ЯДЕРНА ФІЗИКА ТА ЕНЕРГЕТИКА / NUCL. PHYS. AT. ENERGY 21 (2020) 005-012 ISSN 1818-331X

УДК 539.163 https://doi.org/10.15407/jnpae2020.01.005

С. Н. Федоткин*

Институт ядерных исследований НАН Украины, Киев, Украина

*Ответственный автор: sfedot@kinr.kiev.ua

УСРЕДНЕННАЯ ПО ВСЕМ АТОМНЫМ ЭЛЕКТРОНАМ ВЕРОЯТНОСТЬ АННИГИЛЯЦИИ ПОЗИТРОНОВ, ИСПУЩЕННЫХ ПРИ β^+-РАСПАДЕ

Предложен приближенный метод для расчета вероятности однофотонной аннигиляции испущенного в процессе β^+-распада позитрона с атомным электроном, усредненной по всем электронам дочернего атома. Описание электронов проводится в рамках статистической модели Томаса - Ферми. Это приближение позволяет достаточно просто вычислять средние вероятности различных процессов с участием всех электронов атома. Полная вероятность однофотонной аннигиляции вычисляется с использованием приближенного аналитического выражения для плотности атомных электронов. Получено неплохое согласие между вероятностями, вычисленными в предложенном подходе, и оценками, полученными в рамках квантовой механики.

Ключевые слова: β^+-распад, аннигиляция, атомная оболочка, приближение Томаса - Ферми.

1. Введение

В случае облучении атомов пучком позитронов и их аннигиляции возможны различные процессы, такие как однофотонная аннигиляция с одним из электронов [1], безрадиационные процессы с ионизацией атомной оболочки [2] или возбуждением ядра [3 - 6]. При β^+-распаде также может происходить либо однофотонная аннигиляция позитронов с атомным электроном, либо возбуждение дочернего ядра или атомной оболочки при аннигиляции позитрона с одним из электронов дочернего атома. Последний процесс был предметом экспериментального и теоретического исследований [7, 8]. Радиационный захват электронов атома из 1S- и 1P-состояний рассматривался в различных приближениях в работах [9 - 11] для малых энергий, когда альтернативный процесс β^+-распада по энергетическим соображениям был невозможен. Был исследован также процесс ионизации атомной оболочки при аннигиляции позитрона, испущенного при β^+-распаде, с K-электроном и последующего выбивания с атомной оболочки K, L, M или N другого s-электрона [12, 13].

В настоящей работе предлагается подход, позволяющий приближенно вычислить суммарную вероятность однофотонной аннигиляции испущенного при β^+-распаде позитрона со всеми электронами атомной оболочки. Для решения подобной задачи необходимо вычислить вероятность процесса аннигиляции с каждым электроном оболочки и затем суммировать их. Для многоэлектронного атома такая задача чрезвычайно трудоемка прежде всего из-за сложности определения волновой функции каждого электрона с учетом взаимодействия электронов между собой. В этом случае применяются различные численные методы: самосогласованный подход Хартри - Фока [14], в котором кроме кулоновского поля ядра приближенно учитывается играющее заметную роль электрон-электронное взаимодействие, методы R-матрицы [15] и приближение сильной связи [16].

В предлагаемом ниже подходе атомная оболочка рассматривается в статистической модели Томаса - Ферми [17, 18], в которой электрон-электронное взаимодействие учитывается приближенно. С помощью статистической модели обычно вычисляют полную энергию ионизации атомов, средние энергии возбуждения и атомные спектры [19 - 24]. Однако, как показано ниже, в этом подходе можно без требующих больших затрат вычислений находить также вероятности различных процессов.

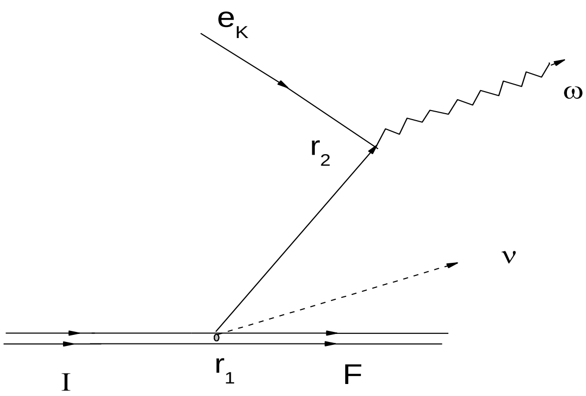
Полная для всего атома вероятность рассматриваемого процесса вычисляется с использованием аналитического выражения для плотности электронов в атоме $n(r)$ в приближении Тайтца [25] для среднего потенциала. При этом получается достаточно простое выражение для суммарной вероятности однофотонной аннигиляции испущенного при β^+-распаде позитрона с электронами атомной оболочки и отпадает необходимость в трудоемком вычислении вероятности процесса для каждого электрона и последующем их суммировании.

2. Однофотонная аннигиляция позитрона с K-электроном атома при β^+-распаде

Прежде чем перейти к расчету суммарной вероятности однофотонной аннигиляции в статистической модели, рассмотрим кратко процесс аннигиляции позитрона, испущенного при β^+-распаде, с K-электроном дочернего атома [10, 26]. Амплитуда вероятности такого процесса (в системе единиц $\hbar$ = c =1) имеет вид

$$M_{if} = e\sqrt{1/2k}\, G_V\, M_{FI}^{\beta}\, \Phi_{\nu}^{+} \int d\mathbf{r}\, G_{E_K-k}(\mathbf{r})\, e_{\mu}\gamma_{\mu}\, e^{-i\mathbf{kr}}\, \Psi_K(\mathbf{r}), \qquad (1)$$

где e – заряд электрона; M_{FI}^{β} – ядерный матричный элемент, соответствующий переходу ядра при β^+-распаде из состояния I в F; G_V – константа слабого взаимодействия; $\mathbf{k}$ и ω – импульс и энергия фотона; Φ_{ν}^{+} – спинорная часть волновой функции нейтрино; $\Psi_K(\mathbf{r})$ – волновая функция K-электрона. Соответствующая диаграмма Фейнмана, изображена на рисунке.



Диаграмма, описывающая процесс однофотонной аннигиляции позитрона: I, F – начальное и конечное состояния ядра; e_K и ν – K-электрон и нейтрино; волнистой линией обозначен фотон с энергией ω.

Для функции Грина $G_{E_K-k}(\mathbf{r})$ используется выражение

$$G_{E_K-k}(\mathbf{r}) = \frac{e^{ibr}}{4\pi r}, \quad b = \sqrt{(E_K-k)^2 - m^2}, \qquad (2)$$

где E_K – энергия K-электрона; m – его масса. Один из аргументов в функции Грина в формуле (2) полагается равным нулю, поскольку суммарный угловой момент, уносимый позитроном и нейтрино равен нулю в случае, когда происходят разрешенные переходы [10]. Отметим, что выбор функции Грина в виде (2) предполагает, что влияние кулоновского поля на нее пренебрежимо мало. В работах [10, 13] использовалось выражение для функции Грина $G_{E_K-k}(\mathbf{r})$ в кулоновском поле и исследовалось влияние этого фактора на вероятность процесса. Поскольку в дальнейшем будут рассматриваться ядерные процессы с достаточно большой энергией перехода и вычисляться отношения вероятностей, то в этом случае использование функции Грина в виде, представленном в выражения (2), не будет приводить к большим ошибкам.

Усредненная по направлениям вылета нейтрино вероятность искомого процесса после суммирования по всем проекциям спинов имеет вид

$$W_{\beta^+\gamma}^{K} = 2\pi \sum_{s_k, s_\nu} \int \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3} \frac{d\mathbf{p}_\nu}{(2\pi)^3} \left|\overline{M}_{fi}\right|^2 \delta(E_2 - p_\nu - k), \quad (3)$$

где $\mathbf{p}_\nu$ – импульс нейтрино; $\overline{M}_{fi}$ – усредненный по направлениям вылета нейтрино матричный элемент β^+-распада (1); E_2 – максимальная для данного процесса энергия фотона, определенная как

$$E_2 = (E_0 + m - B_K), \; E_0 = E_I - E_F\,. \qquad (4)$$

В выражении (4) E_0 – полная энергия, выделяемая при β^+-распаде, B_K – энергия связи K-электрона. После интегрирования по всем импульсам нейтрино для вероятности $W_{\beta^+\gamma}^{K}$ рассматриваемого процесса получается окончательное выражение

$$W_{\beta^+\gamma}^{K} = \frac{\alpha^4}{2\pi^3}(Zm)^3\, G_V^2 \left|M_{FI}^{\beta}\right|^2 I^K(E_2)\,. \qquad (5)$$

Координатная зависимость волновой функции K-электрона в формуле (1) в отличие от приближения, используемого в [10], учитывается точно, а интеграл $I^K(E_2)$ в формуле (5) имеет вид

$$I^K(E_2) = \int_0^{E_2} dk\, \frac{k^3(E_2-k)^2}{\left|k^2 + (Zm\alpha - ib)^2\right|^2}. \qquad (6)$$

3. Усредненная по атомным электронам вероятность однофотонной аннигиляции

Вероятность процесса с учетом вклада всех электронов атома обычно вычисляется следующим образом: рассчитывается вероятность процесса для каждого электрона, а затем все они суммируются. Очевидно, что для многоэлектронных атомов это достаточно трудоемкая задача, даже если пренебречь взаимодействием электронов между собой и полагать, что их состояние определяется только кулоновским полем ядра. Поскольку учет взаимодействия электронов между собой делает задачу чрезвычайно сложной, то вместо самосогласованных численных расчетов мы будем использовать приближенный, но значительно более простой подход, развитый для вычисления среднего сечения фотоэффекта для всего атома в работе [27].

Этот подход основан на использовании статистической модели Томаса - Ферми [17 - 19] для вычисления средней плотности электронов в нейтральном атоме. В этой модели используется связь между средней плотностью электронов в нейтральном атоме $n(r)$ и полным потенциалом $\Phi(r)$, в котором движутся электроны [19]

$$n(r)=\frac{1}{3\pi^2}(2me\Phi(r))^{3/2}. \tag{7}$$

Потенциал $\Phi(r)$ определяется совместным действием кулоновского поля ядра и взаимодействием электронов атомной оболочки. После введения новой функции $\varphi_0(r)$ с помощью соотношения

$$\Phi(r)=\frac{Ze}{r}\varphi_0(r) \tag{8}$$

и безразмерной переменной x

$$x=\frac{r}{a},\quad a=\left(\frac{9\pi^2}{128Z}\right)^{1/3}a_B \tag{9}$$

уравнение Томаса - Ферми для определения функции $\varphi_0(r)$ можно представить в виде

$$\frac{d^2\varphi_0(x)}{dx^2}=\frac{\varphi_0(x)^{3/2}}{\sqrt{x}}.$$

Вместо численного решения этого уравнения будем использовать приближенное выражение для функции $\varphi_0(r)$. Имеется несколько аппроксимаций для этой функции, которые являются достаточно хорошими приближениями к точному решению. Это приближения Ленза - Йенсена [19], Линдхарда [28], Фирсова [29], Тайтца [25] и некоторые другие. Для дальнейших вычислений вместо численного решения уравнения Томаса - Ферми будет использоваться приближение Тайтца.

В этом приближении для функции $\varphi_0(r)$ используется аналитическое выражение [25]

$$\varphi_0(r)=\frac{1}{\left(1+\alpha_0\dfrac{r}{a}\right)^2}, \tag{10}$$

где численное значение параметра равно $\alpha_0=0,53625$. В этом случае плотность электронов $n(r)$ приобретает такой вид:

$$n(r)=Z\,\frac{1}{4\pi a^3}\,\frac{1}{\left(\dfrac{r}{a}\right)^{3/2}}\,\frac{1}{\left(1+\alpha_0\dfrac{r}{a}\right)^3}. \tag{11}$$

Интеграл по $\mathbf{r}$ от этой плотности с очень хорошей точностью дает полное число электронов атома Z. Поскольку плотность всех атомных электронов пропорциональна заряду Z, то можно считать [30], что распределение плотности для каждого электрона $n_0(r)$ одинаково и, согласно определению (11), имеет вид

$$n_0(r)=\frac{n(r)}{Z}=\frac{1}{4\pi a^3}\,\frac{1}{\left(\dfrac{r}{a}\right)^{3/2}}\,\frac{1}{\left(1+\alpha_0\dfrac{r}{a}\right)^3}. \tag{12}$$

Предположим, что распределение плотности $n_0(r)$ (12) соответствует некоторой плотности вероятности найти один электрон в точке $\mathbf{r}$. Сходное предположение делалось в работе [19], где автор проводил аналогию между распределением плотности для одного электрона $n(r)/Z$ в модели Томаса - Ферми и плотностью вероятности найти один электрон в некотором квантовом состоянии $\psi(r)$

$$|\psi(r)|^2\leftrightarrow\frac{n(r)}{Z}. \tag{13}$$

Предположим далее, что существует такая амплитуда плотности вероятности $\psi_{cp}(r)$, которая соответствует распределению плотности $n_0(r)$ и согласно соотношениям (12) и (13) равна

$$\psi_{cp}(r)=\frac{1}{2\sqrt{\pi}\,a^{3/2}}\,\frac{1}{\left(\dfrac{r}{a}\right)^{3/4}}\,\frac{1}{\left(1+\alpha_0\dfrac{r}{a}\right)^{3/2}}\,e^{i\varphi}, \tag{14}$$

где фаза φ не зависит от координат. Таким образом определенная величина $\psi_{cp}(r)$ не является волновой функцией электрона, но она описывает пространственное распределение каждого электрона в атоме. В этом приближении они все эквивалентны. Следовательно, в этом подходе имеется Z идентичных электронов с одним и тем же пространственным распределением плотности $n_0(r)$ вместо Z атомных электронов, находящихся в разных состояниях. Это предположение согласуется с базисными принципами модели Томаса - Ферми [30].

Исходя из изложенных выше аргументов, вычислим усредненную вероятность рассматриваемого процесса в модели атома Томаса - Ферми. Будем считать, что функция $\psi_{cp}(r)$ (14) для атома Томас - Ферми играет ту же роль, что координатная часть волновой функции $\psi_K(r)$ в матричном элементе M_{if} (1) для обычного атома. Так как в модели атома Томаса - Ферми все электроны идентичны, то можно вычислить вероятность процесса W_0 для одного электрона с функцией $\psi_{cp}(r)$ (14) вместо $\psi_K(r)$ и затем умножить этот результат на полное число электронов Z, чтобы получить усредненную вероятность для всего атома. Очевидно, что предлагаемый подход позволяет корректно вычислять только полную вероятность процесса для всех атомных электронов.

Таким образом, усредненная вероятность однофотонной аннигиляции при β^+-распаде для всех атомных электронов $W^{TF}_{\beta^+\gamma}$ в приближении Томаса - Ферми равна

$$W^{TF}_{\beta^+\gamma} = Z\,W_0, \qquad (15)$$

а вероятность процесса для одного электрона W_0 можно представить в следующем виде:

$$W_0 = 2\pi \sum_{s_k, s_\nu} \int \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3} \frac{d\mathbf{p}_\nu}{(2\pi)^3} \left|\overline{M^{TF}_{fi}}\right|^2 \delta(E_2 - p_\nu - k). \qquad (16)$$

Здесь матричный элемент M^{TF}_{fi} имеет вид, аналогичный выражению M_{if} (1), в котором вместо волновой функции К-электрона в интеграле стоит $\psi_{cp}(r)$ (14). С учетом этой замены получено следующее выражение для интеграла $J_{TF}(k)$ по координате $\mathbf{r}$ в матричном элементе M^{TF}_{fi}, который аналогичен интегралу по $\mathbf{r}$ в матричном элементе M_{if} (1):

$$J_{TF}(k) = \int \frac{d\,\mathbf{r}}{4\pi r} \frac{e^{i(br - \mathbf{kr})}}{\left(\frac{r}{a}\right)^{3/4} \left(1 + \alpha_0 \frac{r}{a}\right)^{3/2}} = \frac{\Gamma(1/4)\,a}{2ik\,\alpha_0^{1/4}} \left[\Psi\left(\frac{1}{4}, -\frac{1}{4}; -i\frac{a(b+k)}{\alpha_0}\right) - \Psi\left(\frac{1}{4}, -\frac{1}{4}; -i\frac{a(b-k)}{\alpha_0}\right)\right], \qquad (17)$$

где $\Psi\left(\frac{1}{4}, -\frac{1}{4}; -i\frac{a(b\pm k)}{\alpha_0}\right)$ – вырожденная гипергеометрическая функция. После интегрирования по импульсам нейтрино $\mathbf{p}_\nu$ и всем углам вылета фотонов в выражении (16) получаем окончательную формулу для усредненной вероятности однофотонной аннигиляции при β^+-распаде $W^{TF}_{\beta^+\gamma}$ (15)

$$W^{TF}_{\beta^+\gamma} = Z\,\frac{\alpha}{64\pi^3} \frac{\left|M^{\beta}_{FI}\right|^2 \Gamma(1/4)^2}{a\,\alpha_0^{1/2}}\, I^{TF}(E_2), \qquad (18)$$

где

$$I^{TF}(E_2) = \int_0^{E_2} dk\; k\,(E_2 - k)^2 \left|\Psi\left(\frac{1}{4}, -\frac{1}{4}; -i\frac{a(b+k)}{\alpha_0}\right) - \Psi\left(\frac{1}{4}, -\frac{1}{4}; -i\frac{a(b-k)}{\alpha_0}\right)\right|^2. \qquad (19)$$

Отношение вероятностей процессов однофотонной аннигиляции при β^+-распаде с участием всех электронов атомной оболочки $W^{TF}_{\beta^+\gamma}$ (18) и электронов только К-оболочки $W^{K}_{\beta^+\gamma}$ (5) имеет вид:

$$\frac{W^{TF}_{\beta^+\gamma}}{W^{K}_{\beta^+\gamma}} \approx \frac{0{,}464}{Z^{5/3}} \frac{1}{m^2\alpha^2\,\alpha_0^{1/2}} \frac{I^{TF}(E_2)}{I^{K}(E_2)}, \qquad (20)$$

где интегралы $I^K(E_2)$ и $I^{TF}(E_2)$ в выражении (20) определены формулами (6) и (19) соответственно.

Для атома, имеющего Z электронов, можно сделать грубую оценку полной вероятности рассматриваемого процесса, определяя ее как сумму вероятностей, вычисленных для каждого электрона. Предположим, что состояния электронов определяются только кулоновским полем ядра, т. е. взаимодействие их между собой не учитывается. Выразим полную вероятность через вероятность процесса с участием К-электрона. Вероятность процесса при аннигиляции позитрона с s-электроном из оболочки с квантовым числом n $W^{ns}_{\beta^+\gamma}$ меньше вероятности аннигиляции с К-электроном $W^{K}_{\beta^+\gamma}$ приблизительно в n^3 раз [10, 12]. Учитывая, что на оболочке с квантовым числом n имеется $2n^2$ электронов, а вероятность процесса для электронов с отличным от нуля орбитальным моментом меньше вероятности $W^{ns}_{\beta^+\gamma}$, для полной вероятности процесса можно получить следующую приближенную квантово-механическую оценку сверху $W^{qm}_{\beta^+\gamma}$:

$$W^{qm}_{\beta^+\gamma} < W^{K}_{\beta^+\gamma} \sum_{n=1}^{N} \frac{n^2}{n^3} = W^{K}_{\beta^+\gamma} \sum_{n=1}^{N} \frac{1}{n}. \qquad (21)$$

Отметим, что в вероятность $W^{K}_{\beta^+\gamma}$ вносят вклад два электрона К-оболочки. Поскольку приближение Томаса - Ферми применимо для атомов с большим числом электронов, то в дальнейшем будут рассматриваться ядра с зарядом $Z \simeq 60 \div 85.$ В этом случае, используя для оценок величину $N = 5$, получаем из соотношения (21)

$$\frac{W^{qm}_{\beta^+\gamma}}{W^{K}_{\beta^+\gamma}} < 2,3. \qquad (22)$$

Более корректный расчет вероятности $W^{qm}_{\beta^+\gamma}$, учитывающий взаимодействие между электронами и тот факт, что для орбитальных моментов $l > 0$ справедлива оценка $W^{nl}_{\beta^+\gamma} < W^{ns}_{\beta^+\gamma}$ [10], должен несколько понижать оценку для отношения $W^{qm}_{\beta^+\gamma} / W^{K}_{\beta^+\gamma}$ по сравнению с величиной, указанной в формуле (22).

Отметим, что выражение для вероятности $W^{K}_{\beta^+\gamma}$ (5), а следовательно и $W^{TF}_{\beta^+\gamma}$ (18) описывают не только процессы одноквантовой аннигиляции позитрона и атомного электрона, но и радиационный захват соответствующего орбитального электрона [10]. В работе [10] исследовались ядра, в которых энергия распада E_0 (4) была мала $(E_0 < m)$, поэтому β^+-распад был запрещен, а возможен был только захват орбитального электрона. Ниже рассмотрены случаи больших энергий распада, когда β^+-распад является значительно более вероятным процессом, чем захват орбитального электрона. Кроме того, выбраны ядра с большим зарядом *Z*, чтобы выполнялись условия применимости статистической модели Томаса - Ферми. В таблице приведены расчеты отношения вероятностей процессов однофотонной аннигиляции при β^+-распаде с участием всех электронов атомной оболочки $W^{TF}_{\beta^+\gamma}$ (18) и электронов только К-оболочки $W^{K}_{\beta^+\gamma}$ (5) для различных ядер, в которых наблюдался β^+-распад. Для каждого ядра взяты экспериментальные значения энергий распада *E* [31].

Ядро	$^{160}_{69}$Tm	$^{172}_{73}$Ta	$^{178}_{75}$Re	$^{190}_{79}$Au	$^{190}_{81}$Tl	$^{206}_{85}$At
E_2, МэВ	4,72	4,02	4,52	4,42	5,22	4,52
$W^{TF}_{\beta^+\gamma} / W^{K}_{\beta^+\gamma}$	2,48	2,21	2,19	2,02	2,01	1,84

Отношение вероятностей $W^{TF}_{\beta^+\gamma} / W^{TF}_{\beta^+\gamma}$ (20) убывает с ростом заряда Z при фиксированной энергии E_2 и растет с увеличением E_2 при фиксированном заряде. При этом отношение вероятностей (20) для тяжелых ядер находится вблизи значения 2, что согласуется с приближенными квантово-механическими оценками, приведенными в формуле (22). Убывание отношения вероятностей с увеличением числа электронов может быть связано с тем, что при увеличении заряда *Z* из-за учета взаимодействия между электронами экранирование для внешних электронов увеличивается и, следовательно, их вклад в вероятность суммарного процесса уменьшается.

Поскольку рассматриваются атомы с большим зарядом *Z*, то большинство электронов находится на расстояниях от ядра в интервале $a_B/Z \ll r \ll a_B$, в пределах которого применимо квазиклассическое рассмотрение. Однако так как в процессе участвуют фотоны в широком диапазоне энергий, то для достаточно больших и малых энергий условия применимости квазиклассического приближения не выполняются.

В более совершенных вариантах приближения Томаса - Ферми учитываются вклад корреляционных, обменных и релятивистских эффектов, градиентных и оболочечных поправок [32]. При этом расширяется область их применимости, повышается точность расчетов и, соответственно, пропадает изначальная простота подхода.

Вариант модели Томаса - Ферми, который используется в настоящей работе, является менее точным, но оказывается полезным при описании характеристик, которые зависят от поведения системы электронов в среднем. К их числу относятся атомный форм-фактор, полная энергия всех электронов атома. Например, расхождение с экспериментом полных энергий ионизации атома порядка 25 % для легких ядер $(Z \sim 20-30)$ и порядка 20 % для тяжелых $(Z \sim 80)$ [32]. Расхождения не очень большие, несмотря на то что вклад K-электронов там имеется и рассматриваются тяжелые атомы, для которых важны релятивистские эффекты. Приблизительно такого же порядка отличие наших оценок вероятности процесса от квантово-механических расчетов для тяжелых ядер. Учет квантовых эффектов при расчете полных энергий ионизации для легких ядер устраняет эту проблему и уменьшает расхождение с экспериментом до 5 %, при этом существенно усложнив описание [32].

Сходная проблема коррекции подхода с целью сделать его пригодным на малых расстояниях от ядра существует и в расчете вероятности аннигиляции. Однако мы ограничились использованием простой модели Томаса - Ферми, так как изначально не ставили перед собой задачу описать процесс исчерпывающим образом, а стремились получить, учитывая его существенные особенности, простую оценку величины вероятности. В дальнейшем предполагается учесть наиболее важные из упомянутых факторов при описании процесса, по возможности сохранив относительную простоту похода.

4. Выводы

Получены оценки для усредненной полной вероятности однофотонной аннигиляции испущенного в процессе β^+-распада позитрона с электронами дочернего атома. Расчеты были выполнены в рамках статистической модели Томаса - Ферми с использованием аналитического выражения для плотности атомных электронов в приближении Тайтца. Этот подход позволяет приближенно учесть взаимодействие электронов между собой и избежать трудоемких численных расчетов при вычислении полной вероятности процесса для многоэлектронного атома.

Метод Томаса - Ферми имеет ограниченную область применения и является приближенным. Однако из-за своей простоты он имеет определенные преимущества при исследовании процесса однофотонной аннигиляции позитрона с электронами дочернего атома из-за большой сложности других подходов. Оценки полной вероятности рассмотренного процесса, полученные в статистическом подходе и с помощью приближенных расчетов в рамках квантовой механики, дают достаточно близкие результаты. Кроме того, в предложенном подходе из-за его относительной простоты возможно проводить анализ зависимости полученных результатов от различных факторов, в частности исследовать зависимость вероятности процесса от заряда ядра и энергии, выделяемой при β^+-распаде.

В работе не ставилась задача точного вычисления вероятности однофотонной аннигиляции, а был предложен подход для получение простых оценок в рамках статистического метода. Этот подход может быть полезен для решения некоторых других задач, в которых требуется учитывать вклад в какой-либо процесс всех электронов атомной оболочки.

СПИСОК ИСПОЛЬЗОВАННОЙ ЛИТЕРАТУРЫ

1. W.R. Johnson, D.J. Buss, C.O. Carrol. Single-Quantum Annihilation of Positrons. Phys. Rev. 135(5) (1964) A1232.
2. S. Shimizu, T. Mukoyama, Y.Nakayama. Radiationless Annihilation of Positron in Lead. Phys. Rev. 173(2) (1968) 405.
3. R. Present, S. Chen. Nuclear Disintegration by Positron-*K* Electron Annihilation. Phys. Rev. 85 (1952) 447.
4. T. Mukoyama, S. Shimizu. Nuclear excitation by positron annihilation. Phys. Rev. C 5 (1972) 95.
5. И.Н. Вишневский и др. Ядерное возбуждение под действием бесфотонной аннигиляции позитронов. Письма ЖЭТФ 30 (1979) 394.
6. Д.П. Гречухин, А.А. Солдатов. Возбуждение ядра при аннигиляции позитронов на K-оболочке тяжелых атомов. ЖЭТФ 74 (1978) 13.
7. Г.П. Борозенец, И.Н. Вишневский, В.А. Желтоножский. Возбуждение ядра при аннигиляции позитронов в процессе β^+-распада. Ядерная физика 43(1) (1986) 14.
8. В.М. Коломиец, О.Г. Пунинский, С.Н. Федоткин. Возбуждение ядра при аннигиляции позитрона с K-электроном в процессе β^+-распада. Изв. АН СССР. Сер. физ. 52(1) (1988) 12.
9. P. Morrison, I.I. Schiff. Radiative *K* capture. Phys. Rev. 58(1) (1940) 24.
10. R.J. Glauber, P.C. Martin. Radiative Capture of Orbital Electrons. Phys. Rev. 104(1) (1956) 158.
11. P.C. Martin, R.J. Glauber. Relativistic Theory of Radiative Orbital Electron Capture. Phys. Rev. 109(4) (1958) 1307.
12. С.Н. Федоткин. Ионизация атома при аннигиляции позитронов, испущенных при β^+-распаде. Ядерна фізика та енергетика 12(4) (2011) 335.
13. S.N. Fedotkin. The effect of the nuclear Coulomb field on atomic ionization at positron-electron annihilation in β^+-decay. Eur. Phys. J. Conf. Ser. 93 (2015) 01046.
14. C.F. Fischer. *The Hartree - Fock Method for Atoms* (N.Y., London: John Wiley & Sons, 1977) 308 p.
15. *Electronic and Atomic Collision*. Ed. by G. Watel, P.G. Burke (North-Holland, Amsterdam, 1978) 747 p.

16. K. Smith, R.J.W. Henry, P.G. Burke. Scattering of Electrons by Atomic Systems with Configurations $2p^q$ and $3p^q$. Phys. Rev. 147 (1966) 21.
17. L.H. Thomas. The calculation of atomic fields. Math. Proc. Camb. Phil. Soc. 23(5) (1927) 542.
18. E. Fermi. Statistical method to determine some properties of atoms. Rendiconti Lincei 6 (1927) 602; E. Fermi. Eine statistische Methode zur Bestimmung einiger Eigenschaften des Atoms und ihre Anwendung auf die Theorie des periodischen Systems der Elemente. Z. Phys. 48(1-2) (1928) 73.
19. P. Gombas. *Die Statistische Theorie des Atoms und ihre Anwendungen* (Wien: Springer-Verlag, 1949) 399 p.
20. *Theory of the Inhomogeneous Electron Gas*. Ed. by S. Lundqvist, N.H. March (New York and London, Plenum Press, 1983). 394 p.
21. M. Brack, R.K. Bhaduri. *Semiclassical Physics* (USA, Westview Press, Boulder, 2003) 458 p.
22. S. Seriy. Modern Ab-Initio Calculations on Modified Tomas-Fermi-Dirac Theory. Open Journal of Modelling and Simulation 3(3) (2015) 57362.
23. V.Ya. Karpov, G.V. Shpatakovskaya. Inclusion of the Discreteness of the Electronic Spectrum in the Statistical Model of Free Ions. JETP Letters 98 (2013) 348.
24. G.V. Shpatakovskaya. Semiclassical model of the structure of matter. Uspekhi Fizicheskikh Nauk (Physics-Uspekhi) 55(5) (2012) 429.
25. T. Tietz. Simple Analytical Eigenfunctions of Electrons in Thomas - Fermi Atoms. Zs. Naturfosch. 23a (1968) 191.
26. С.Н. Федоткин. Аннигиляция позитронов, испущенных при β^+-распаде, с электронами дочернего атома. Ядерна фізика та енергетика 11(3) (2010) 233.
27. С.Н. Федоткин. Сечение фотоэффекта, усредненное по всем атомным электронам, Ядерна фізика та енергетика 17(3) (2016) 226.
28. J. Lindhard. Influence of crystal lattice on motion of energetic charged particles. Mat. Fys. Medd. Dan. Vid. Selsk. 34(14) (1965) 64 p.
29. O.B. Firsov. The simplified Thomas-Fermi-Dirac equation and approximation of its calculation for an atomic potential. Rad. Eff. 61(1-2) (1982) 73.
30. E. Fermi. Le orbite ∞ s degli elementi. Mem. Accad. d'Italia 6(1) (1934) 119.
31. *Схемы распада радионуклидов. Энергия и интенсивность излучения*. Ч. 1 - 2 (Москва, 1987).
32. Д.А. Киржниц, Ю.Е. Лозовик, Г.В. Шпатаковская. Статистическая модель вещества. Успехи физических наук 117(01) (1975) 3.

С. М. Федоткін*

Інститут ядерних досліджень НАН України, Київ, Україна

*Відповідальний автор: sfedot@kinr.kiev.ua

УСЕРЕДНЕНА ПО ВСІХ АТОМНИХ ЕЛЕКТРОНАХ ІМОВІРНІСТЬ АНІГІЛЯЦІЇ ПОЗИТРОНІВ, ВИПУЩЕНИХ ПРИ β^+-РОЗПАДІ

Запропоновано наближений метод для розрахунку ймовірності однофотонної анігіляції випущеного в процесі β^+-розпаду позитрона з атомним електроном, усередненої по всіх електронах дочірнього атома. Опис електронів проводиться в рамках статистичної моделі Томаса - Фермі. Це наближення дає змогу досить просто обчислювати середні ймовірності різних процесів за участю всіх електронів атома. Повна ймовірність однофотонної анігіляції обчислюється з використанням наближеного аналітичного виразу для густини електронів атома. Отримано непогане узгодження між імовірностями, обчисленими в запропонованому підході, і оцінками, отриманими у рамках квантової механіки.

Ключові слова: анігіляція, β^+-розпад, атомна оболонка, К-електрон, наближення Томаса - Фермі.

S. N. Fedotkin*

Institute for Nuclear Research, National Academy of Sciences of Ukraine, Kyiv, Ukraine

*Corresponding author: sfedot@kinr.kiev.ua

AVERAGED OVERALL ATOMIC ELECTRONS PROBABILITY OF POSITRONS ANNIHILATION AT β^+-DECAY

An approximate method for calculating the probability of single-photon annihilation of a positron with an atomic electron at the β^+-decay averaged over all electrons of the daughter atom is proposed. The electrons are described in the framework of the Thomas - Fermi statistical model. This approximation makes it easy the calculation of the average probabilities of various processes involving all the electrons of the atom. The total probability of single-photon annihilation is calculated using an approximate analytical expression for the atomic electrons' density. A good agreement between the probabilities calculated in the proposed approach and the estimates obtained in the framework of quantum mechanics was obtained.

Keywords: annihilation, β^+-decay, atomic shell, K-electron, Thomas - Fermi approximation.

REFERENCES

1. W.R. Johnson, D.J. Buss, C.O.Carrol. Single-Quantum Annihilation of Positrons. Phys. Rev. 135(5) (1964) A1232.
2. S. Shimizu, T. Mukoyama, Y. Nakayama. Radiationless Annihilation of Positron in Lead. Phys. Rev. 173(2) (1968) 405.
3. R. Present, S. Chen. Nuclear Disintegration by Positron-*K* Electron Annihilation. Phys. Rev. 85 (1952) 447.
4. T. Mukoyama, S. Shimizu. Nuclear excitation by positron annihilation. Phys. Rev. C 5 (1972) 95.
5. I.N. Vishnevskiy et al. Nuclear excitation under the influence of photonless positron annihilation. Pis'ma ZHETF (JETP Letters) 30 (1979) 394. (Rus)
6. D.P. Grechukhin, A.A. Soldatov. Excitation of a nucleus upon annihilation of positrons on the K-shell of heavy atoms. ZHETF (JETP) 74 (1978) 13. (Rus)
7. G.P. Borozenets, I.N. Vishnevskiy, V.A. Zheltonozhskiy. Excitation of the nucleus upon annihilation of positrons in the process of β^+-decay. Yadernaya Fizika 43(1) (1986) 14. (Rus)
8. V.M. Kolomiyets, O.G. Puninskiy, S.N. Fedotkin. Excitation of a nucleus upon annihilation of a positron with a K-electron in the process of β^+-decay. Izvestiya AN SSSR. Ser. Fiziycheskaya 52(1) (1988) 12. (Rus)
9. P. Morrison, I.I. Schiff. Radiative *K* capture. Phys. Rev. 58(1) (1940) 24.
10. R.J. Glauber, P.C. Martin. Radiative Capture of Orbital Electrons. Phys. Rev. 104(1) (1956) 158.
11. P.C. Martin, R.J. Glauber. Relativistic Theory of Radiative Orbital Electron Capture. Phys. Rev. 109(4) (1958) 1307.
12. S.N. Fedotkin. Atomic ionization at annihilation of positrons emitted at β^+-decay. Yaderna Fizyka ta Energetyka (Nucl. Phys. At. Energy) 12(4) (2011) 335. (Rus)
13. S.N. Fedotkin. The effect of the nuclear Coulomb field on atomic ionization at positron-electron annihilation in β^+-decay. Eur. Phys. J. Conf. Ser. 93 (2015) 01046.
14. C.F. Fischer. *The Hartree - Fock Method for Atoms* (N.Y., London: John Wiley & Sons, 1977). 308 p.
15. *Electronic and Atomic Collision*. Ed. by G. Watel, P.G. Burke (North-Holland, Amsterdam, 1978) 747 p.
16. K. Smith, R.J.W. Henry, P.G. Burke. Scattering of Electrons by Atomic Systems with Configurations $2p^q$ and $3p^q$. Phys. Rev. 147 (1966) 21.
17. L.H. Thomas. The calculation of atomic fields. Math. Proc. Camb. Phil. Soc. 23(5) (1927) 542.
18. E. Fermi. Statistical method to determine some properties of atoms. Rendiconti Lincei 6 (1927) 602; E. Fermi. Eine statistische Methode zur Bestimmung einiger Eigenschaften des Atoms und ihre Anwendung auf die Theorie des periodischen Systems der Elemente. Z. Phys. 48(1-2) (1928) 73.
19. P. Gombas. *Die Statistische Theorie des Atoms und ihre Anwendungen* (Wien: Springer-Verlag, 1949) 399 p.
20. *Theory of the Inhomogeneous Electron Gas*. Ed. by S. Lundqvist, N.H. March (New York and London, Plenum Press, 1983). 394 p.
21. M. Brack, R.K. Bhaduri. *Semiclassical Physics* (USA, Westview Press, Boulder, 2003) 458 p.
22. S. Seriy. Modern Ab-Initio Calculations on Modified Tomas-Fermi-Dirac Theory. Open Journal of Modelling and Simulation 3(3) (2015) 57362.
23. V.Ya. Karpov, G.V. Shpatakovskaya. Inclusion of the Discreteness of the Electronic Spectrum in the Statistical Model of Free Ions. JETP Letters 98 (2013) 348.
24. G.V. Shpatakovskaya. Semiclassical model of the structure of matter. Uspekhi Fizicheskikh Nauk (Physics-Uspekhi) 55(5) (2012) 429.
25. T. Tietz. Simple Analytical Eigenfunctions of Electrons in Thomas - Fermi Atoms. Zs. Naturfosch. 23a (1968) 191.
26. S.N. Fedotkin. Annihilation of positrons, emitted at β^+-decay with electrons of the daughter's atom. Yaderna Fizyka ta Energetyka (Nucl. Phys. At. Energy) 11(3) (2010) 233. (Rus)
27. S.N. Fedotkin. Cross-section of the photoeffect averaged over the atomic electrons. Yaderna Fizyka ta Energetyka (Nucl. Phys. At. Energy) 17(3) (2016) 226. (Rus)
28. J. Lindhard. Influence of crystal lattice on motion of energetic charged particles. Mat. Fys. Medd. Dan. Vid. Selsk. 34(14) (1965) 64 p.
29. O.B. Firsov. The simplified Thomas-Fermi-Dirac equation and approximation of its calculation for an atomic potential. Rad. Eff. 61(1-2) (1982) 73.
30. E. Fermi. Le orbite ∞ s degli elementi. Mem. Accad. d'Italia 6(1) (1934) 119.
31. *The decay schemes of radionuclides. Energy and radiation intensity*. Part 1 - 2 (Moskva, 1987). (Rus)
32. D.A. Kirzhnits, Yu.Ye. Lozovik, G.V. Shpatakovskaya. Statistical model of a substance. Uspekhi Fizicheskikh Nauk 117(01) (1975) 3. (Rus)

Надійшла / Received 06.11.2019