

Б. ЯВОРСКИЙ

ИОНИЗАЦИЯ РТУТИ ЭЛЕКТРОННЫМ УДАРОМ

(Представлено академиком С. И. Вавиловым 23 IX 1946)

Дифференциальное поперечное сечение, соответствующее выбрасыванию из атома электрона с определенной энергией $E_k = \frac{k^2 \hbar^2}{8\pi^2 m_0}$ внутри телесного угла $d\sigma$, в направлении (χ, Ψ') относительно первоначального направления падающего электрона определяется выражением (1)

$$I_k d\sigma d\omega dk = \frac{4\pi^2 m_0^2}{h^4} \frac{k'}{k} \left| \sum_s \int \int V \psi_{nlm} \psi_x e^{i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{n}_0 - \mathbf{k}' \cdot \mathbf{n}_1) r_s} d\tau d\tau' \right|^2 d\sigma d\omega dk. \quad (1)$$

При этом ионизирующий атом электрон рассеивается внутри телесного угла $d\omega$ и его импульс изменяется от $\frac{\hbar k}{2\pi}$ до $\frac{(k + dk)\hbar}{2\pi}$.

В этих соотношениях: k и k' — волновой вектор ионизирующего электрона соответственно до и после удара, m_0 — масса электрона, ψ_{nlm} — волновая функция исходного состояния атома, ψ_x — волновая функция, определяющая состояние непрерывного спектра (ионизованного атома).

Применяя формулу Bethe (2) для интегрирования по τ' — объему ударяющего электрона, получим:

$$I_k d\sigma d\omega dk = \frac{64\pi^4 m_0^2 k'^4 \varepsilon^4}{h^4 k K^4} \left| \sum_s \int \int \psi_{nlm}(r_2, r_1) \psi_x(r_2, r_1) \times \right. \\ \left. \times e^{i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{n}_0 - \mathbf{k}' \cdot \mathbf{n}_1) r_s} d\tau_1 d\tau_2 \right|^2 d\sigma d\omega dk. \quad (2)$$

Здесь ε — заряд электрона, $K^2 = k^2 + k'^2 - 2kk' \cos \delta$, δ — угол рассеяния ионизирующего электрона.

Интегрирование производится по τ_1 и τ_2 — объемам валентных атомных электронов.

Проблема выбора подходящих волновых функций такого сложного атома, как ртуть, может быть решена лишь приближенно.

Так, Houston (3) показал, что волновая функция атома ртути в невозбужденном S -состоянии может быть выбрана следующим образом:

$$\psi_s(r_2, r_1) = R_{00}(r_1) R_{00}(r_2) \frac{1}{\sqrt{2}} \{ S_\alpha(1) S_\beta(2) - S_\alpha(2) S_\beta(1) \}, \quad (3)$$

где

$$R_{00}(r) = 1,51 r^{0,87} e^{-0,88r} \left(1 - \frac{0,92}{r} \right), \quad (4)$$

$R_{00}(r)$ — радиальная волновая функция s -электрона в невозбужденном S -состоянии, найденная по методу Слэгера (4). Спиновые функции $S_\alpha(i)$ и $S_\beta(i)$ определяют возможные направления спинов валентных электронов атома ртути. Физическая интерпретация функции (3) следующая: оба валентных электрона находятся в S -состояниях, причем спины каждого из них могут быть ориентированы вдоль некоторого слабого поля и противоположно ему.

При построении волновой функции ионизованного состояния атома ртути можно, повидимому, применить схему, предложенную Эккартом (5) для двухэлектронной проблемы.

Приближение к волновой функции ионизованного атома ртути может быть получено с помощью комбинации произведения двух волновых функций, одна из которых описывает поведение s -электрона (с точностью до спиновых функций) и имеет вид (4), а другая является волновой функцией непрерывного спектра водородоподобного типа по Зоммерфельду (6):

$$\psi_x(r) = \frac{1}{2\pi} \left[\frac{n'}{\pi(1-e^{-2\pi n'})} \right]^{1/2} \frac{e^{ixr}}{\Gamma(1+n)} \int_0^\infty u^n e^{-uJ_0} \{2(ix\xi'u)^{1/2}\} du, \quad (5)$$

где $\xi' = r(1 + \cos \Theta)$, $n = \frac{Z}{ix a_0}$, $n' = in$ при $Z = 1,65$ (эффективный заряд ядра ртути в нормальном состоянии (4)).

Значение $\cos \Theta$ может быть выражено следующим образом (1):

$$\cos \Theta = \cos \vartheta \cos \chi + \sin \chi \sin \vartheta \cos(\varphi - \Psi),$$

причем

$$(\hbar \mathbf{n}_0 - \hbar' \mathbf{n}_1) \mathbf{r}_s = K r_s \cos \vartheta.$$

Таким образом, волновая функция $\psi_x(r_2, r_1)$ принимается в виде:

$$\psi_x(r_2, r_1) = \frac{1}{V^2} \{R_{00}(r_1) \psi_x(r_2) - R_{00}(r_2) \psi_x(r_1)\}, \quad (6)$$

Интеграл, который необходимо вычислить, имеет вид:

$$J = \sum_s \iint R_{00}(r_1) R_{00}(r_2) \{R_{00}(r_1) \psi_x(r_2) + R_{00}(r_2) \psi_x(r_1)\} \times \\ \times e^{i(\hbar \mathbf{n}_0 - \hbar' \mathbf{n}_1) \mathbf{r}_s} d\tau_1 d\tau_2. \quad (7)$$

Обозначив

$$A = \frac{1,51^3}{2\pi V^2} \left[\frac{n'}{\pi(1-e^{-2\pi n'})} \right]^{1/2} \frac{1}{\Gamma(1+n)},$$

$$a = 0,87; \quad b = 0,88; \quad c = 0,92,$$

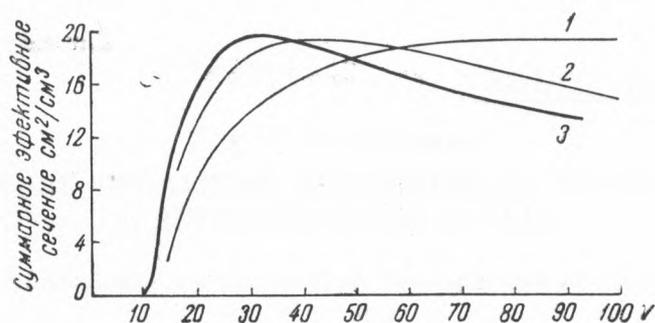
получим интеграл (7) в следующей форме:

$$J = A \sum_s \iiint \left\{ r_1^{2a} e^{-2br_1} e^{-(b-ix)r_2} r_2^a \left(1 - \frac{c}{r_1}\right)^2 \left(1 - \frac{c}{r_2}\right) + \right. \\ \left. + r_2^{2a} e^{-2br_2} e^{-(b-ix)r_1} r_1^a \left(1 - \frac{c}{r_2}\right)^2 \left(1 - \frac{c}{r_1}\right) \right\} \times \\ \times u^n e^{-uJ_0} \{2(ix\xi'u)^{1/2}\} e^{i(\hbar \mathbf{n}_0 - \hbar' \mathbf{n}_1) \mathbf{r}_s} d\tau_1 d\tau_2 du. \quad (8)$$

В каждом из двадцати четырех членов, содержащихся в (8), может быть элементарно проведено интегрирование по объему одного из валентных атомных электронов и выделен интеграл типа:

$$W = \iint \exp \{ -\mu r + i(\hbar \mathbf{n}_0 - \hbar' \mathbf{n}_1) \mathbf{r} + ixr - u \} r^n u^n J_0 \{2(ix\xi'u)^{1/2}\} d\tau du.$$

Интеграл такого типа вычислен автором ⁽⁷⁾ введением параболических координат и приводит, с помощью формулы Ганкеля ⁽⁸⁾, к гипергеометрическим функциям. Раскрывая эти функции и используя полиномы Гугенбауэра, можно получить окончательный результат интегрирования по u и координатам второго атомного валентного электрона.



1 — Smith ⁽⁹⁾, 2 — Nottingham ⁽¹⁰⁾, 3 — вычислено

Подставив результат вычисления интеграла (8) в выражение (2) и проведя численное интегрирование по углам рассеяния ударяющего электрона и углам ионизации выброшенного из атома электрона, можно получить эффективное поперечное сечение для ионизации паров ртути электронным ударом.

Для удобства сравнения с экспериментальными данными по ионизации ртути электронами, полученными Смитом ⁽⁹⁾ и, в особенности, Ноттингемом ⁽¹⁰⁾, вычислено суммарное поперечное сечение для атомов в 1 см³ (пересчитанное на плотность при давлении в 1 мм Hg и температуре 0° C). На рисунке приведено такое сравнение.

Всесоюзный электротехнический институт

Поступило
23 IX 1946

ЦИТИРОВАННАЯ ЛИТЕРАТУРА

- ¹ H. S. W. Massey and C. B. O. Mohr, Proc. Roy. Soc. A, **140**, 613 (1933).
² H. Bethe, Ann. d. Physik, **5**, 325 (1930). ³ W. V. Houston, Phys. Rev., **33**, 297 (1929). ⁴ J. C. Slater, Phys. Rev., **32**, 349 (1928). ⁵ C. Eckart, Phys. Rev., **36**, 878 (1930). ⁶ A. Sommerfeld, Ann. d. Physik, **11**, 257 (1931). ⁷ Б. Яворский, ДАН, **43**, 257 (1945). ⁸ G. N. Watson, Theory of Bessel Functions, Cambr. Univ. Press, 1922, p. 393. ⁹ P. T. Smith, Phys. Rev., **37**, 808 (1931). ¹⁰ W. B. Nottingham, Phys. Rev., **55**, 203 (1939).