ФИЗИКА ЭЛЕМЕНТАРНЫХ ЧАСТИЦ И АТОМНОГО ЯДРА. ТЕОРИЯ

СВЯЗЬ ВЕРОЯТНОСТИ ИОНИЗАЦИИ АТОМОВ ОТДАЧИ С ДАННЫМИ ЭКСПЕРИМЕНТОВ ПО ИОНИЗАЦИИ ФОТОНАМИ И ЭЛЕКТРОНАМИ

Л. И. Меньшиков, П. Л. Меньшиков, М. П. Файфман¹

Национальный исследовательский центр «Курчатовский институт», Москва

Рассмотрен процесс отдачи ядра атома при упругом рассеянии на нем нейтральной частицы, в том числе гипотетической частицы темной материи — WIMP. Получены справедливые в случае низкоэнергетической отдачи ядра соотношения между вероятностью ионизации атома отдачи и сечением ионизации такого атома фотоном, а также электроном. Приведенные выражения содержат лишь один параметр, значения которого вычислены для различных типов атомов с учетом экспериментальных данных по ионизации фотонами и электронами. Проведено сравнение вычисленных вероятностей ионизации атомов отдачи благородных газов с результатами других теоретических работ, при этом подчеркнуто, что предложенная модель расчетов достаточно надежна и ее точность определяется погрешностью использованных значений экспериментальных сечений.

The process of atomic nucleus recoil under the elastic scattering of a neutral particle, a hypothetical dark matter particle (WIMP) in particular, is considered. In the case of a low-energy recoil of the nucleus, the relations between the probability of ionization of the recoil atom and the cross section of ionization of such an atom by a photon, as well as by an electron, are obtained. These expressions contain only one parameter, the values of which are calculated for different types of atoms, taking into account experimental data on ionization by photons and electrons. The calculated probabilities of ionization of noble gas recoil atoms are compared with the results of other theoretical studies, and it is emphasized that the proposed calculating model is quite reliable, and its accuracy is determined by the error of the experimental cross sections that are used.

PACS: 34.50.Fa; 95.35.+d; 25.30.Pt

введение

Изучение природы темной материи является на ближайшее время одним из самых актуальных фундаментальных исследований как экспериментальных, так и теоретических. Многие эксперименты проводятся с целью прямой регистрации событий взаимодействия частиц вещества темной материи с рабочим веществом детектора. Важным инструментом в экспериментах по поиску гипотетических частиц темной материи WIMP, а также редких процессов с участием нейтрино являются детекторы

¹E-mail: Fayfman_MP@nrcki.ru

на основе жидких благородных газов (см. обзоры [1–3] и ссылки в них). Полученные с их помощью данные свидетельствуют о высокой эффективности регистрации событий и подтверждают необходимость дальнейших как экспериментальных, так и теоретических исследований по выбору типа благородного газа в качестве детектирующей среды. В частности, приобретает первостепенное значение изучение атомных и молекулярных процессов, протекающих при столкновении слабовзаимодействующих частиц с ядрами (и электронами) атомов благородного газа рабочего вещества детектора.

Предполагается, что ядра атомов (с атомным весом $A \sim 50-100$ и массой M) при столкновении с WIMP приобретают скорость отдачи V и соответствующую энергию E_R отдачи [4]:

$$E_R = \frac{MV^2}{2} \lesssim 10 \text{ кэB.}$$
(1)

При торможении таких атомов в веществе возникают как возбужденные и ионизованные атомы, так и свободные электроны, что приводит к возможности регистрации помимо фотонов, рожденных в процессах девозбуждения атомов, также и электронов.

В работе [5] вычислена вероятность W_I ионизации атома отдачи. В основу метода расчета положено достаточно обоснованное предположение Мигдала [6] о малости времени взаимодействия частицы с ядром по сравнению с временами, характерными для периодов электронов в атомной оболочке. Тогда, согласно [7]:

$$W_I = \sum_f |Q|^2,\tag{2}$$

где Q — матричный элемент от трансляционной экспоненты, соответствующий переходу из начального $|i\rangle$ (основного состояния электронной оболочки атома) в конечное $|f\rangle$ (ион + свободные электроны ионизированного атома) состояние атома:

$$Q = \left\langle f \left| \exp\left(-\frac{i}{e} \mathbf{k} \mathbf{d}\right) \right| i \right\rangle, \tag{3}$$

и по всем конечным $|f\rangle$ -состояниям в определении (2) проводится суммирование. В выражении (3) введены обозначения: $\mathbf{k} = m_e \mathbf{V}/\hbar$, m_e и e — масса электрона и элементарный заряд соответственно, \mathbf{d} — оператор электрического дипольного момента атома с атомным номером Z:

$$\mathbf{d} = -e \sum_{a=1}^{Z} \mathbf{r}_a,\tag{4}$$

где **г**_{*a*} является радиусом-вектором *a*-го электрона.

В работе [5] для нахождения вероятности ионизации атома W_I из выражения (2) применен весьма громоздкий и со спорной оценкой по точности прямой расчет, включающий детальное рассмотрение электронных состояний в приближении Хартри-Фока. С целью уменьшения неопределенностей, обусловленных недостатком детальных знаний о процессах, сопровождающих столкновения ядер мишени с гипотетическими частицами, в настоящей работе проведены гораздо более простые и надежные вычисления с использованием экспериментальных данных по измеренным сечениям ионизации атомов фотонами и электронами.

1. ФОРМУЛИРОВКА МЕТОДА

При энергиях отдачи

$$E_R (\kappa \mathfrak{s} \mathsf{B}) \lesssim E_R^0 = 30A, \tag{5}$$

к которым относится и область (1), трансляционную экспоненту в (3) можно разложить в ряд Тейлора и ограничиться первым отличным от нуля слагаемым. В этом приближении возможна только одноэлектронная ионизация, поскольку отброшены слагаемые, отвечающие высшим степеням оператора полного момента атома, и поэтому

$$\sum_{f} |Q|^2 \approx \int \frac{d^3 p}{(2\pi\hbar)^3} |Q|^2, \qquad (6)$$

где интегрирование проводится по импульсам **р** электрона ионизации. В результате получим соотношение для вероятности ионизации в виде

$$W_I = \frac{k^2}{6\pi^2 e^2 \hbar^3} \int_0^\infty dp \, p^2 |d_{fi}|^2.$$
(7)

Здесь $|d_{fi}|^2$ — квадрат модуля матричного элемента оператора дипольного момента перехода, усредненный по направлениям вылета электрона.

С другой стороны, сечение одноэлектронной фотоионизации атома фотоном с энергией ε в интересующем нас нерелятивистском приближении дается известным выражением (см., например, [8]):

$$\sigma_{\rm ph}(\varepsilon) = \frac{2\varepsilon m_e p}{3c\hbar^4} |d_{fi}|^2,\tag{8}$$

в котором постоянная $c \approx 3 \cdot 10^{10}$ см/с — скорость света. Из формул (7) и (8) получаем

$$W_{I} = \frac{k^{2}}{4\pi^{2}\alpha} J_{0} = \frac{m_{e}^{2} E_{R}}{2\pi^{2} M \hbar^{2} \alpha} J_{0},$$
(9)

$$J_0(\mathrm{cM}^2) = \int_{I}^{\infty} \frac{d\varepsilon}{\varepsilon} \sigma_{\mathrm{ph}}(\varepsilon) = 10^{-18} B, \qquad (10)$$

где $\alpha = e^2/\hbar c$ — постоянная тонкой структуры и I — потенциал ионизации атома. Для вычисления интеграла J_0 необходимы данные для сечений фотоионизации $\sigma_{\rm ph}(\varepsilon)$ в широкой области изменения энергии фотонов ε . Их удалось отыскать только для атомов благородных газов.

В то же время для большинства атомов из таблицы Менделеева в литературе имеются данные измерений сечений $\sigma_{\rm el}$ одноэлектронной ионизации электронным ударом (см. [9] и приведенные в ней ссылки). В борновском приближении, применимом при скоростях v налетающего на атом электрона, намного превышающих атомную единицу скорости $v_0 = e^2/\hbar$, имеем [7]:

$$\sigma_{\rm el} = \frac{4e^2\Lambda}{3\pi\hbar^5 v^2} \int_0^\infty dp \, p^2 |d_{fi}|^2, \tag{11}$$

где $\Lambda = \ln (\hbar v / I a_0), a_0$ — боровский радиус. Из выражений (7) и (11) получаем

$$W_I = \frac{m_e^2 E_R}{4\pi M e^4} \frac{\sigma_{\rm el} v^2}{\Lambda}.$$
(12)

Формулы (9) и (12) с учетом входящих в них численных значений множителей, можно представить в единообразном виде:

$$W_I = 0,0047 \frac{E_R(\kappa \mathfrak{s} \mathfrak{B})}{A} B, \qquad (13)$$

который довольно удобен для практических расчетов.

2. ОБСУЖДЕНИЕ РЕЗУЛЬТАТОВ

Значения безразмерных параметров *В* для атомов благородных газов вместе с их основными характеристиками приведены в табл. 1. Величины $B \equiv B_{\rm ph}$ вычислены из соотношения (10) с использованием данных по измерению сечений фотоионизации работ [10–12], а значения $B \equiv B_{\rm el}$ в формуле (13) были получены из выражения (12) с учетом данных по сечениям $\sigma_{\rm el}$ одноэлектронной ионизации атомов электронным ударом, измеренных в [9].

Таблица 1. Атомные характеристики и параметр *В* для различных типов атомов благородных газов

Параметр		Атом						
Параметр	He	Ne	Ar	Kr	Xe			
Заряд ядра <i>Z</i>	3,9	13	29	36	38			
Атомный вес А, ат. ед.	4,0	20,2	40,0	83,8	131,3			
Энергия первичной ионизации I, эВ	24,6	21,6	15,8	14,0	12,1			
Ионизация фотонами:								
$B \equiv B_{\rm ph}$	3,9	13	29	36	38			
$D_{\rm ph} = B_{\rm ph}/A$	0,98	0,66	0,73	0,43	0,29			
Ионизация электронами:								
$B \equiv B_{\rm el}$	5,0	12	27	40	46			
$D_{\rm el} = B_{\rm el}/A$	1,25	0,59	0,68	0,48	0,35			

На рисунке изображены вероятности ионизации атомов благородных газов в зависимости от энергии отдачи соответствующего ядра. Для сравнения здесь также представлены вероятности ионизации атомов аргона и ксенона, вычисленные в работе [5] при скорости ядра отдачи $V = 0,001c = 3 \cdot 10^7$ см/с и соответствующих такой скорости энергиях (1) отдачи $E_R = 20$ кэВ (аргон) и $E_R = 65$ кэВ (ксенон). Детали такого сравнения приведены в табл. 2.

Наши расчеты (см. рисунок и табл. 2) выполнены по формуле (13), основанной на данных по сечениям фотоионизации. В частности, значения параметров B для атомов аргона и ксенона из табл. 1: B(Ar) = 29, B(Xe) = 38. Видно, что эти значения пара-

метров B, определенные из экспериментальных данных, значительно отличаются от величин B для этих же атомов, полученных путем пересчета с использованием вероятностей ионизации, вычисленных в работе [5], и соотношения (13).

В табл. 3 приведены значения параметра B для атомов натрия, германия и иода, которые часто являются типичными средами, используемыми в детекторах. Рассчитанные нами величины B получены из соотношения (13), в котором вероятности ионизации W_I были вычислены по формуле (12). Другие значения B получены также на основе (13) с учетом вероятностей ионизации W_I , вычисленных в работах [5] и [13] при опреде-



Вероятности ионизации атомов благородных газов. Прямые линии — вычисления по формуле (13) данной работы, символы + (для аргона) и × (для ксенона) — результаты из работы [5]

ленных значениях энергий отдачи E_R . Так, в статье [13] приведены величины W_I при V = 0,001c, причем вероятность ионизации внешней 3s-оболочки атома натрия много меньше, чем таковая для внутренних оболочек, что выглядит странно. В работе [13] величины W_I рассчитаны для натрия и иода при энергиях отдачи 10 и 33,3 кэВ соответственно, но нет вероятности ионизации 4p-оболочки атома германия, и поэтому в табл. 3 отвечающее ей значение B отсутствует.

Как видно из табл. 3, для натрия имеется значительное рассогласование с результатами, полученными на основании работ [5] и [13]. По этой причине параметр *В* был рассчитан нами по формуле (10) с использованием данных для сечения фото-

 $Tаблица \ 2.$ Значения параметраB и вероятности и
онизации аргона и ксенона при скорости ядра отдачиV=0,001c

Параметр	Атом Ar (Л	E _R = 20 кэВ)	Атом Xe ($E_R = 65$ кэВ)			
	Ibe et al. [5]	Данная работа	Ibe et al. [5]	Данная работа		
В	35	29	61	38		
W_I	0,08	0,067	0,14	0,087		

Таблица 3.	Значения	параметра	Β,	рассчитанные	по	данным	для	сечения	одноэлект	рон-
ной иониза	ции атомо	в электрон	ны	м ударом						

Ραδοτα	Атом					
1 00010	Na	Ge	Ι			
Bernabei et al. [13]	4	—	31			
Ibe et al. [5]	12	32,5	70			
Данная работа	28	31,6	37			

ионизации натрия, приведенных в работах [14] и [15], что дало значение B = 29, согласующееся с нашим результатом из табл. 3.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Связь вычисленных в дипольном приближении матричных элементов электронных переходов при ионизации атомных систем с экспериментальными данными по фотоионизации уже была использована нами ранее. С ее помощью в работе [16] была продемонстрирована достаточная надежность метода вычисления нерезонансных скоростей образования мюонных молекул и определена его точность.

Простая аналитическая формула (13), полученная в данной работе на основе модели Мигдала, позволяет определить вероятности ионизации атомов мишени при взаимодействии их ядер с зарядово-нейтральной частицей типа нейтрона или WIMP. Эта зависимость $W_I(E_R)$, в соответствии с использованным методом разложения экспоненты в матричном элементе (3), справедлива с точностью $\approx E_R/E_R^0$ и применима при энергиях отдачи из интервала (5). Поэтому основная погрешность соотношения (13) определяется в основном погрешностью данных для измеренных сечений. Так, согласно [10–12], величина погрешности вероятностей ионизации, найденных с использованием сечений фотоионизации, составляет ~ 20 %.

Отметим также, что учет одноэлектронной ионизации внутренних оболочек изменяет величину множителя Λ в формуле (11), что привносит дополнительную погрешность. Поэтому расчет W_I с использованием $\sigma_{\rm el}$ кажется менее точным, чем основанный на данных по фотоионизации. В то же время данные табл. 1 говорят об обратном. Как указано в [7], при расчете сечения ионизации электронным ударом относительная погрешность борновского приближения составляет величину $\varphi \sim 1/(2\Lambda)$. По этой причине при использовании данных [9] для расчета параметра $B \equiv B_{\rm el}$ были взяты значения $\sigma_{\rm el}$ при наибольших значениях энергий электронов, в случае которых $\varphi \sim 0,2$. Таким образом, погрешности двух рассмотренных нами способов нахождения параметра B сравнимы, как это и видно из табл. 1. Неучтенный нами вклад в вероятность ионизации W_I от внутренних оже-процессов, происходящих после выбивания электрона с одной из нижних оболочек атома, также требует специального исследования, которое предполагается завершить в дальнейшем.

Полученные результаты позволят упростить анализ данных текущих экспериментов (например, РЭД, DarkSide, DEAP и др.), использующих детекторы на благородных газах для поиска процессов с участием частиц темной материи, а также будут способствовать дальнейшей разработке надежных теоретических методов для последующего описания рассматриваемых элементарных электрон-атомных процессов с достаточной для такого типа экспериментов точностью.

Благодарности. Авторы выражают благодарность М. Д. Скорохватову за внимание к данной проблеме и интерес к работе, А. В. Гробову, И. Н. Мачулину и О. А. Титову за полезные обсуждения.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

- 1. Chepel V., Araújo H. // J. Instrum. 2013. V. 8. R04001.
- 2. Baudis L. // Phys. Dark Univ. 2014. V. 4. P. 50-59.

- 3. Undagoitia T. M., Rauch L. // J. Phys. G: Nucl. Part. Phys. 2016. V. 43. 013001.
- 4. Bertone G., Hooper D., Silk J. // Phys. Rep. 2005. V. 405. P. 279-390.
- 5. Ibe M., Nakano W., Shoji Y., Suzuki K. // J. High Energy Phys. 2018. V. 194.
- 6. Мигдал А. // ЖЭТФ. 1939. Т. 9, вып. 10. С. 1163-1165.
- 7. Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М. Квантовая механика. М.: Наука, 1989. 768 с.
- Берестецкий В.Б., Лифшиц Е.М., Питаевский Л.П. Релятивистская квантовая теория. Ч.І. М.: Наука, 1968. 480 с.
- Talukder M. R., Bose S., Patoary M.A.R., Haque A.K.F., Uddin M.A., Basak A.K., Kando M. // Eur. Phys. J. D. 2008. V. 46. P. 281–287.
- 10. Marr G. V., West J. B. // Atom. Data Nucl. Data Tables. 1976. V. 18. P. 497-508.
- 11. West J. B., Marr G. V. // Proc. Roy. Soc. London A. 1976. V. 349. P. 397-421.
- 12. West J. B., Morton J. // Atom. Data Nucl. Data Tables. 1978. V. 22. P. 103-107.
- Bernabei R., Belli P., Montecchia F., Nozzoli F., Cappella F., Incicchitti A., Prosperi D., Cerulli R., Dai C. J., He H. L., Kuang H. H., Ma J. M., Sheng X. D., Ye Z. P. // Intern. J. Mod. Phys. A. 2007. V. 22. P. 3155–3168.
- 14. Butlert K., Mendoza C. // J. Phys. B: Atom. Mol. Phys. 1983. V. 16. P. L707-L711.
- 15. Codling K., Hamley J.R., West J.B. // J. Phys. B: Atom. Mol. Phys. 1977. V.10. P.2797-2807.
- Faifman M. P., Men'shikov L. I. // Нур. Int. 1999. V. 118. Р. 187–195; Меньшиков Л. И., Файфман М. П. Препринт ИАЭ-3819. М., 1985. 16 с.

Получено 23 октября 2020 г.