

Otokar Dragoun; Miloš Ryšavý

Padesát let výpočtů koeficientů vnitřní konverze záření gama

Pokroky matematiky, fyziky a astronomie, Vol. 46 (2001), No. 3, 191--196

Persistent URL: <http://dml.cz/dmlcz/141083>

Terms of use:

© Jednota českých matematiků a fyziků, 2001

Institute of Mathematics of the Academy of Sciences of the Czech Republic provides access to digitized documents strictly for personal use. Each copy of any part of this document must contain these *Terms of use*.



This paper has been digitized, optimized for electronic delivery and stamped with digital signature within the project *DML-CZ: The Czech Digital Mathematics Library* <http://project.dml.cz>

- [16] LUCAS, E.: *Théorèmes d'arithmétique*. Atti della Reale Accademia delle Scienze di Torino 13 (1878), 271–284.
- [17] PIERPONT, J.: *On an undemonstrated theorem of the Disquisitiones Arithmeticae*. Bull. Amer. Math. Soc. 2 (1895/96), 77–83.
- [18] REED, I. S., TRUONG, T. K., WELCH, L. R.: *The fast decoding of Reed-Solomon codes using Fermat transforms*. IEEE Trans. Inform. Theory 24 (1978), 497–499.
- [19] RIPLEY, B. D.: *Stochastic simulations*. John Wiley & Sons, New York 1987.
- [20] ROSEN, M.: *Abel's theorem on the lemniscate*. Amer. Math. Monthly 88 (1981), 387–395.
- [21] SCHÖNHAGE, A., STRASSEN, V.: *Fast multiplication of large numbers* (German). Computing 7 (1971), 281–292.
- [22] WANTZEL, P. L.: *Recherches sur les moyens de reconnaître si un Problème de Géométrie peut se résoudre avec la règle et le compas*. J. Math. 2 (1837), 366–372.
- [23] <http://www.prothsearch.net/fermat.html>

Padesát let výpočtů koeficientů vnitřní konverze záření gama

Otokar Dragoun a Miloš Ryšavý, Praha

Podobně jako excitované atomy přecházejí i vzbuzená atomová jádra do nižších energetických stavů často emisí monoenergetických fotonů. V obou případech jsou tyto přechody vyvolány elektromagnetickou interakcí a platí při nich zákony zachování energie, hybnosti, momentu hybnosti a parity. Spektroskopie rentgenovských i měkkých fotonů a stejně tak i spektroskopie jaderného záření gama to využívají ke stanovení kvantových charakteristik vzbuzených stavů zkoumaných objektů.

Při výzkumu atomů se však setkáváme i s neradiačním deexcitačním procesem, při kterém jsou emitovány skupiny monoenergetických Augerových elektronů. Již při prvních měřeních magnetickými spektrometry na začátku 20. století se ukázalo, že k emisi monoenergetických elektronů dochází i při radioaktivních přeměnách. V té době již bylo známo Roentgenovo záření i Einsteinova rovnice fotoelektrického jevu. Bylo proto přirozené předpokládat, že dochází k „vnitřní konverzi záření gama“: jádro emituje foton, který vyvolá fotoefekt na některém z elektronů vlastního atomového obalu (foton se tedy uvnitř atomu „konvertuje“ na elektron). Ze změřené energie vzniklého fotoelektronu lze pak stanovit energii jaderného přechodu.

Brzy se však ukázalo [1], že představa vnitřního fotoefektu je nesprávná a že proces probíhá přímou elektromagnetickou interakcí mezi vzbuzeným jádrem a některým

Ing. OTOKAR DRAGOUN, DrSc. (1937), a RNDr. MILOŠ RYŠAVÝ, CSc. (1947), Ústav jaderné fyziky AVČR, 250 68 Řež, e-mail: dragoun@ujf.cas.cz, rysavy@ujf.cas.cz

z elektronů vlastního atomového obalu. (Vypočtená pravděpodobnost emise fotonu s následným vnitřním fotoefektem se značně lišila od experimentálních hodnot.) Po nějaké době se navíc zjistilo, že k emisi konverzních elektronů dochází i v případech, kdy vzbuzené atomové jádro v důsledku zákonů zachování žádný reálný kvant gama vyslat nemůže. Poněkud matoucí název však tomuto jaderněatomovému procesu již zůstal.

Pravděpodobnost emise kvant gama je ve velmi dobré aproximaci nezávislá na vlastnostech atomového obalu. Pravděpodobnost emise konverzních elektronů podle očekávání závisí na vlastnostech jak jádra, tak i vázaných elektronů. Poměr těchto pravděpodobností (nazývaný koeficientem vnitřní konverze záření gama, KVK) však naštěstí v naprosté většině případů na detailech jaderné struktury nezávisí. Jak ukázaly již orientační výpočty, může KVK silně záviset na multipolaritě jaderného přechodu, která je určena změnou jaderných spinů a parit. Jaderná spektroskopie tak již před druhou světovou válkou mohla získat citlivou metodu k určování kvantových charakteristik vzbuzených stavů jader. Pro přílišnou numerickou náročnost však tehdy nikdo potřebné KVK nevy počítal.

Po druhé světové válce prudce vzrostl význam jaderné fyziky a fyzikové USA a SSSR přistoupili i k rozsáhlým výpočtům koeficientů vnitřní konverze. První tabulku 680 hodnot pro slupku K atomů dvanácti prvků a jaderné přechody různé multipolarity s energií 150 keV až 2,5 MeV vypočetl se spolupracovníky americký fyzik E. M. Rose z Oak Ridge National Laboratory. I když šlo o nejjednodušší fyzikální model bodového jádra bez stínění, bylo třeba vypočítat mnoho hodnot hypergeometrické funkce ${}_2F_1(a, b; c; z)$ komplexní proměnné. Vzhledem k pomalu konvergujícím řadám si tak výpočet každého KVK vyžádal až miliony elementárních početních operací. Roseho výpočty, provedené na reléovém počítači Mark I Harwardovy univerzity a publikované v roce 1951 v prestižním *Physical Review* [2], se často považují za první mírovou aplikaci číslicového počítače.

Roseho předpoklad bodového jádra se zdál zcela oprávněný, protože pravděpodobnost průniku atomového elektronu dovnitř jádra konečných rozměrů je vskutku nepatrná. Bylo proto překvapením, když ruský teoretik L. A. Sliv ukázal v témže roce ve stejné prestižní *Žurnale eksperimentalnoj i teoretičeskoj fiziki* [3], že nezapočtení konečných rozměrů jádra může při výpočtu KVK v těžkých prvcích způsobit chybu až 50%. Nebylo to tím, že by přesné rozměry jádra hrály tak důležitou roli. Chyba byla způsobena neoprávněným použitím Coulombova potenciálu i uvnitř jádra. Na výpočtech KVK ve zmíněné Slivově práci se podílel i tehdejší student Leningradské státní univerzity M. A. Listengarten, který se v dalším půlstoletí zasloužil desítkami teoretických prací o hlubší pochopení jevu vnitřní konverze.

V letech 1956 a 1958 se objevily dvojice rozsáhlé tabulky KVK pro slupku K a podslupky L_1 – L_3 [4, 5]. Srovnávání experimentálních KVK s teoretickými předpověďmi umožnilo stanovit kvantové charakteristiky mnoha set jaderných elektromagnetických přechodů. Spektroskopie konverzních elektronů spolu se spektroskopií záření gama tak sehrála (a dosud hraje) významnou úlohu při ověřování modelů atomových jader.

Vyskytla se však záhada: ačkoliv fyzikální předpoklady výpočtů [4, 5] byly téměř shodné, odpovídající KVK se někdy lišily až o desítky procent. Experimentátoři se

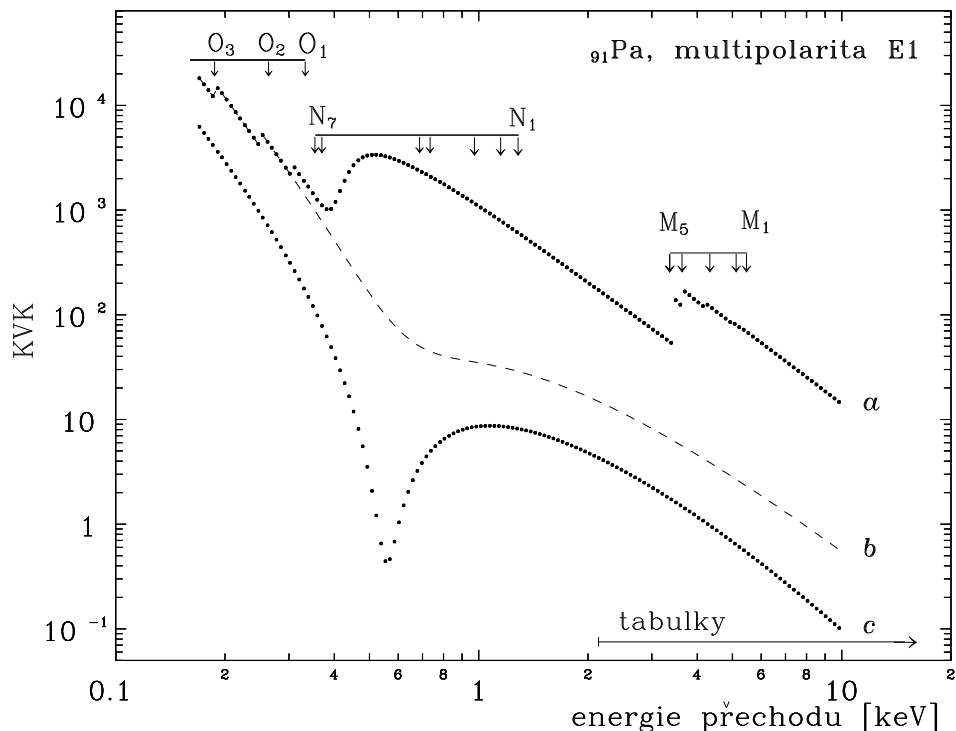
dlouho snažili rozpor mezi teoretickými hodnotami rozhodnout měřením. Nakonec se zjistilo, že příčinou byla nedbalá interpolace KVK, které byly — pro přílišné nároky na výpočetní čas — vypočteny jen pro některá atomová čísla Z . Od té doby se KVK důsledně počítají pro všechna potřebná Z přímo. Příkladem jsou tabulky [6, 7], které zahrnují i atomové podslupky M_1 – M_5 . Potřebné vlnové funkce vázaných i volných elektronů v nich byly získány podle relativistického atomového modelu Hartreeho, Focka a Slatera.

O další záhadu se postarala příroda. V ojedinělých případech jsou experimentální KVK ve značném rozporu s teoretickými předpověďmi. Nutnou podmínkou pro výskyt takové anomálie je to, aby zkoumaný jaderný přechod probíhal značně pomaleji, než předpovídá tzv. Weisskopfův jednočásticový odhad. Emise záření gama i vnitřní konverze vně atomového jádra jsou v tom případě silně potlačeny a může se uplatnit obvykle zanedbatelná konverze uvnitř jádra. Ta probíhá jen proto, že atomové elektrony mají nenulovou pravděpodobnost proniknout dovnitř jádra konečných rozměrů. Konverzní koeficienty pak ovšem na detailech jaderné struktury závisí. Tyto anomálie byly podrobně prozkoumány např. v monografii [8], ale jejich výskyt je vzácný.

Další výpočty KVK pro atomové podslupky N_1 – N_5 [9] dovolily interpretovat relativní intenzity konverzních elektronů v nízkoenergetických jaderných přechodech, jejichž energie na konverzi elektronů z vnitřních slupek nestačí. Teoretické KVK pro vysokoenergetické přechody [10, 11] se uplatnily zejména při zpracování elektronových spekter změřených v jaderných reakcích s neutrony. S rozvojem experimentu vznikla potřeba vypočítat KVK i pro nejvyšší atomové slupky O, P a Q. Podařilo se to [12] v překvapivě jednoduché aproximaci: KVK pro nestíněné jádro stačilo vynásobit poměrem hustot vázaných elektronů ve stíněném a nestíněném poli na povrchu jádra či v jeho okolí. Tato korekce se uplatnila již dříve pro KVK nejhlubší slupky K a činila jen 1 či 2%. U nejvyšších slupek však dosahovala faktoru 10 a přesto byl opravený KVK v dobré shodě s experimentem.

Tak příznivý výsledek lze považovat za potvrzení domněnky, že elektrostatické pole v blízkosti atomového jádra má stejnou radiální závislost jako pole coulombovské jen s amplitudou změněnou interakcí na větších atomových vzdálenostech. Výpočty [13] skutečně potvrdily, že vnitřní konverze probíhá téměř výlučně v oblasti, která je sice velká ve srovnání s rozměry jádra, ale současně malá vůči rozměrům atomu. Později se objevily podrobné tabulky KVK pro všechny atomové slupky volných neutrálních atomů [14], které pokryly téměř všechny požadavky jaderné spektroskopické praxe.

Je zajímavé, že kromě několika dílčích pokusů byly KVK vypočteny jen v nejnižším nenulovém řádu poruchové teorie kvantové elektrodynamiky. Zahrnutí vyššího řádu bude náročné; současná přesnost experimentu to však nevyžaduje. Z téhož důvodu není zatím třeba zahájit výpočty nových tabulek KVK. K interpretaci nejpřesnějších experimentů a ve zcela ojedinělých případech nezahrnutých v existujících tabulkách lze použít výpočetní programy [15, 16]. (Příklad pro extrémně nízkou energii jaderného přechodu je na obr. 1. Obrázek též ilustruje nebezpečí bezmyšlenkovité interpolace či dokonce extrapolace z existujících tabulek KVK.) Atomové pole relativistického modelu Hartreeho a Focka, použité při výpočtu KVK poprvé v práci [18], dosud vyhovuje.

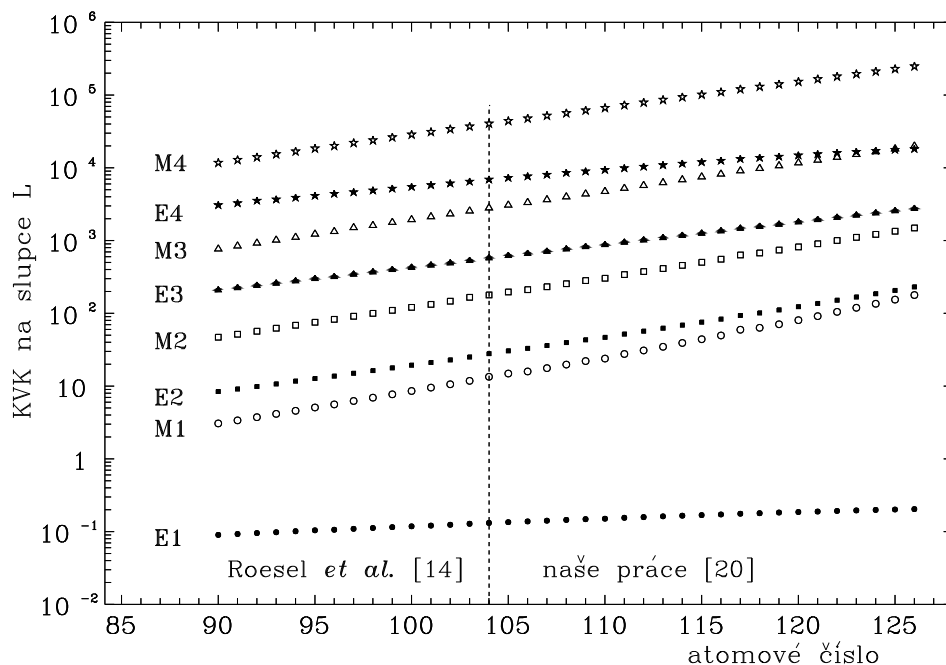


Obr. 1. Konverzní koeficienty nízkoenergetického přechodu multipolarity E1 v protactiniu [17]. Je znázorněna závislost na energii (a) totálního KVK, (b) součtu KVK na podslupkách O_2 až Q_1 , (c) KVK na podslupce O_4 . Nespojitosti v totálním KVK vznikají v důsledku překročení energetických prahů pro konverzi na dalších podslupkách — na obrázku jsou naznačeny šipkami.

Ojedinelé výpočty KVK pro izolované ionty (např. [19]) jsou předzvěstí budoucích výpočtů pro chemické sloučeniny. Ty budou třeba, až se zdokonalí metody přípravy radioaktivních vzorků. Výzkum vnitřní konverze pak umožní získat unikátní informaci o hlubokých molekulárních orbitalech s vazbovou energií 20 i více eV. Má-li totiž sousední atom v molekule dostatečnou elektronovou hustotu v blízkosti radioaktivního jádra, může vnitřní konverze probíhat i na společném orbitalu a ve spektru konverzních elektronů sloučeniny se objeví nové čáry, které u izolovaného atomu nebyly.

Nedávné experimenty si vyžádaly i několik výpočtů KVK pro silně ionizované atomy. V těch se totiž může stát, že konverzní elektron neopustí vlastní atom, ale zachytí se v jeho některém neobsazeném vázaném stavu. V minulém roce se objevily i první tabulky KVK pro supertěžké prvky s atomovými čísly až do 126 [20] (viz příklad na obr. 2), které budou nepochybně zapotřebí k vyhodnocování spekter již v tomto desetiletí.

Pohledem do seznamu odkazů zjistíme, že rozsáhlými výpočty koeficientů vnitřní konverze záření gama se nezabývali jen fyzikové velmocí a bohatého Švýcarska, ale ve značné míře i čeští fyzikové, kterým patří několik prvenství. Uplatnili se i při experimentálním výzkumu vnitřní konverze [21], včetně vyvinutí metody pro stanovení



Obr. 2. Konverzní koeficienty pro supertěžké prvky (energie přechodu je 100 keV). Ukazuje se, že plynule navazují — jako funkce Z — na existující tabulky.

valenčního stavu radionuklidu ^{99m}Tc ve stopovém množství 10^{-11} g [22]. Na žádost mezinárodní skupiny sestavující rozpadová schémata atomových jader provedli nedávno i podrobnou analýzu neurčitostí teoretických KVK [23]. Snad nebude příliš neskromné připomenout slova Karla Čapka, že „jedinou šancí malého národa je kvalita“.

L i t e r a t u r a

- [1] TAYLOR, H. M., MOTT, N. F.: *The Internal Conversion of Gamma-Rays II*. Proc. Roy. Soc. (London) *A142* (1933), 215.
- [2] ROSE, M. E.: *The Internal Conversion Coefficients I: The K-shell*. Phys. Rev. *83* (1951), 79.
- [3] SLIV, L. A.: *Učet koněčných rozmerov jadra pri vyčislenii koeficientov vnutrennej konversii*. Žurnal Exp. Teor. Fiz. *21* (1951), 770.
- [4] SLIV, L. A., BAND, I. M.: *Tablicy koeficientov vnutrennej konversii gamma-lučej, časť 1 — K-oboločka*. Izdat. AN SSSR, Moskva-Leningrad 1956;
SLIV, L. A., BAND, I. M.: *Tablicy koeficientov vnutrennej konversii gamma-lučej, časť 2 — L-oboločka*. Izdat. AN SSSR, Moskva-Leningrad 1958.
- [5] ROSE, M. E.: *Internal Conversion Coefficients*. North-Holland, Amsterdam 1958.
- [6] HAGER, R. S., SELTZER, E. C.: *Internal conversion tables. Part I: K-, L-, M-shell conversion coefficients for $Z = 30$ to $Z = 103$* . Nucl. Data *A4* (1968), 1.
- [7] BAND, I. M., TRZHASKOVSKAYA, M. B.: *Tablicy koeficientov vnutrennej konversii gamma-lučej na K-, L- i M-oboločkach, $10 \leq Z \leq 104$* . Leningradskij Institut Jadërnoj Fiziki, Leningrad 1978.

- [8] BAND, I. M., LISTENGARTEN, M. A., FERESIN, A. P.: *Anomalii v koefficientach vnutrennej konversii gamma-lučej*. Nauka, Leningrad 1976.
- [9] DRAGON, O., PAULI, H. C., SCHMUTZLER, F.: *Tables of internal conversion coefficients for N-subshell electrons*. Nucl. Data Tables A6 (1969), 235.
- [10] DRAGON, O.: *High-Energy Internal Conversion Coefficients*. Nucl. Phys. A132 (1969), 374.
- [11] TRUSOV, V. F.: *Internal conversion coefficients for high-energy transitions*. Nucl. Data Tables 10 (1972), 477.
- [12] DRAGON, O., PLAJNER, Z., SCHMUTZLER, F.: *Contribution of outer atomic shells to total internal conversion coefficients*. Nucl. Data Tables 9 (1971), 119.
- [13] BAND, I. M., SLIV, L. A., TRZHASKOVSKAYA, M. B.: *Formation region of internal conversion coefficients*. Nucl. Phys. A156 (1970), 170.
- [14] ROESEL, F., FRIES, H. M., ALDER, K., PAULI, H. C.: *Internal conversion coefficients for all atomic shells*. At. Data Nucl. Data Tables 21 (1978), 91.
- [15] RYŠAVÝ, M., DRAGON, O., VINDUŠKA, M.: *Nuclear structure effect in internal conversion of the 166 keV hindered M1 transition in ^{139}La* . Czech. J. Phys. B27 (1977), 538.
- [16] BAND, I. M., LISTENGARTEN, M. A., TRZHASKOVSKAYA, M. B.: *Kompleks programm RAINE „Reljativistskij atom, vzaimodějstvie elektromagnitnogo izlučenija jadra s elektronami atoma“*. Preprint No. 1479, Leningradskij Institut Jadernoj Fiziki, Leningrad 1989.
- [17] DRAGON, O., RYŠAVÝ, M., GÜNTHER, C.: *Multipole character of the proposed 220 eV transition in ^{229}Pa* . Phys. Rev. C47 (1993), 870.
- [18] DRAGON, O., BRABEC, V., RYŠAVÝ, M., ŠPALEK, A.: *Internal Conversion Coefficients in the Hartree-Fock Atomic Model. Calculations and Experiments for ^{199}Hg* . Z. Physik A281 (1977), 347.
- [19] FUJIOKA, M., TAKASHIMA, M., KANBE, M., DRAGON, O., RYŠAVÝ, M.: *Internal Conversion of Valence Shell Electrons. Measurement and Analysis for the 10.84 keV Transition in ^{206}Bi* . Z. Phys. A — Atoms and Nuclei 299 (1981), 283;
RYŠAVÝ, M., DRAGON, O.: *What Can we Learn from the Internal-Conversion Electron Spectra of Multiply Charged Krypton Ions?* Europhys. Lett. 17 (1992), 303.
- [20] DRAGON, O., RYŠAVÝ, M., ŠPALEK, A.: *Internal conversion for superheavy elements*. J. Phys. G: Nucl. Part. Phys. 26 (2000), 1461;
RYŠAVÝ, M., DRAGON, O.: *K-shell, L-subshell, and total internal conversion coefficients for superheavy elements*. At. Data Nucl. Data Tables 78 (2001), 129.
- [21] DRAGON, O.: *Internal Conversion-Electron Spectroscopy*. Adv. Electronics Electron Phys. 60 (1983), 1, ed. PETER W. HAWKES.
- [22] DRAGON, O., FIŠER, M., BRABEC, V., KOVALÍK, A., KUKLÍK, A., MIKUŠÍK, P.: *A new method of valence state determination based on measurements of internal conversion electrons*. Phys. Lett. 99A (1983), 187.
- [23] RYŠAVÝ, M., DRAGON, O.: *On the reliability of the theoretical internal conversion coefficients*. J. Phys. G: Nucl. Part. Phys. 26 (2000), 1859.