

УДК 539.186.22

doi: 10.26907/2541-7746.2020.2.211-222

ПОЛУКЛАССИЧЕСКИЙ ПОДХОД, ВОСПРОИЗВОДЯЩИЙ НА АСИМПТОТИКЕ ФОРМУЛУ ГАЙТЛЕРА ДЛЯ ФОТОИОНИЗАЦИИ АТОМА

А.М. Шаймарданов, В.Н. Кауров, Е.А. Петрова

Военно-космическая академия имени А.Ф. Можайского,

г. Санкт-Петербург, 197198, Россия

Аннотация

В работе развит и применен корпускулярно-волновой метод описания фотоионизации атома потоком фотонов в видимой или рентгеновской областях. Из найденной вероятности фотоионизации на асимптотике получили искомую приближенную формулу Гайтлера для вероятности фотоионизации атома в ее окончательном виде, содержащем угловое распределение фотоэлектронов. Рассмотрен также вклад релеевского рассеяния, сопровождающего фотоэффект.

Ключевые слова: фотон, фотоионизация атома, электрон, энергия связи, импульс, вероятность фотоионизации

Введение

Полуклассический корпускулярно-волновой метод, разработанный для описания упругого и неупругого рассеяний фотонов на электронах атома, в настоящей работе применяется для определения вероятности фотоионизации атома, которая достаточно хорошо изучена. Известна монография [1], в рамках которой освещены подходы в микроскопическом описании взаимодействия фотонов с атомом. Несмотря на существование точных формул для вероятностей фотоионизации в рамках квантовой механики, результаты, полученные с помощью полуклассических методов, позволяют проверить возможности использованного подхода, относящиеся прежде всего к степени удобства использования, точности, простоты и наличия связи с другими известными полуклассическими методами [2–4]. В рамках корпускулярно-волнового дуализма, рассматривая процессы взаимодействия фотонов с электронами и атомами в целом как случайные, вводим, например, понятия вероятностей упругого рассеяния фотона, выбивания электрона из атома как независимых случайных событий. Полученную формулу для полного эффективного сечения эмиссии фотоэлектронов из атома сравниваем затем с аналогичной формулой Гайтлера [5], выведенной с помощью квантовой механики [6]. Сравнивая асимптотики формул и добиваясь их совпадения, предполагаем, что исходные формулы также совпадают с учетом рассматриваемых предположений и наложенных условий.

Квантовая формула Гайтлера для дифференциального эффективного сечения фотоионизации атома в нерелятивистском приближении имеет вид

$$\frac{dP_{\Phi, kv}}{d\Omega} = \frac{4\sqrt{2}}{2} r_0^2 \left(\frac{Z^5}{137^4} \right) \left(\frac{m_0 c^2}{h\nu} \right)^{7/2} (1 + 4\beta_0 \cos \theta) \sin^2 \theta \cos^2 \varphi, \\ w'_{ke} < h\nu < m_0 c^2. \quad (1)$$

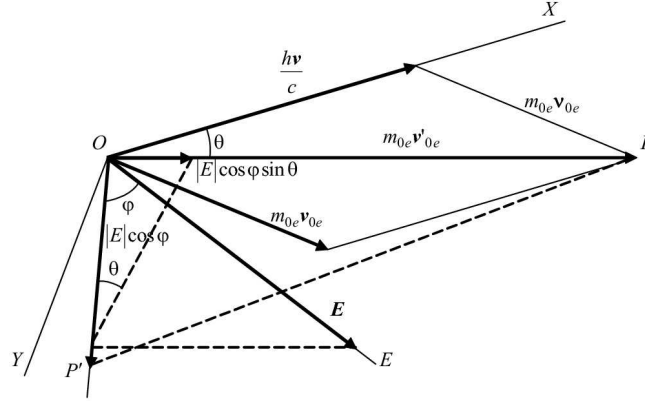


Рис. 1. Импульсная диаграмма для выбивания электрона из атома, соответствующая формуле (2)

Здесь Ω – телесный угол; r_0 – классический радиус Томсона для электрона; Z – порядковый номер ядра атома; e – заряд электрона; m_{0e} – масса покоя электрона; c – скорость света; $h\nu$ – энергия падающего фотона; $\beta_0 = v'_{0e}/c$ – относительная скорость фотоэлектрона; θ – угол в полярной системе координат между векторами импульсов падающего фотона $\chi = h\nu/c$ и импульса электрона после вылета из атома hk'_e , указанный на рис. 1 векторной импульсной диаграммы; k'_e – волновой вектор выбитого электрона, обратный длине волны де-Бройля по величине; k_e – волновой вектор электрона до вылета из атома; φ – угол между вектором напряженности электрического поля \mathbf{E} фотона и проекцией вектора импульса выбитого электрона $m_{0e}v'_{0e}$ на плоскость YEX полярной системы координат согласно рис. 1; w'_{ke} – кинетическая энергия фотоэлектрона.

Уравнение Эйнштейна для фотоэффекта учитывает лишь закон сохранения энергии при фотоэффекте, и на основании этого определяет величину импульса выбитого электрона hk'_e . Потребуем теперь, следуя рассуждениям работы [2], чтобы наряду с законом сохранения энергии удовлетворялся и закон сохранения импульса, поэтому должно выполняться равенство

$$hk_e = hk'_e - \chi. \quad (2)$$

1. Фотоэффект на атоме

В нерелятивистском классическом подходе к задаче фотоионизации рассматриваются только кинетические энергии электрона и атома, без учета энергии покоя. После выбивания электрона ион с $Z - 1$ электроном не остается в основном состоянии, а получает «дырку» по аналогии с зонной теорией твердого тела в m -м состоянии, где раньше находился связанный электрон. Для указания этого факта масса иона отмечается отрицательным знаком: $(-m)$. Выбитый электрон приобретает кинетическую энергию w'_e .

С учетом релятивизма закон сохранения энергии для процесса поглощения фотона энергией $h\nu$ на атоме с массовым числом A и зарядом eZ с вылетом электрона имеет вид

$$h\nu + m_{0,Z}c^2 + w_Z = m_{0e}c^2 + w'_e + m_{0,Z-1,(-m)}c^2 + w_{Z-1,m} + E'^{\text{pot}}. \quad (3)$$

Здесь w_Z – начальная кинетическая энергия атома, $w_{Z-1,m}$ – кинетическая энергия иона остатка.

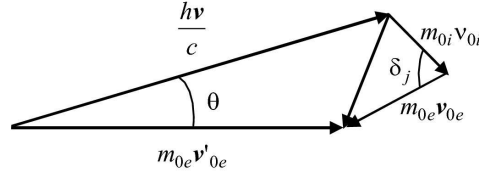


Рис. 2. Импульсная диаграмма, учитывающая добавление импульса иона под углом δ_j к импульсу электрона

Далее введем энергию связи $\varepsilon_{s\nu}$, выраженную через энергии покоя иона $m_{0,Z-1}c^2$, электрона $m_{0e}c^2$ и атома $m_{0,Z}c^2$

$$(m_{0,Z-1}c^2 + m_{0e}c^2) - m_{0,Z}c^2 = \varepsilon_{s\nu}. \quad (4)$$

Эту энергию необходимо отличать от энергии ионизации атома I , которая входит в уравнение Эйнштейна для фотоионизации атома

$$h\nu = I + w'_e. \quad (5)$$

Здесь $I = Z^2 \cdot 137^{-2} m_{0e}c^2/2$ для водородоподобного атома. Падающий на атом фотон совершает работу по ионизации атома и сообщает выбитому электрону кинетическую энергию w'_e . Кроме того, введена потенциальная энергия E'^{pot} взаимодействия электрона с ионом, остающимся в процессе выбивания электрона. С учетом (4) запишем (3) как

$$h\nu = w'_e + (w_{Z-1,m} - w_Z) + \varepsilon_{s\nu} + (m_{0,Z-1,(-m)} - m_{0,Z-1})c^2 + E'^{\text{pot}}.$$

Фотон придает электрону избыток кинетической энергии Δw_e над его кинетической энергией $w_{e,m}$ в связанном состоянии, поэтому $w'_e = \Delta w_e + w_{m,e}$.

Аналогичный смысл имеет и потенциальная энергия электрона: $E'^{\text{pot}} = \Delta E^{\text{pot}} + E_m^{\text{pot}}$.

Для удобства введем обозначение для разности масс иона с «дыркой» и иона в основном состоянии: $\Delta m_{0,Z-1,(-m)} = m_{0,Z-1,(-m)} - m_{0,Z-1}$.

2. Учет вклада иона отдачи в импульсную диаграмму

В случае, когда мы имеем дело с потоком фотонов, падающих на мишень, состоящую из большого количества одинаковых атомов, и не интересуемся распределением их импульсов в пространстве, закон сохранения энергии для потока независимых частиц получится простым умножением (3) на количество частиц в потоке N_1 . В общем случае, учитывая вклад в энергию иона отдачи, мы должны просуммировать (3) с учетом различного угла между ионом и электроном даже при неизменной энергии пары падающего и рассеянного фотонов. Произведем учет вклада иона отдачи в энергию, воспользовавшись диаграммой закона сохранения импульса. Первая диаграмма (см. рис. 1) соответствует случаю отсутствия вклада иона отдачи. Векторы $h\nu/c$ и $m_{0e}v'_0e$ в большом треугольнике не меняются, как и угол θ при изменении числа фотонов.

Из второй диаграммы (рис. 2) в частном случае $w'_e = w_e$ можно оценить кинетическую энергию иона и получить ее выражение $w_{Z-1} = 4w_e m_{0e} \cos^2 \delta_j / m_{0,Z-1}$, из которого следует, что величина кинетической энергии атома отдачи определяется отношением масс покоя электрона и иона, поэтому ею можно пренебречь.

Нумеруя значком суммирования j угол рассеяния δ_j , уравнение закона сохранения энергии можно просуммировать по числу падающих фотонов. В итоге

получим следующий вид закона сохранения энергии для произвольного числа N_1 падающих на мишень фотонов:

$$N_1 h\nu + N_1 w_z = \varepsilon_{sv} N_1 + \sum_{j=1}^{N_1} w_{m,Z-1}(\delta_j, \theta) + N_1 w'_{m,e} + N_1 E_m^{\text{pot}} + N_1 \Delta m_{0,Z-1,(-m)} c^2.$$

Выразим сумму через среднее значение кинетической энергии

$$(N_1/N_1) \sum_{j=1}^{N_1} w_{m,Z-1}(\delta_j, \theta) = N_1 \bar{w}_{m,Z-1}.$$

Таким образом, через сумму произведений среднего значения каждой энергии, входящей в уравнение закона сохранения энергии, на относительное число фотонов в каждом канале, запишется все уравнение. Для удобства черту усреднения можно опустить, подразумевая ее.

3. Учет упругого рассеяния

Добавим в рассмотрение задачи процесс когерентного рассеяния фотонов на атомах без изменения их длины волны. В этом случае необходимо добавить не только энергию налетающих фотонов, но и полную энергию атомов, на которых происходит рассеяние как во входной, так и выходной канал. Включим сначала в левую и правую части уравнения энергию когерентно рассеянных фотонов $N_S h\nu$, что не изменит равенства. Обозначим общее число фотонов во входном канале через N_0 . Объединяя когерентно рассеянные фотоны с вызвавшими фотоионизацию в левой части уравнения, получим ($N_0 = N_S + N_1$):

$$N_0 h\nu = -N_1 w_z + \varepsilon_{sv} N_1 + N_1 w_{z-1}^{(\infty)} + N_1 w_e^{(\infty)} + N_1 E_m^{\text{pot}} + N_S h\nu + N_1 \Delta m_{0,z-1,(-m)}^{(\infty)} c^2. \quad (6)$$

Индекс “ ∞ ” показывает, что электрон и положительный ион находятся на бесконечном расстоянии и взаимодействуют с атомом пренебрежимо слабо.

Будем рассматривать общее число начальных фотонов во входном канале как число независимых случайных событий. После деления уравнения (6) на полное число упавших квантов N_0 правую часть (6) перепишем через частотную вероятность событий, произошедших во входном и выходном каналах взаимодействия.

Обозначим через P_f вероятность фотоионизации, то есть отношение числа выбитых электронов (числа благоприятных событий) к общему числу упавших фотонов при стремлении числа упавших фотонов к бесконечности: $P_f = \lim_{N_0 \rightarrow \infty} N_1/N_0$. Вероятность классического когерентного рассеяния фотонов обозначим как $S_{S,\text{кл}} = \lim_{N_0 \rightarrow \infty} N_S/N_0$. В дальнейшем знак предела будем опускать из-за громоздкости записи отношений. Важно, что для вероятности когерентного рассеяния известна явная зависимость через угол ψ между направлением рассеянного луча и вектором поляризации \mathbf{E} , а также через расстояние R от начала системы координат до точки наблюдения. Если энергия покоя электрона $E_0 = m_0 c^2$, то

$$S_{S,\text{кл}} = e^4 F^2 \sin^2 \psi / (E_0 R^2)^2. \quad (7)$$

Здесь F – атомный фактор, вклад которого хорошо известен [2].

С учетом атомного фактора левую часть соотношения (7) называют вероятностью релейского рассеяния. Полагая F равным единице, получим классическую

формулу рассеяния Герца и Томсона, не учитывающую некогерентное рассеяние с измененной частотой.

Для классического дифференциального эффективного сечения фотоионизации из (6) получаем

$$dP_{\text{ф.кл}}/d\Omega = r_0^2 h\nu (1 - (e^2/E_0 R^2)^2 F^2 \sin^2 \psi) \times \\ \times (E'^{\text{pot}} + w'_e{}^{(\infty)} + \Delta w_{z-1}^{(\infty)} + \Delta m_{0,(-m),z-1}^{(\infty)} c^2 + \varepsilon_{s\nu})^{-1}. \quad (8)$$

Для полуклассического случая соответствующее выражение имеет вид

$$dP_{\text{ф.пкл}}/d\Omega = h\nu r_0^2 (1 - (e^2/E_0 R^2)^2 F^2 \sin^2 \psi) \times \\ \times (E'^{\text{pot}} + w'_e{}^{(\infty)} + \varepsilon_{s\nu})^{-1} (k'_e/k_e)^4 \sin^2 \theta \cos^2 \varphi. \quad (9)$$

По сравнению с (8) здесь отброшена малая сумма двух членов $\Delta w_{z-1}^{(\infty)} + \Delta m_{0,(-m),z-1}^{(\infty)}$, которая при необходимости может быть учтена в дальнейшем. Кроме того, введен множитель $(k'_e/k_e)^4$ перехода от классической теории к квантовой [2] и добавлена угловая зависимость. Полученные результаты соответствуют мгновенному процессу взаимодействия фотона с атомом в основном состоянии. Другой тип взаимодействия фотона с атомом связан с переводом электрона в n -е состояние в атоме с поглощением фотона.

Получив дополнительную энергию, атом перейдет в возбужденное состояние с главным квантовым числом n , в котором находится электрон с отдельной потенциальной и кинетической энергиями движения в поле положительного иона.

4. Вклад возбужденного состояния

Выпишем необходимые уравнения закона сохранения энергии при взаимодействии фотона с атомом в трех случаях.

1. Для упругого рассеяния:

$$h\nu + m_{0,Z} c^2 + w_Z = h\nu + m_{0,Z} c^2 + w_Z.$$

2. Для поглощения фотона с переводом электрона в возбужденное n -е состояние:

$$h\nu + m_{0,Z} c^2 + w_Z = m_{0,(-m),n,Z}^* c^2 + w_{n,Z}^*.$$

Здесь масса покоя возбужденного атома $m_{0,(-m),n,Z}^* c^2$ складывается из массы покоя остающегося положительного иона $m_{0,(-m),Z-1}$, массы покоя электрона и потенциальной энергии взаимодействия электрона с ионом E_n^{pot} : $m_{0,(-m),n,Z}^* c^2 \cong \cong m_{0,(-m),Z-1} c^2 + E_n^{\text{pot}} + m_{0e} c^2$,

Кинетическая энергия возбужденного атома равна сумме кинетических энергий иона и электрона, находящегося в возбужденном n -м состоянии: $w_{n,Z}^* \cong \cong w_{(-m),Z-1} + w_{ne}$. В выражениях для энергий возбужденного атома использован знак приближенного равенства в силу невозможности записать правильную и точную структуру этих выражений.

3. Для фотоионизации атома:

$$N_1 h\nu + N_1 w_z = \varepsilon_{s\nu} N_1 + N_1 w'_e{}^{(\infty)} + N_1 w_{z-1}^{(\infty)} + N_1 \Delta m_{0,(-m),z-1}^{(\infty)} c^2 + N_1 E^{(\infty)\text{pot}}.$$

В последнем выражении произведено умножение уравнения закона сохранения для одного фотона на число вызвавших ионизацию N_1 .

Произведем умножение первого уравнения на число упруго рассеянных фотонов N_y , второго на число поглощенных с переводом электрона в n -е состояние N_n и сложим левые и правые части:

$$\begin{aligned} N_y(h\nu + m_{0,Z}c^2 + w_Z) + N_n(h\nu + m_{0,Z}c^2 + w_Z) + N_1h\nu + N_1w_z = \\ = \varepsilon_{sv}N_1 + N_1w'_e{}^{(\infty)} + N_1w_{z-1}^{(\infty)} + N_1\Delta m_{0,(-m),z-1}^{(\infty)}c^2 + N_1E^{(\infty)\text{pot}} + \\ + N_y(h\nu + m_{0,Z}c^2 + w_Z) + N_n(m_{0,(-m),n,Z}^*c^2 + w_{n,Z}^*). \end{aligned} \quad (10)$$

Далее вводим суммарное число падающих фотонов

$$N_n = N_y + N_1 + N_n$$

и выражаем число N_n через остальные: $N_n - (N_y + N_1) = N_n$.

Сгруппировав члены, содержащиеся при числах фотонов одного типа, получим алгебраическое уравнение для чисел N_n , N_y , N_1 :

$$\begin{aligned} N_n[(h\nu + m_{0,Z}c^2 + w_Z - (m_{0,(-m),n,Z}^*c^2 + w_{n,Z}^*)] + \\ + N_y[-h\nu - m_{0,Z}c^2 - w_Z + (m_{0,(-m),n,Z}^*c^2 + w_{n,Z}^*)] - \\ - N_1[\varepsilon_{sv} + w'_e{}^{(\infty)} + w_{z-1}^{(\infty)} + \Delta m_{0,(-m),z-1}^{(\infty)}c^2 + E^{(\infty)\text{pot}} + (m_{0,(-m),n,Z}^*c^2 + w_{n,Z}^*)] = 0. \end{aligned}$$

Из этого соотношения выразим число фотонов, вызвавших фотоионизацию, N_1 через остальные числа – число упругого рассеяния N_y и суммарное число фотонов N_n :

$$\begin{aligned} \{N_n[(h\nu + m_{0,Z}c^2 + w_Z - (m_{0,(-m),n,Z}^*c^2 + w_{n,Z}^*)] + \\ + N_y[-h\nu - m_{0,Z}c^2 - w_Z + (m_{0,(-m),n,Z}^*c^2 + w_{n,Z}^*)]\} / [\varepsilon_{sv} + w'_e{}^{(\infty)} + w_{z-1}^{(\infty)} + \\ + \Delta m_{0,(-m),z-1}^{(\infty)}c^2 + E^{(\infty)\text{pot}} - (m_{0,(-m),n,Z}^*c^2 + w_{n,Z}^*)] = N_1 \end{aligned}$$

Полученное выражение позволяет записать связь между дифференциальными эффективными сечениями фотоионизации, возбуждения электрона в связанное состояние и сечением упругого когерентного рассеяния, определенным формулой (7). Эта связь запишется более компактно, если предположить, что мы не учитываем вклад упругого рассеяния. В таком случае искомое дифференциальное сечение фотоионизации принимает вид

$$\begin{aligned} dP_{\text{ф.пкл}}/d\Omega = r_0^2 h\nu (\Delta E^{(\infty)\text{pot}} - (\Delta w_{z-1}^{(\infty)} + \Delta m_{0,(-m),z-1}^{(\infty)}c^2))^{-1} \times \\ \times [(h\nu + m_{0,Z}c^2 + w_Z - (m_{0,(-m),n,Z}^*c^2 + w_{n,Z}^*))k'_e/k_e]^4 \sin^2 \theta \cos^2 \varphi. \end{aligned} \quad (11)$$

Здесь $\Delta E^{(\infty)\text{pot}}$ означает разность полных энергий электрона в n -м состоянии и на бесконечности.

Выражение в квадратных скобках числителя может быть записано через энергию связи согласно её определению (4), а также формул, определяющих кинетическую и потенциальную энергии возбужденного состояния атома. Введем обозначение для квадратной скобки

$$M = [(h\nu + m_{0,Z}c^2 + w_{k,Z}) - (m_{0,(-m),n,Z}^*c^2 + w_{n,Z}^*)]/h\nu. \quad (12)$$

После преобразования запишем для M выражение

$$M = 1 - (\Delta w_{m,Z-1} + \Delta m_{0,Z-1,(-m)} + \varepsilon'_{sv})/h\nu,$$

которое будет использовано в дальнейшем.

Здесь ε'_{sv} отличается от обычной энергии связи ε_{sv} малой добавкой $\varepsilon'_{sv} = \varepsilon_{sv} + \Delta m_{0,Z} c^2$.

В этом выражении добавка имеет вид $\Delta m_{0,Z} c^2 = m_{0,Z} c^2 - m_{0,Z-1} c^2$ и является достаточно малой.

Для нахождения начальной кинетической энергии электрона w_e используем упрощенный вариант записи закона сохранения импульса, примененный в работе Зоммерфельда [2], в виде

$$h\nu/c + m_{0e} v_e = m_{0e} v'_e. \quad (13)$$

На рис. 1 показана соответствующая векторная диаграмма.

В случае, когда начальная кинетическая энергия атома равна нулю, из диаграммы импульсов, соответствующей уравнению (13) для квадрата импульса начального электрона имеем

$$(m_{0e} v_e)^2 = (h\nu/c)^2 + (m_{0e} v'_e)^2 - 2 (h\nu/c) (m_{0e} v'_e) \cos \theta,$$

а для кинетической энергии начального электрона – выражение

$$w_e = (2m_{0e}^{-1}) \left\{ (h\nu/c)^2 + (m_{0e} v'_e)^2 - 2 (h\nu/c) (m_{0e} v'_e) \cos \theta \right\}.$$

Выразим внутреннее волновое число k через энергию начального фотона $h\nu$ и другие характеристики процесса фотоионизации, которые поддаются определению и не являются скрытыми, в отличие от k . Для этого рассмотрим величину, обратную начальному импульсу электрона в атоме в четвертой степени и входящую множителем в формулу (4.), выписав ее отдельно:

$$(hk)^{-4} = \left[(h\nu/c)^2 + (m_{0,e} v'_e)^2 - 2 (h\nu/c) (m_{0,e} v'_e) \cos \theta \right]^{-2}.$$

Преобразуем правую часть, вынося сумму первых двух членов за скобку. Разложим в ряд выражение в скобке, содержащей единицу, ограничившись первым членом разложения:

$$\begin{aligned} (hk)^{-4} &= \left[(h\nu/c)^2 + (m_{0,e} v'_e)^2 \right]^{-2} \left[1 - 2h\nu (hk'_e) \cos \theta \left[(h\nu/c)^2 + (m_{0e} v'_e)^2 \right]^{-1} \right]^{-2} = \\ &= \left[(h\nu/c)^2 + (m_{0,e} v'_e)^2 \right]^{-2} \left[1 + 4h\nu (hk'_e) \cos \theta \left[(h\nu/c)^2 + (m_{0e} v'_e)^2 \right]^{-1} \right]. \end{aligned}$$

Обозначим множитель при косинусе внутри скобки, содержащей единицу, как

$$\beta = (h\nu/c) (hk'_e) / \left[(h\nu/c)^2 + (m_{0e} v'_e)^2 \right] \cong (m_{0e} c^2 / h\nu) (v'_e / c).$$

После произведенных преобразований формула (6) для случая первого процесса выбивания фотона из основного состояния запишется как

$$\begin{aligned} dP_{\text{ф.пкл1}} / d\Omega &= \\ &= \frac{h\nu (hk'_e)^4 (1 + 4\beta \cos \theta) \sin^2 \theta \cos^2 \varphi}{\left(E'^{\text{pot}} + w_e^{(\infty)} + \Delta w_{z-1}^{(\infty)} + \Delta m_{0,(-m),z-1}^{(\infty)} c^2 + \varepsilon_{sv} \right) \left[(h\nu/c)^2 + (m_{0e} v'_e)^2 \right]^2}. \quad (14) \end{aligned}$$

Запишем уравнение Эйнштейна в виде

$$h\nu = I + (hk'_e)^2 / 2m_{0e}. \quad (15)$$

Пользуясь уравнением Эйнштейна и связью $(hk'_e) = m_{0e}v'_e$, преобразуем квадратную скобку в знаменателе (14) к виду

$$\left[(h\nu/c)^2 + (m_{0e}v'_e)^2 \right]^2 = \left[(h\nu/c)^2 + 2m_{0e}(h\nu - I) \right]^2. \quad (16)$$

Преобразуем правую часть (16), вынося за скобку члены, не содержащие энергию ионизации

$$\begin{aligned} \left[(h\nu/c)^2 + 2m_{0e}(h\nu - I) \right]^2 &= \\ &= \left[(h\nu/c)^2 + 2m_{0e}(h\nu) \right]^2 \left[1 - 2m_{0e}I[(h\nu/c)^2 + 2m_{0e}h\nu]^{-1} \right]^2. \end{aligned} \quad (17)$$

Перевернув обе части равенства (17), разложим последний множитель в (17) в ряд, ограничившись первым членом разложения:

$$\left[1 - 2m_{0e}I[(h\nu/c)^2 + 2m_{0e}h\nu]^{-1} \right]^{-2} = \left[1 + 4m_{0e}I[(h\nu/c)^2 + 2m_{0e}h\nu]^{-1} \right].$$

Введем обозначение $a = E'^{\text{pot}} + \Delta w_{z-1}^{(\infty)} + \Delta m_{0,(-m),z-1}^{(\infty)} c^2 + \varepsilon_{s\nu}$.

Учитывая произведенные преобразования, формулу (9) удобно преобразовать к промежуточному виду, не зависящему от углов:

$$\begin{aligned} dP_{\text{f.пк.л1}}/d\Omega \cong r_0^2 h\nu (hk'_e)^4 [(h\nu/c)^2 + 2m_{0e}(h\nu)]^{-2} (w'_e + a)^{-1} \times \\ \times \left[1 + 4m_{0e}I[(h\nu/c)^2 + 2m_{0e}h\nu]^{-1} \right]. \end{aligned} \quad (18)$$

В таком случае множитель $(w'_e + a)^{-1} = (h\nu - I + a)^{-1}$ легко преобразуется к виду

$$(w'_e + a)^{-1} = (h\nu + a - I)^{-1} = (h\nu + a)^{-1} [1 - (h\nu + a)^{-1} I]. \quad (19)$$

Подставим (19) в формулу (18) и после перемножения скобок, содержащих единицу, оставим в результате только один член, содержащий квадрат энергии ионизации. Суммой остальных трех членов пренебрегаем в силу ее малости.

Дифференциальное эффективное сечение фотоионизации для случая обычного однократного процесса приобретает вид

$$dP_{\text{f.пк.л1}}/d\Omega = r_0^2 h\nu (hk'_e)^4 4m_{0e}I^2 (h\nu + a)^{-2} [(h\nu/c)^2 + 2m_{0e}h\nu]^{-3}. \quad (20)$$

Рассмотрим случай, когда энергия $(h\nu)$ заключена в интервале $a > h\nu < 2m_{0e}c^2$. При этом знаменатель в (20) приобретет значение $a^2 (h\nu/c)^6$. Для дифференциального эффективного сечения фотоионизации получаем новую оценку пока без учета угловых зависимостей

$$dP_{\text{ф.пк.л1}}/d\Omega \approx r_0^2 4(m_{0e}c^2)^5 Z^4 / a^2 137^4 (h\nu)^3.$$

Умножим и разделим выражение на hk'_e и справа произведем некоторые тождественные преобразования, в результате получим

$$dP_{\text{ф.пк.л1}} \approx d\Omega r_0^2 4(m_{0e}c^2)^5 (hk'_e) Z^4 / a^2 137^4 (h\nu)^3 \sqrt{2m_{0e}h\nu}. \quad (21)$$

Выделив отношение энергий электрона и фотона в степени $7/2$, импульсов электрона и фотона, домножим правую часть полученной формулы на сечение томсоновского рассеяния фотона на атоме σ_a и на количество электронов в атоме Z .

В итоге получим полное эффективное сечение для эмиссии электронов во всех направлениях – приближенную формулу Гайтлера для случая, когда электрон выбивается из основного состояния:

$$P_{\text{ф.пкл1}} = 32/3\pi\sqrt{2}r_0^2(m_0ec^2/a)^2Z^5(hk'_e/2m_0ec)(m_0ec^2/h\nu)^{7/2}137^{-4}. \quad (22)$$

Процедура упрощения получения результата (22) умножением (21) на σ_a эквивалентна на самом деле интегрированию правой части по угловым переменным, что будет обсуждено позднее.

Рассмотрим асимптотику вероятности сложного процесса – влияния канала возбуждения электрона на вероятность фотоионизации. Проанализируем сначала вклад части формулы для вероятности, которая не содержит квадрата синуса угла, соответствующего вкладу когерентного упругого рассеяния. Из (11) следует, учитывая обозначение (12) для M :

$$dP_{\text{ф.пкл2}}/d\Omega = r_0^2h\nu(hk'_e)^4(1+4\beta\cos\theta)M[\Delta E_{n,m}^{(\infty)\text{pot}} + w'_e]^{-1} \times \\ \times [(\hbar\nu/c)^2 + (m_0ev'_e)^2]^{-2} \sin^2\theta \cos^2\varphi. \quad (23)$$

На асимптотике, используя (15), окончательное выражение для M получим, оставляя лишь член, содержащий I^2 :

$$M = m_0eI^2(hk'_e)^{-3}(\hbar\nu)^{-1/2}(2m_0e)^{1/2} \quad (24)$$

Тогда, подставив (24) в исходную вероятность (23), получим, отбрасывая $\Delta E_{n,m}^{(\infty)\text{pot}}$:

$$dP_{\text{ф.пкл2}}/d\Omega = r_0^2(hk'_e)m_0eI^2(1+4\beta\cos\theta)(2m_0eh\nu)^{1/2}w_e^{-1} \times \\ \times [(\hbar\nu/c)^2 + (m_0ev'_e)^2]^{-2} \sin^2\theta \cos^2\varphi. \quad (25)$$

Используя явное выражение для энергии ионизации I , формулу Эйнштейна (5), а также связь $(hk'_e)^2/2m_0e = w'_e$, преобразуем формулу (25), пренебрегая членом $(m_0ev'_e)^2$ в квадратных скобках знаменателя. В результате упрощений формула (25) принимает вид

$$dP_{\text{ф.пкл2}} = r_0^22m_0e^4c^4Z^4(m_0ec^2)^2 \times \\ \times (1+4\beta\cos\theta)\sqrt{2m_0e}/(hk'_e)(\hbar\nu)^{7/2}137^4 \sin^2\theta \cos^2\varphi d\Omega. \quad (26)$$

Выделив отношения энергий электрона и фотона в степени 7/2, импульсов электрона и фотона в первой степени, проинтегрируем (26) по угловым переменным. Результатом интегрирования является множитель $\frac{8}{3}\pi$ [2]. С учетом r_0^2 в итоге получим умножение (26) на эффективное сечение для томсоновского рассеяния фотона на атоме $\sigma_a = 8\pi r_0^2/3$. Распространим «закон подобия» Джонсона [7–9] для коэффициентов поглощения излучения, утверждающий, что атомный коэффициент поглощения пропорционален электронному с коэффициентом пропорциональности Z для любых длин волн и элементов, на фотоионизацию. При этом дифференциальное сечение фотоионизации на Z электронах атома будет в Z раз больше соответствующего сечения на водородоподобном атоме.

Дополнительное умножение (26) на количество электронов в атоме Z дает тем самым приближенную формулу, отличающуюся от формулы Гайтлера наличием множителя импульса электрона для случая, когда электрон выбился из промежуточного состояния в непрерывное:

$$P_{\text{ф.пкл2}} = 4\sqrt{2}\pi r_0^2 m_0ec(m_0ec^2)^{7/2} Z^5/3(hk'_e)(\hbar\nu)^{7/2}137^4. \quad (27)$$

Более точная запись квадратной скобки в (25) через отношения энергий покоя и кинетической энергии электрона к энергии фотона имеет вид:

$$[(h\nu/c)^2 + (m_0e v'_e)^2]^{-2} = [(h\nu/2m_0e c^2) + w'_e/h\nu]^{-2} h\nu^{-2} (2m_0e)^{-2}. \quad (28)$$

Из (28) следует, что формула (27) справедлива для энергий фотона в области $m_0e c^2 \gg h\nu > w'_e$. Произведение вероятностей, определяемых формулами (22) и (27), соответствует вероятности одновременных независимых событий. Среднее геометрическое из произведения этих величин уже не содержит импульса фотоэлектрона и воспроизводит формулу Гайтлера (1) с достаточной точностью.

Заключение

Новизна предлагаемого подхода заключается в том, что он позволяет связать воедино вероятность фотоионизации, фотовозбуждения электрона в атоме и хорошо известную вероятность релеевского рассеяния, содержащую угловую зависимость. Кроме того, привлечение к рассмотрению релеевского процесса позволяет гарантировать применимость статистического подхода. Достоверность полученных результатов обеспечивается достижением поставленной задачи воспроизведения точной, проверенной на практике формулы для процесса фотоионизации атома, неукоснительным выполнением закона сохранения энергии и импульса в описании процессов взаимодействия частиц. Сравнение результатов стало возможным благодаря переходу в корпускулярно-волновом методе к языку теории вероятности, являющемуся основным в квантовой механике. Возможно применение подхода и к фотоядерным реакциям, поскольку в методе используются только законы сохранения энергии и импульса, справедливые для систем с любым видом взаимодействия, включая и ядерные. Однако лишь тщательное сравнение предложенного подхода с другими, а также с экспериментальными данными может дать ответ о его точности и возможностях применения.

Литература

1. *Амусья М.Я.* Атомный фотоэффект. – М.: Наука, 1987. – 272 с.
2. *Зоммерфельд А.* Строение атома и спектры. Т. 2: Основные задачи квантовой механики. – М.: Гос. изд-во техн.-теорет. лит., 1956. – 696 с.
3. *Блохин М.А.* Физика рентгеновских лучей. – М.: Гос. изд-во техн.-теорет. лит., 1957. – 518 с.
4. *Аристов В.В.* Фотоэффект с точки зрения полуклассической теории // Докл. РАН. – 2009. – Т. 425, № 5. – С. 610–612.
5. *Гайтлер В.* Квантовая теория излучения. – М.: Иностр. лит., 1956. – 491 с.
6. *Блохинцев Д.И.* Основы квантовой механики. – М.: Наука, 1976. – 664 с.
7. *Jönsson E.* Absorptionsmessungen im langwelligen Röntgengebiet und Gesetze der Absorption: Diss. – Uppsala, 1928.
8. *Jönsson E.* Absorption of X-rays in various elements // Nature. – 1927. – V. 120, No 3028. – P. 695. – doi: 10.1038/120695a0.
9. *Kirchner F.* Allgemeine Physik der Röntgenstrahlen // Handbuch der Experimentalphysik, herausgeg. von Wien-Harms. – Leipzig, 1930. – Bd. 24, T. 1. – S. 1–535.

Поступила в редакцию
07.10.2019

Шаймарданов Альберт Миргасимович, кандидат технических наук, преподаватель
25 кафедры

Военно-космическая академия имени А.Ф. Можайского
ул. Ждановская, д. 13, г. Санкт-Петербург, 197198, Россия
E-mail: *albert.shaymardanov@inbox.ru*

Кауров Владимир Николаевич, кандидат технических наук, научный сотрудник
ВИ(НИ)

Военно-космическая академия имени А.Ф. Можайского
ул. Ждановская, д. 13, г. Санкт-Петербург, 197198, Россия
E-mail: *kaurovvn@yandex.ru*

Петрова Елена Альбертовна, инженер 1141 лаборатории 114 кафедры

Военно-космическая академия имени А.Ф. Можайского
ул. Ждановская, д. 13, г. Санкт-Петербург, 197198, Россия
E-mail: *petrova.e.a@inbox.ru*

ISSN 2541-7746 (Print)

ISSN 2500-2198 (Online)

UCHENYE ZAPISKI KAZANSKOGO UNIVERSITETA.
SERIYA FIZIKO-MATEMATICHESKIE NAUKI
(Proceedings of Kazan University. Physics and Mathematics Series)

2020, vol. 162, no. 2, pp. 211–222

doi: 10.26907/2541-7746.2020.2.211-222

A Semiclassical Approach Reproducing Asymptotically the Heitler Formula for Atomic Photoionization

*A.M. Shaimardanov**, *V.N. Kaurov***, *E.A. Petrova****

A.F. Mozhaysky Military-Space Academy, St. Petersburg, 197198 Russia

E-mail: **albert.shaymardanov@inbox.ru*, ***kaurovvn@yandex.ru*, ****petrova.e.a@inbox.ru*

Received July 7, 2019

Abstract

The wave-corpucle method for description of atomic photoionization by a flux of photons in the visible and X-ray range was developed and applied. Using the calculated photoionization probability in the asymptotics, we obtained the desired approximate Heitler formula for atomic photoionization probability in the final form with the angular distribution of photoelectrons. The role of the Rayleigh scattering accompanying the photoemissive effect was considered.

Keywords: photon, atomic photoionization, electron, bond energy, impulse, photoionization probability

Figure Captions

Fig. 1. Impulse diagram for electron release from the atom according to formula (2).

Fig. 2. Impulse diagram allowing for ion impulse addition at angle δ_j to electron impulse.

References

1. Amus'ya M.Ya. *Atomnyi fotoeffekt* [Atomic Photoeffect]. Moscow, Nauka, 1987. 272 p. (In Russian)
2. Sommerfeld A. *Stroenie atoma i spektry* [Atomic Structure and Spectra]. Vol. 2: Main tasks of quantum mechanics. Moscow, Gos. Izd. Tekh.-Teor. Lit., 1956. 696 p. (In Russian)
3. Blokhin M.A. *Fizika rentgenovskikh luchej* [Physics of X-rays]. Moscow, Gos. Izd. Tekh.-Teor. Lit., 1957. 518 p. (In Russian)
4. Aristov V.V. The photoelectric effect in the semiclassical theory. *Dokl. Phys.*, 2009, vol. 54, no. 4, pp. 171–173. doi: 10.1134/S102833580904003X.
5. Heitler W. *Kvantovaya teoriya izlucheniya* [The Quantum Theory of Radiation]. Moscow, Inostr. Lit., 1956. 491 p. (In Russian)
6. Blokhintsev D.I. *Osnovy kvantovoi mekhaniki* [Foundations of Quantum Mechanics]. Moscow, Nauka, 1976. 664 p. (In Russian)
7. Jönsson E. Absorptionsmessungen im langwelligen Röntgengebiet und Gesetze der Absorption. *Diss.* Uppsala, 1928. (In German)
8. Jönsson E. Absorption of X-rays in various elements. *Nature*, 1927, vol. 120, no. 3028, p. 695. doi: 10.1038/120695a0.
9. Kirchner F. Allgemeine Physik der Röntgenstrahlen. In: *Handbuch der Experimentalphysik, herausgeg. von Wien-Harms*. Leipzig, 1930, Bd. 24, T. 1, S. 1–535. (In German)

⟨ **Для цитирования:** Шаймарданов А.М., Кауров В.Н., Петрова Е.А. Полуклассический подход, воспроизводящий на асимптотике формулу Гайтлера для фотоионизации атома // Учен. зап. Казан. ун-та. Сер. Физ.-матем. науки. – 2020. – Т. 162, кн. 2. – С. 211–222. – doi: 10.26907/2541-7746.2020.2.211-222. ⟩

⟨ **For citation:** Shaimardanov A.M., Kaurov V.N., Petrova E.A. A semiclassical approach reproducing asymptotically the Heitler formula for atomic photoionization. *Uchenye Zapiski Kazanskogo Universiteta. Seriya Fiziko-Matematicheskie Nauki*, 2020, vol. 162, no. 2, pp. 211–222. doi: 10.26907/2541-7746.2020.2.211-222. (In Russian) ⟩