первые годы исследований с мезона-

ми. Тогда же впервые была высказана идея о мюонном катализе ядерного синтеза (Ф. Франк, 1947). Ион  $\mu H_2^+$  — система очень компактная. Если в обычном молекулярном ионе водорода  $H_2^+$  равновесное расстояние между ядрами порядка  $10^{-8}$  см, то в мезоионе  $\mu H_2^+$  оно на два порядка меньше, что соответствует отношению масс электрона и мюона  $m_{\mu}/m_e = 207$ . Расчеты показывают, что при таком сближении ядра водорода, входящие в состав  $\mu H_2^+$ , могут успеть за время жизни мюона преодолеть стоящий между ними кулоновский барьер, чтобы вступить в ядерное взаимодействие.

В следующем параграфе мы специально рассмотрим состояние проблемы  $\mu$ -катализа и связь исследований по проблеме катализа с физикой взаимодействия заряженных частиц с веществом. Здесь же разберем основные свойства мезомолекул водорода.

Обратимся к формуле (B.24) для эффективной потенциальной энергии взаимодействия ядер водорода в молекулярном ионе  $H_2^+$ . Пусть  $x$  — любая из отрицательно заряженных частиц  $e, \mu, \pi$ . Будем считать, что масса частицы  $x$  много меньше, чем масса протона:  $m_x \ll M_p$ . Тогда формула (B.24) переписется без изменения и для мезомолекулярного иона  $xH_2^+$ :

$$U_{\text{эфф}}(R) = \frac{e^2}{R} + \varepsilon(R). \quad (14.1)$$

Второе слагаемое в этом выражении, с учетом эффекта масштабирования волновых функций водородоподобных систем, записывается в виде

$$\varepsilon(R) = \frac{e^2}{a_0} \frac{m_x}{m_e} f(\xi), \quad (14.2)$$

где мы ввели безразмерную переменную

$$\xi = R/a_x; \quad (14.3)$$

здесь

$$a_x = \frac{m_e}{m_x} a_0 \quad (14.4)$$

уменьшенная в  $m_x/m_e$  раз атомная единица длины, а  $f(\xi)$  — единая для всех систем  $H_x$  функция переменной  $\xi$ . Теперь и все выражение (14.1) можно переписать, используя эту безразмерную переменную:

$$U_{\text{эфф}}(R) = \frac{e^2}{a_0} \frac{m_x}{m_e} \left[ \frac{1}{\xi} + f(\xi) \right]. \quad (14.5)$$

Минимум функции  $1/\xi + f(\xi)$  (пусть это будет точка  $\xi_0$ ) определяет равновесное расстояние между ядрами  $R_0$ :

$$(R_0)_x = \frac{1}{m_x/m_e} (R_0)_e; \quad (R_0)_e = a_0 \xi_0, \quad (14.6)$$



а ее вторая производная в точке  $\xi_0$  — коэффициент жесткости молекулярного иона по отношению к колебаниям ядер в низшем состоянии их вращательного движения ( $J=0$ ):

$$k = (1/\xi + f(\xi))_{\xi_0} \left( \frac{m_x}{m_e} \right)^3 \frac{e^2}{a_0^3} \quad (14.7)$$

Частота колебаний ядер связана с коэффициентом жесткости формулой

$$\omega = \sqrt{\frac{k}{\mu}}, \quad (14.8)$$

где  $\mu = \frac{M_1 M_2}{M_1 + M_2}$  — приведенная масса молекулярного иона, а  $M_1$  и  $M_2$  — массы ядер изотопов водорода, входящих в состав рассматриваемого иона. Отсюда соотношение масштабирования для частот

$$\omega_x = \left( \frac{m_x}{m_e} \right)^{3/2} \omega_e; \quad (14.9)$$

частота колебаний ядер в мезоине  ${}_x\text{H}_2^+$  намного больше, чем в обычном молекулярном ионе водорода.

Приведенные выше соотношения между линейными и энергетическими параметрами обычного и мезонного молекулярного ионов водорода носят оценочный характер. Во-первых, даже в легчайшем из мезомолекулярных ионов  $\mu\text{H}_2^+$ , где роль электрона играет отрицательный мюон, отношение массы этой частицы к массе протона — не такая уж малая величина ( $m_\mu/M_p \approx 1/7$ ), и поэтому поправки к адиабатическому приближению (в рамках которого было получено исходное соотношение (В.24)) оказываются существенными. Во-вторых, мы отвлеклись в своих оценках от вращений молекулярного иона. Между тем при переходе от обычного молекулярного иона водорода к мезомолекулярному иону  ${}_x\text{H}_2^+$  спектр его вращательных уровней меняется иначе, чем частоты колебаний ядер:

$$\frac{\hbar^2 J(J+1)}{2\mu R_0^2} \sim \left( \frac{m_x}{m_e} \right)^2; \quad (14.10)$$

т. е. коэффициент масштабирования не один и тот же по всему спектру вращательных и колебательных («ро-вибрационных») возбуждений мезомолекулярных ионов.

В табл. 14.1 собраны рассчитанные разными авторами и разными методами параметры молекулярных ионов изотопов водорода; наиболее подробные данные имеются для ионов  $dd\mu$  и  $dt\mu$ , что связано с их особой ролью в исследованиях по  $\mu$ -катализу ядерного синтеза. Заметим, что условия взаимного расположения и дви-

Таблица 14.1

Энергия диссоциации  $\mu$ -молекулярных ионов изотопов водорода (в эВ) в разных состояниях ( $J, \nu$ ) вращательного и колебательного возбуждения

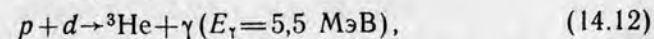
$J, \nu$	$pp\mu$	$dd\mu$	$dt\mu$	$tt\mu$
0,0 (основное состояние)	253	325	319	362
0,1	—	36	35	84
1,0	107	227	232	289
1,1	—	1,97	0,66	45,2

жения ядер в мезоионах  $pp\mu$ ,  $pd\mu$ ,  $dd\mu$  и т. п. весьма сходны с тем, что известно в астрофизике для белых карликов, а в ядерной физике — для горячей плазмы в термоядерных установках с магнитным или инерционным удержанием (Токамак, лазерный разогрев плазмы и др.). Действительно, среднему расстоянию между ядрами порядка  $10^{-10}$  см соответствует плотность  $\rho \sim 10^{-30}$  г/см<sup>3</sup>, т. е.  $10^7$  LHD (LHD =  $4,25 \cdot 10^{22}$  ат/см<sup>3</sup> — плотность жидкого водорода). С другой стороны, 100 эВ, что составляет порядок величины для энергии колебаний ядер в  $\mu$ -молекулярном ионе водорода, — это температура порядка миллиона градусов.

Первое наблюдение образования мезомолекулярных соединений произошло в 1957 г. в эксперименте группы Альвареца. В жидководородной, с примесью дейтерия, пузырьковой камере, в которую направляли отрицательно заряженные пионы и мюоны, наблюдались события, когда в точке остановки первичной частицы возникали мюоны с характерной энергией 5,3 МэВ. Это не могли быть продукты распада остановившихся пионов  $\pi^- \rightarrow \mu^- \bar{\nu}_\mu$  (здесь энергия образующегося мюона составляла бы всего 4,1 МэВ). Стало ясно, что мюоны с энергией 5,3 МэВ возникают в результате ядерной реакции синтеза, следующей за образованием мезомолекулы  $pd\mu$ :



Сравнивая эту реакцию с известной реакцией синтеза, изучаемой в обычных условиях на ускорителях,



можно сказать, что в реакции (14.11) происходит как бы «внутренняя конверсия» высвобождающейся в результате ядерного

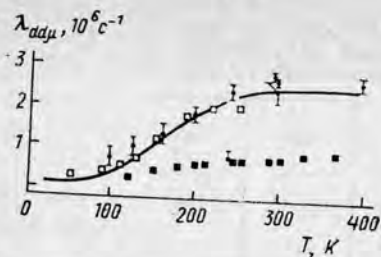
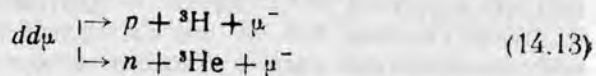


Рис. 14.1. Скорость образования мюонной молекулы  $dd\mu$  в зависимости от температуры среды [по: Быстрицкий В. М. и др. //ЖЭТФ. 1979. Т. 76. С. 460]. Данные, объединенные сплошной кривой, получены позднее в других лабораториях

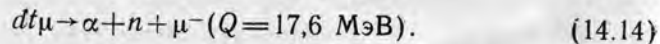
молекулы; т. е. было экспериментально показано, что мюон может выступать как катализатор ядерного синтеза; 3) регистрация характерных продуктов ядерного синтеза и есть метод обнаружения мезомолекул. В последующие годы определяющий вклад в экспериментальное и теоретическое изучение физических процессов, идущих с участием мезомолекул, внесли физики Объединенного института ядерных исследований в Дубне. Особенно интересные результаты были получены при изучении реакции  $dd$ -синтеза:



Оказалось, что скорость этой реакции зависит от температуры среды (рис. 14.1). Первое время такой результат казался странным. Сейчас же является общепризнанным, что именно открытие температурной зависимости скорости  $dd$ -синтеза указало путь к резкому повышению эффективности  $\mu$ -катализа и явилось началом широких систематических исследований в этой области.

#### § 14.2. МЮОННЫЙ КАТАЛИЗ ЯДЕРНОГО СИНТЕЗА

Максимальное число циклов на один мюон, которого удалось достичь в экспериментах по  $\mu$ -катализу, составляет около 150 (С. Джонс, Лос-Аламос, 1986). Это происходит в дейтериево-тритиевых смесях, где идет реакция  $dt$ -синтеза:



Рекордно высокая энергия, выделяемая в каждом цикле этого процесса, и рекордное число циклов на один мюон — это счастли-

вы синтез энергии, и мюон, находившийся в момент синтеза на мезомолекулярной орбите иона  $\mu\text{H}_2^+$ , уносит почти всю эту энергию (за вычетом небольшой ее доли, приходящейся на отдачу ядра  ${}^3\text{He}$ ) с собой.

Эксперимент Альвареца имел очень большое значение для последующих мезомолекулярных исследований. Им было продемонстрировано, что: 1) мезомолекулы действительно существуют; 2) отрицательно заряженные мюоны, образовав мезомолекулу, затем освобождаются и после этого, замедлившись, могут снова привести к образованию мезо-

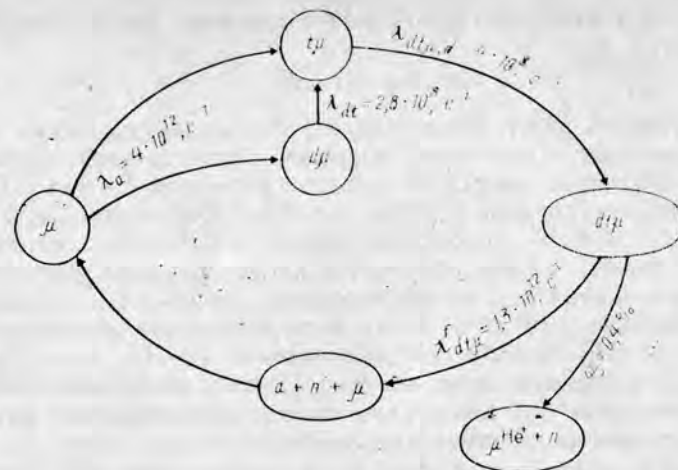


Рис. 14.2. Цикл  $\mu$ -катализа в смеси дейтерия и трития; скорости всех столкновительных процессов даны для плотности жидкого водорода

вое сочетание особенностей реакции  $dt\mu$ -синтеза, ставящее ее вне конкуренции со всеми другими реакциями  $\mu$ -катализа с точки зрения перспектив ее использования в энергетике.

На рис. 14.2 изображен цикл  $\mu$ -катализа в смеси дейтерия и трития. Эффективность катализа определяется продолжительностью цикла  $\tau_c$ , так как именно эта величина в сравнении с собственным временем жизни мюона  $\tau_0$  (или, что то же, обратная ее величина средней скорости цикла  $\lambda_c = 1/\tau_c$  в сравнении со средней скоростью спонтанного распада мюона  $\lambda_0 = 1/\tau_0 = 0,45 \cdot 10^{-6} \text{ с}^{-1}$ ) определяет среднее число циклов на один мюон. Из чего же складывается время цикла? Проследим за мюоном с помощью схемы цикла на рис. 14.2. Примем во внимание, что скорости всех парных столкновительных процессов пропорциональны плотности среды; численные значения скоростей таких процессов, указанные на схеме, относятся к случаю, когда плотность среды равна плотности жидкого водорода.

Попав в вещество, мюон замедляется согласно общим законам ионизационного торможения и затем, взаимодействуя с молекулами  $\text{D}_2$ ,  $\text{T}_2$  и  $\text{DT}$ , входящими в состав  $\text{D/T}$ -смеси, образует мюонные атомы изотопов водорода —  $d\mu$  и  $t\mu$ . Вся эта стадия занимает время порядка  $10^{-12} \text{ с}$ . На схеме не отражены процессы, связанные с каскадом электромагнитных переходов мюона в атомах  $d\mu$  и  $t\mu$ . Это тоже очень быстрые процессы (см. лекцию 13); они завершаются за время порядка  $10^{-11} \text{ с}$ . Образовавшиеся атомы  $d\mu$  и  $t\mu$  — эти компактные нейтральные объекты — начинают блуждать среди молекул среды. Подходя к ядру трития в молекуле  $\text{DT}$  или  $\text{T}_2$ ,  $d\mu$ -атом легко отдает ему свой мюон, так как в силу изотопичес-

кого эффекта мюон сильнее связан с тритием, чем с более легким дейтроном:



Таким образом, перед образованием мезомолекулы мюон оказывается чаще всего в составе  $t\mu$ -атома. Этот  $t\mu$ -атом, взаимодействуя с дейтроном, входящим в состав молекулы  $D_2$  или  $DT$ , образует мезомолекулярный ион  $dt\mu$ , а с тритием, входящим в состав молекул  $DT$  и  $T_2$ , — мезомолекулярный ион  $tt\mu$ . Однако оказывается, что первый из них образуется на два порядка быстрее (скорость образования  $\lambda_{t\mu}$ , не приведенная на рис. 14.2, составляет приблизительно  $3 \cdot 10^6 \text{ с}^{-1}$ ). Более того, и скорость образования мезомолекулы  $dd\mu$  (в процессе столкновения  $d\mu + D_2$  или  $d\mu + DT$ ) тоже на два порядка ниже, чем  $\lambda_{dt\mu}$ . Почему же процесс образования мезомолекул  $dt\mu$  так сильно выделен среди других аналогичных ему процессов образования молекул?

Причина этого — в особом, резонансном механизме образования мюонных молекул изотопов водорода. Он был предложен Весманом (Дубна, 1967) как способ решения уже известной нам проблемы температурной зависимости  $dd\mu$ -синтеза. Отправляясь от этой идеи, спустя 10 лет Герштейн и Пономарев показали, что резонансный механизм должен быть особенно сильным именно в образовании  $dt\mu$ -молекулы; вместе с этим впервые за все время изучения  $\mu$ -катализа была названа цифра 100 для числа циклов на один мюон. Скрупулезные теоретические расчеты процесса образования мезомолекулы в смесях изотопов водорода, проведенные к настоящему времени несколькими группами в разных странах, позволяют видеть в деталях, как осуществляется резонансный механизм  $dt\mu$ -синтеза.

Взаимодействуя с молекулой  $D_2$ , мезоатом  $t\mu$  не просто отнимает у молекулы один дейтрон:



оставляя другой дейтрон свободным. Такой процесс (его называют прямым процессом образования мезомолекулы) возможен, но не является главным. В основном же молекулярный ион  $dt\mu$  вместе с этим вторым дейтроном выступает как составная часть образующегося большого комплекса  $(dt\mu)dee$ , являющегося аналогом обычной молекулы водорода. Размеры  $dt\mu$ -иона в этой большой двухэлектронной молекуле порядка  $5 \cdot 10^{-11}$  см, размеры всего комплекса — как у обычной молекулы, т. е. порядка  $10^{-8}$  см (рис. 14.3). Ион  $dt\mu$  в этой большой молекуле — тяжелый кулоновский центр, что-то вроде сверхтяжелого ядра водорода, заряд которого равен  $+e$ , а масса в пять с лишним раз больше, чем масса протона.

Итак, мезомолекулярный комплекс  $(dt\mu)dee$  обладает как мезомолекулярными, так и обычными молекулярными степенями свободы. Возбуждения, приходящиеся на те и другие из этих степеней свободы, сочетаясь между собой, создают своеобразную кар-

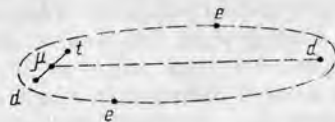


Рис. 14.3. Схема строения мезомолекулы  $(dt\mu)dee$

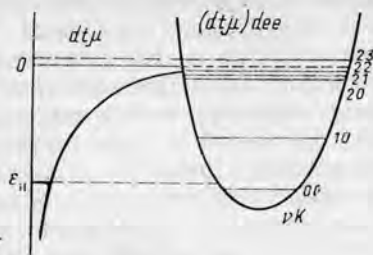
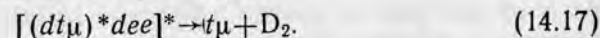
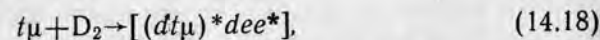


Рис. 14.4. Схема возбуждения различных степеней свободы мезомолекулярного комплекса  $(dt\mu)dee$

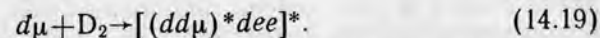
тину всего спектра возбуждения этого комплекса (рис. 14.4). Особо внимательно присмотримся к уровню  $\varepsilon(J=1, v=1) \equiv \varepsilon_{11}$ , расположенному в непосредственной близости от порога диссоциации молекулярного иона:  $\varepsilon_{11} = 0,66 \text{ эВ}$  (см. табл. 14.1). В правой части рис. 14.4 показан спектр ро-вибрационных возбуждений молекулы  $(dt\mu)dee$ , связанных с взаимным движением дейтрона и иона  $dt\mu$  как целого. При наложении этих возбуждений на внутреннее возбуждение  $\varepsilon_{11}$  самого молекулярного иона  $dt\mu$  какие-то уровни всего комплекса  $(dt\mu)dee$  оказываются выше порога диссоциации молекулярного иона  $dt\mu$ . Им соответствуют распадающиеся состояния большой молекулы:



Нам, однако, гораздо интереснее прочитать эту реакцию в обратном направлении:



когда свободный мезоатом  $t\mu$  взаимодействует с молекулой  $D_2$ . При определенных значениях энергии их относительного движения возникает, аналогично тому, как это имеет место в резонансных ядерных реакциях, составная (распадающаяся) система  $[(dt\mu)^*dee]^*$ . Это и есть резонансный механизм образования мезомолекул. Подобно (14.18), он отвечает и за образование мезомолекул  $dd\mu$ :



Ширины этих резонансов очень малы, но резонансные сечения образования молекул гораздо больше, чем сечения прямых процессов типа (14.16).

Вступает в действие резонансный механизм в той или иной реакции или нет — это зависит от «случайного» обстоятельства: имеется ли в образующейся составной системе резонансный уровень как раз в том интервале энергии возбуждения, который соответствует кинетической энергии свободного мезоатома  $d\mu$  или  $t\mu$  в момент его взаимодействия с молекулой среды. Природа распорядилась так, что в мезомолекулярных комплексах  $(dt\mu)dee$  и

( $dd\mu$ ) $dee$  такой уровень есть; это обусловлено существованием слабосвязанного возбужденного состояния ( $J=1, v=1$ ) в мезононах  $d\mu$  и  $dd\mu$ . Правда (см. табл. 14.1) в ионе  $dd\mu$  он лежит значительно глубже и, следовательно, в резонансную область энергий в молекуле ( $dd\mu$ ) $dee$  попадают состояния с более высокими квантовыми числами, чем в молекуле ( $d\mu$ ) $dee$ . Значит, образование таких состояний в столкновениях  $d\mu + D_2$  требует более серьезной перестройки структуры сталкивающихся объектов, и поэтому в конечном счете скорость образования мезомолекул  $dd\mu$  значительно уступает рекордной величине  $\lambda_{d\mu}$ . Сравним:  $\lambda_{d\mu, d} = 4 \cdot 10^8 \text{ c}^{-1}$ ,  $\lambda_{dd\mu, d} (30 \text{ K}) = 5 \cdot 10^4 \text{ c}^{-1}$ ,  $\lambda_{dd\mu, d} (300 \text{ K}) = 3 \cdot 10^6 \text{ c}^{-1}$ .

Итак, идея резонансного механизма дает ответ на два фундаментальных вопроса физики  $\mu$ -катализа: о причине исключительно высокой скорости образования мезомолекул  $d\mu$  в D/T-смесях и о природе температурной зависимости вероятности образования мезомолекул. Вдумаемся в цифры: один градус Кельвина — это приблизительно  $10^{-4}$  эВ. Значит, весь интервал температур  $T = 25 \div 400 \text{ K}$ , показанный на рис. 14.1, — это всего лишь 0,05 эВ. Отсюда видно, с какой высокой точностью нужно знать положение резонансного уровня, чтобы теоретически предсказать температурную зависимость катализа. Современные расчеты энергетических спектров и волновых функций мезомолекул проводятся так, что в них кроме кулоновского взаимодействия принимаются во внимание неточность ядер, сверхтонкие взаимодействия, поляризация вакуума и другие эффекты. Наиболее точные из таких расчетов приближаются к уровню требований эксперимента. Так, положение уровня ( $J=1, v=1$ ) в мезоине  $dd\mu$ , если его получить исходя из экспериментальных данных о температурной зависимости параметра  $\lambda_{dd\mu}(T)$ , — это  $\epsilon_{11} = 1,9659 \pm 0,0003$  эВ; лучшие же теоретические значения, достигнутые в расчетах разными методами, составляют 1,9654 и 1,9668 эВ.

Вернемся к рис. 14.2. На схеме не отражен переход мезоиона  $d\mu$  из состояния  $J=1, v=1$ , в котором он образовался, в ниже лежащие состояния. Происходит это очень быстро, за время порядка  $10^{-12}$  с, посредством одноступенчатого или многоступенчатого (с выбросом нескольких электронов) оже-перехода. Ядерная реакция синтеза  $d\mu \rightarrow \alpha + n + \mu^-$  происходит, когда мезоин находится либо в возбужденном состоянии  $J=0, v=1$ , либо в основном состоянии  $J=0, v=0$ . Это тоже очень быстрый процесс: так, ширина  $\Gamma_f$  уровня  $J=0, v=0$ , связанная с ядерным синтезом, составляет около  $10^{-3}$  эВ (т. е. скорость самой ядерной реакции с этого уровня мезоиона  $\lambda_f \approx 10^{12} \text{ c}^{-1}$ ). Скорость реакции синтеза непосредственно из начального состояния  $J=1, v=1$  значительно ниже, так как здесь к кулоновскому барьеру между ядрами  $d$  и  $t$  добавляется центробежный барьер  $\hbar^2 J(J+1)/2\mu R^2$ , медленный процесс ядерного синтеза из состояния  $J=1, v=1$  не может конкурировать с оже-переходами из этого состояния вниз.

Итак, пройдя цепь разнообразных процессов, закончившихся ядерной реакцией, мюон снова свободен. Цикл  $\mu$ -катализа завер-

шился. Далее — опять замедление мюона, его атомный захват и т. д. Мы видим, что продолжительность всего цикла  $\tau_c$  определяется скоростью двух процессов — перехвата мюона от атома  $d\mu$  к атому  $t\mu$  и образования мезомолекулы  $d\mu$ ; все остальные процессы идут на несколько порядков быстрее и вклада в  $\tau_c$  практически не дают. Поэтому среднее время  $d\mu$ -цикла в D/T-смеси можно записать в виде

$$\tau_c = \frac{1}{\lambda_c} \approx \frac{C_d}{\lambda_{dt} C_t} + \frac{1}{\lambda_{dt} C_d}, \quad (14.20)$$

где  $C_d$  и  $C_t$  — относительные концентрации ядер дейтерия и трития ( $C_d + C_t = 1$ ). При сравнимых концентрациях  $C_d$  и  $C_t$  величина  $\tau_c$  порядка  $10^{-8}$  с. За это время мюон мог бы успеть двести раз совершить цикл катализа, а выделенная при этом энергия ядерного синтеза составила бы более 3 ГэВ на один мюон. Неприятность, однако, в том, что мы забыли об одном малоприметном на первый взгляд эффекте — так называемом *прилипании мюона*.

В рассматриваемом процессе ядерного синтеза наряду с основным трехчастичным каналом  $\alpha + n + \mu^-$  реализуется, хотя и со значительно меньшей вероятностью, также двухчастичный канал  $\mu \text{He}^+ + n$ :



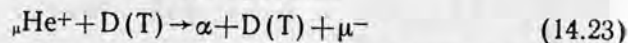
Здесь мюон, «прилипая» к  $\alpha$ -частице, образует вместе с ней мюонный ион гелия  $\mu \text{He}^+$  — типичную водородоподобную систему. Энергия синтеза ( $Q = 17,6$  МэВ) делится в двухчастичном канале между ионом  $\mu \text{He}^+$  и нейтроном обратно пропорционально их массам, так что начальная кинетическая энергия иона  $\mu \text{He}^+$  составляет около 3,5 МэВ. С учетом эффекта прилипания (sticking) среднее число циклов катализа  $Y$  — уже не просто отношение скорости прохождения цикла  $\lambda_c$  к скорости спонтанного распада мюона  $\lambda_0$ , а несколько более сложное выражение:

$$Y = \frac{\lambda_c}{\lambda_0 + \lambda_c \omega_s}, \quad (14.22)$$

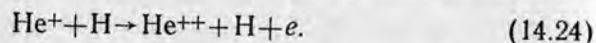
куда входит также коэффициент прилипания  $\omega_s$  — относительная вероятность реакции  $d\mu \rightarrow \mu \text{He}^+ + n$  в акте  $d\mu$ -синтеза. С учетом реального соотношения между скоростями  $\lambda_c$  и  $\lambda_0$  видно, что даже при совсем малом значении  $\omega_s = 0,5\%$  эффект прилипания вдвое снижает эффективность катализа. В связи с этим экспериментальные и теоретические исследования эффекта прилипания, а также поиск и исследование механизмов, способных как-то ослабить этот эффект, составили в последние годы одно из самых главных направлений во всей проблеме  $\mu$ -катализа.

К ослаблению эффекта прилипания приводит то обстоятельство, что быстрый ион  $\mu \text{He}^+$  может в процессе своего замедления поте-

рять мюон в столкновениях с ядрами молекул среды и тогда этот мюон продолжит свою роль катализатора ядерного синтеза. Чтобы вычислить теоретически вероятность такой реактивации мюона, надо иметь в своем распоряжении большой ряд данных о сечениях разнообразных элементарных процессов с участием иона  ${}^4\text{He}^+$ . Для этого используются как прямые (хотя и очень громоздкие) квантовомеханические расчеты, так и косвенные методы. Например, если срыв мюона (стриппинг) происходит из основного состояния иона  ${}^4\text{He}^+$ , то сечение этого процесса



можно найти методом масштабирования, используя прямые экспериментальные данные о сечении такого же процесса с обычным ионом гелия:



Однако в действительности реактивация мюона — это сложный каскадный процесс, включающий, помимо собственно срыва мюона, также возбуждение и девозбуждение иона  ${}^4\text{He}^+$  в столкновениях, штарковское смешивание его состояний в кулоновском поле ядер среды, спонтанные радиационные переходы с его возбужденных уровней, внешний (с передачей энергии возбуждения электрону среды) оже-эффект, — и все это одновременно с обычным ионизационным торможением иона  ${}^4\text{He}^+$  как тяжелой заряженной частицы. Особое место среди таких процессов занимает срыв мюона с возбужденных орбит иона  ${}^4\text{He}^+$ , поскольку сечения такого срыва (подобно геометрическому сечению самого иона) быстро растут с увеличением главного квантового числа орбиты; при этом само возбуждение иона  ${}^4\text{He}^+$  индуцируется в ходе его столкновений, предшествующих срыву. Расчеты показывают, что при плотности жидкого водорода замедление иона  ${}^4\text{He}^+$  от начальной скорости до скоростей, где срыв оказывается уже невозможным просто по энергетическим соображениям, происходит в течение примерно  $10^{-11}$  с и за это время до 35—40% мюонов, оказавшихся после реакции синтеза (14.21) в связанных состояниях иона  ${}^4\text{He}^+$ , высвобождаются для катализа. При меньших плотностях, в газовых смесях, доля таких мезонов — так называемый коэффициент реактивации  $R$  — несколько меньше.

Итоговая потеря мюонов для катализа с учетом как его прилипания к  $\alpha$ -частице, так и реактивации в процессе замедления иона  ${}^4\text{He}^+$  рассчитывается по формуле

$$\omega_s = \omega_s^0(1 - R), \quad (14.25)$$

где  $\omega_s^0$  — начальный, а  $\omega_s$  — конечный коэффициенты прилипания. Согласно расчетам последнего времени, начальный коэффициент прилипания  $\omega_s^0$  в реакции  $dt\mu$ -синтеза составляет  $0,88 \div 0,89\%$ . С учетом  $R = 0,30 \div 0,35$  это дает для конечного коэффициента прилипания  $\omega_s|_{\text{теор}} = 0,57 \div 0,62\%$ .

Коэффициент прилипания измеряется тремя способами: а) по выходу нейтронов; б) путем регистрации заряженных продуктов ядерного синтеза; в) по выходу характеристического рентгеновского излучения, возникающего при заселении состояния  $2p$ , а также более высоких состояний мезоиона  ${}^4\text{He}^+$  в ходе его замедления. Хотя между значениями  $\omega_s$ , полученными в разных группах и разными методами, пока нет согласия, большинство данных для  $dt\mu$ -синтеза попадает в интервал  $\omega_s|_{\text{экс}} = 0,4 \div 0,5\%$ . Таким образом, с точки зрения итоговой эффективности катализа фактическая ситуация лучше, чем предсказывает сегодняшняя теория.

Поиск условий, в которых коэффициент реактивации  $R$  можно было бы как-то еще увеличить, а  $\omega_s$  соответственно уменьшить, продолжается. В этом направлении проводятся теоретические исследования возможностей  $\mu$ -катализа в плазменной среде, рассчитываются варианты повышения реактивации мюона путем воздействия на образующийся ион  ${}^4\text{He}^+$  дополнительных ускоряющих полей и т. п. В связи с заманчивой перспективой использовать  $\mu$ -катализ в ядерной энергетике возникло большое число новых и интересных технических вопросов. Надо учитывать, что выделение энергии порядка 2,5 ГэВ, что соответствует достигнутому значению 150 для числа циклов на один мюон, само по себе далеко не решает проблемы, поскольку на «производство» одного мюона на современных ускорителях уходит не менее 8 ГэВ. Надежду вселяют теоретические разработки «гибридных» систем, в которых  $\mu$ -каталитический реактор мыслится совмещенным с электроядерным бридингом. По первым прогнозам, эффективность такой системы в целом может быть достаточно высокой, если использовать ее не только для непосредственного получения энергии, но и одновременно с целью наработки горючего для обычных ядерных реакторов.

\* \* \*

Перевернута последняя страница книги. Возвращаясь к прочитанному, констатируем, что исследование механизмов взаимодействия частиц и излучений с веществом было бы невозможно без привлечения в широком объеме современной теории элементарного акта столкновения (электрона или мюона с атомом, нейтрона или  $\gamma$ -кванта с ядром и т. п.); речь идет прежде всего о квантовой теории столкновений. Важен и другой вывод: ядерные и атомные аспекты самых разнообразных процессов взаимодействия частиц и излучений с веществом неразрывно связаны между собой. С учетом сказанного сделаем пояснения к общему плану курса, который был дан в предисловии.

Вторая часть пособия будет посвящена методам теории столкновений. В отличие от курсов теоретической физики, мы не будем излагать, как строится аппарат теории, а покажем методы теории столкновений с другой стороны — в их использовании применительно к сегодняшним проблемам физики микромира; во мно-

гих случаях мы увидим большое сходство в описании явлений совсем разного масштаба — атомных, ядерных и даже субъядерных. Наконец, в третьей части курса, используя результаты исследований в области ядерных реакций, атомных столкновений и взаимодействия элементарных частиц между собой, мы займемся одной из фундаментальных задач современной физики — о свойствах ядерного вещества, в том числе (что важно не только для самой физики ядра, но и для физики элементарных частиц, для астрофизики и космологии) ядерного вещества в экстремальных условиях сверхвысоких плотностей и температур.

---

#### РЕКОМЕНДУЕМАЯ ЛИТЕРАТУРА

1. Бор Н. Прохождение заряженных частиц через вещество. М., 1950.
2. Матвеев А. Н. Атомная физика. М., 1989.
3. Мухин К. Н. Экспериментальная ядерная физика. М., 1974. Т. 1; 1983. Т. 2.
4. Балашов В. В., Долинов В. К. Курс квантовой механики. М., 1982.
5. Балашов В. В. Квантовая теория столкновений. М., 1985.
6. Парилис Э. С., Кишиневский Л. М., Битенский И. С. и др. Атомные столкновения в газах и на поверхности твердого тела. Ташкент. 1988.
7. Кумахов М. А., Комаров Ф. Ф. Излучение заряженных частиц в твердом теле. Минск, 1985.
8. Оцуки Е.-Х. Взаимодействие заряженных частиц с твердыми телами: М., 1985.
9. Кириллов-Угрюмов В. Г., Никитин Ю. П., Сергеев Ф. М. Атомы и мезоны. М., 1980.