

基于联合分离原子模型的电离理论^{*}

李明生¹⁾²⁾ 蔡晓红^{1)†}

1) 中国科学院近代物理研究所, 兰州 730000)

2) 中国科学院研究生院, 北京 100049)

(2006 年 11 月 4 日收到, 2007 年 1 月 12 日收到修改稿)

采用微扰静态(PSS)模型近似处理极化和结合能效应,并引入了相对论效应、能量损失效应和库仑偏转效应修正的 ECSSR 理论是描述直接库仑电离过程最成功的理论,但对于低能离子入射时,其结果明显低于实验值.采用联合分离原子(USA)模型替代 ECSSR 中的 PSS 模型,考虑分子轨道效应得到了基于 USA 模型的电离理论——MECUSAR 理论.对部分碰撞系统进行了计算,得到的碰撞截面与实验结果基本符合.结合 OBKN(Oppenheimer-Brinkman-Kramers formulas of Nikolaev)电子俘获模型,对 MECUSAR 理论进行了进一步修正,使其能对不同电荷态的入射离子进行计算.

关键词: X 射线产生截面, 离子-原子碰撞, 电子俘获

PACC: 3450D, 3410, 7920N

1. 引言

在过去的一二十年里,随着加速器技术和离子探测技术的发展,离子-原子碰撞一直是原子物理领域的一个重要研究热点,实验和理论研究都取得了很大的进展,积累了大量实验数据^[1-3],形成了一些理论模型.中国科学院近代物理研究所长期以来致力于离子-原子碰撞研究,320 kV 超导高电荷态电子回旋共振离子源平台、兰州重离子加速器和兰州重离子加速器冷却储存环可提供从低能到高能的各种重离子束,为进行重离子-原子碰撞研究创造了良好的实验条件^[4].由于新建成的 320 kV 实验平台提供的重离子能量多处于中低能区,本工作的研究结果将为实验研究提供很好的参考.

目前,直接电离过程的理论描述已相对比较完善.常用的几种理论模型有平面波玻恩近似^[4]、二体碰撞近似^[5]、半经典近似^[6]以及 ECSSR 理论^[7]等.所谓 ECSSR 理论是指采用微扰静态(PSS)模型近似处理极化和结合能效应,并引入相对论效应、能量损失效应和库仑偏转效应修正的描述直接库仑电离过程的一种理论.对于轻离子入射,ECSSR 理论值与实验值符合,而对于重离子入射碰撞的情况,

ECSSR 直接电离理论结合 OBKN(Oppenheimer-Brinkman-Kramers formulas of Nikolaev)理论,得到的计算结果与实验值基本符合,但在计算低能离子入射时,理论计算结果明显低于实验值. Sun 和 Yu 等^[8,9]指出,低能时入射离子和靶原子形成了分子轨道,进而导致电离截面的增加,而在 ECSSR 理论中没有考虑分子轨道对电离截面的影响,ECSSR 理论计算值因而低于实验值.据此,我们提出了 MECUSAR 理论. MECUSAR 理论考虑了分子轨道效应、相对论效应、能量损失效应和库仑偏转效应,并用联合分离原子(USA)模型代替 PSS 模型,综合 Benka 等^[10]在 1987 年提出的考虑分子轨道效应得到基于 USA 模型的 MECSSR 理论以及 Lapicki^[11]在 2002 年提出的 ECUSAR 理论而得到.

为了与实验值进行比较,我们利用 OBKN 电子俘获模型^[12]描述电子俘获的贡献,计算了包括电子俘获贡献的电离截面,并结合单空穴荧光产额^[13,14]得到了可与实验结果进行直接比较的 X 射线产生截面.

2. MECUSAR 理论

MECUSAR 理论以 ECSSR 理论为基础,通过

^{*} 国家自然科学基金(批准号:10134010,10375080,10304019)资助的课题.

[†] 通讯联系人. E-mail: caixh@impcas.ac.cn

USA 模型代替 PSS 模型,并考虑分子轨道效应.

PSS 模型的表达式如下:

$$\zeta_s = 1 + \left(\frac{2Z_1}{Z_{2s}\theta_s} \right) [g(\xi_s) - h(\xi_s)], \quad (1)$$

式中 θ_s 为内壳层电子的约化电子结合能, ξ_s 为约化离子速度, Z_1 为入射离子核电荷数, Z_{2s} 为有效靶核电荷数, g, h 分别为描述结合能和极化效应的参数, 详见文献 [7].

当入射离子速度远小于内壳层电子速度时, $\xi_s \rightarrow 0, h_s(\xi_s) = 0, g_s(\xi_s) = 1$ 这时

$$\zeta_s \rightarrow 1 + \frac{2Z_1}{Z_{2s}\theta_s}.$$

把入射离子与靶原子看成一个原子, 相应的靶原子结合能 θ_s 修正为联合原子结合能 θ_s^{UA} , 同时对 ζ_s 进行修正, 使其与联合原子的结合能一致. 修正后的 ζ_s^{UA} 可表示为

$$\zeta_s^{UA} = \frac{(1 + 2Z_1/Z_{2s})^2 \theta_s^{UA}}{\theta_s}. \quad (2)$$

当 $\theta_s < 1, Z_1 \ll Z_{2s}$ 满足

$$\zeta_s^{UA} < \frac{1 + 2Z_1}{Z_{2s}\theta_s}.$$

因此, 在 $\xi_s \rightarrow 0$ 及入射离子能量很低的情况下, ζ_s^{UA} 作为结合能增加的上限, 避免了结合能的进一步增加而导致电离截面的减小, 可以改善 ECPSR 理论在低能情况下与实验数据的符合情况.

USA 模型可以通过 (1) 和 (2) 式得到, ζ_s^{USA} 表达式为

$$\zeta_s^{USA} = \zeta_s^{UA} \quad (\zeta_s \geq \zeta_s^{UA}),$$

$$\zeta_s^{USA} = \zeta_s \quad (\zeta_s < \zeta_s^{UA}).$$

由以上方法的 ECUSAR, 再进一步考虑分子轨道效应, 通过对 ECUSAR 中各个参量作进一步修正, 可以得到 MECUSAR 理论, 具体修正步骤如下:

1) Z_{2s} 由 $Z_{2s}^* = Z_{2s} + \alpha Z_1$ 代替, 其中参数 α 的取值在 0—1 之间, 详见文献 [10].

2) 约化电子结合能

$$\theta_s^\alpha = \frac{I_s^*}{(Z_{2s} + \alpha Z_1)^2},$$

其中 I_s^* 为联合原子的结合能. 这里我们忽略了入射离子中的电子与靶核以及靶电子的相互作用, 因此 I_s^* 与文献 [9] 中的不同. 设

$$I_s^* = I_{2s} + \alpha I_1,$$

其中 I_{2s} 是靶原子的某一 S 壳层的结合能, I_1 为入射离子全裸时的结合能, 可导出

$$\xi_s^\alpha = \frac{\theta Z_{2s} \xi_s}{\theta^\alpha Z_{2s}^\alpha}.$$

3) 经过以上步骤 (1) 和 (2) 式可修正为

$$\zeta_s = 1 + \frac{\alpha(1 - \alpha)Z_1}{Z_{2s}^\alpha \theta_s^\alpha} [g(\xi_s^\alpha) - h(\xi_s^\alpha)], \quad (3)$$

$$\zeta_s^{UA} = \frac{(1 + \alpha(1 - \alpha)Z_1/Z_{2s}^\alpha)^2 \theta_s^{UA}}{\theta_s}. \quad (4)$$

4) 考虑相对论修正, 用

$$y = \frac{CZ_{2s}^2}{c^2(\xi_s^{\alpha 2} + (2dZ_{2s}^\alpha)^2)^{1/2}}$$

代替原来的

$$y = \frac{CZ_{2s}^2}{c^2 \xi_s^\alpha}.$$

这里 C 为常数, c 为光速, d 为碰撞参数, y 为相对论修正参量, 详见文献 [7].

3. 计算结果及讨论

Lapicki 等^[12]应用微扰方法修正 OBKN 理论得到了包括电子俘获贡献的电离模型, 但是这个模型只适合于全裸离子以及满 K 壳层, 空 L 壳层和满 K, L 壳层, 空 M 壳层离子的计算, 例如 $C^{6+}, C^{4+}, Ar^{18+}, Ar^{16+}, Ar^{8+}$ 等, 其应用范围有很大的局限性. 为了对不同价态入射离子进行计算, 我们提出可以根据入射离子各个壳层的结合能对俘获电子的概率进行加权, 得到不同价态入射离子的单电子俘获截面. 如将 C^{5+} 单电子结合能与 C^{6+} 单电子结合能的比

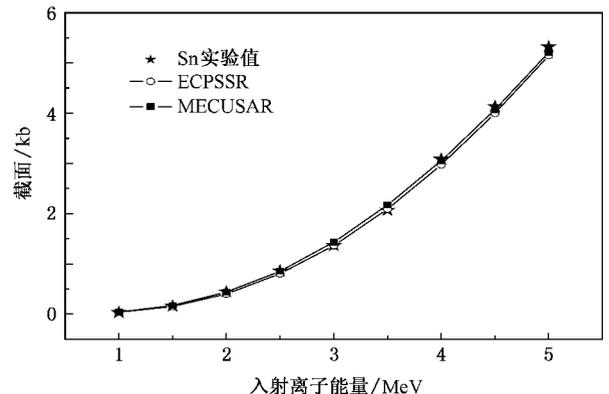


图 1 H⁺ 与 Sn 原子碰撞的 K 壳层 X 射线产生截面 Sn 实验值取自文献 [1]

值乘以 C^{6+} 单电子俘获截面,可以得到 C^{5+} 单电子俘获截面. 以此类推,可以得到 C^{3+} , C^{2+} 单电子俘获截面.

根据以上方法,我们选择若干组碰撞体系进行了计算,并与实验结果进行了比较. 图 1 为 H^+ 与 Sn 碰撞的 K 壳层 X 射线产生截面,其中核电荷数之比 $Z(H)/Z(Sn)=0.02$. 图 2 给出了 H^+ 与 Ni, Zr 碰撞

的 L 壳层 X 射线产生截面,其中 $Z(H)/Z(Ni)=0.036$, $Z(H)/Z(Zr)=0.025$. 图 3 是 He^+ 与 Ho 碰撞的 M 壳层 X 射线产生截面,其中 $Z(He)/Z(Ho)=0.03$. 从这些计算结果可以直观地看到,对于低核电荷的入射离子,如 H^+ , He^+ 等,MECUSAR 理论计算值与实验值基本一致,也与 ECPSSR 计算值基本相同.

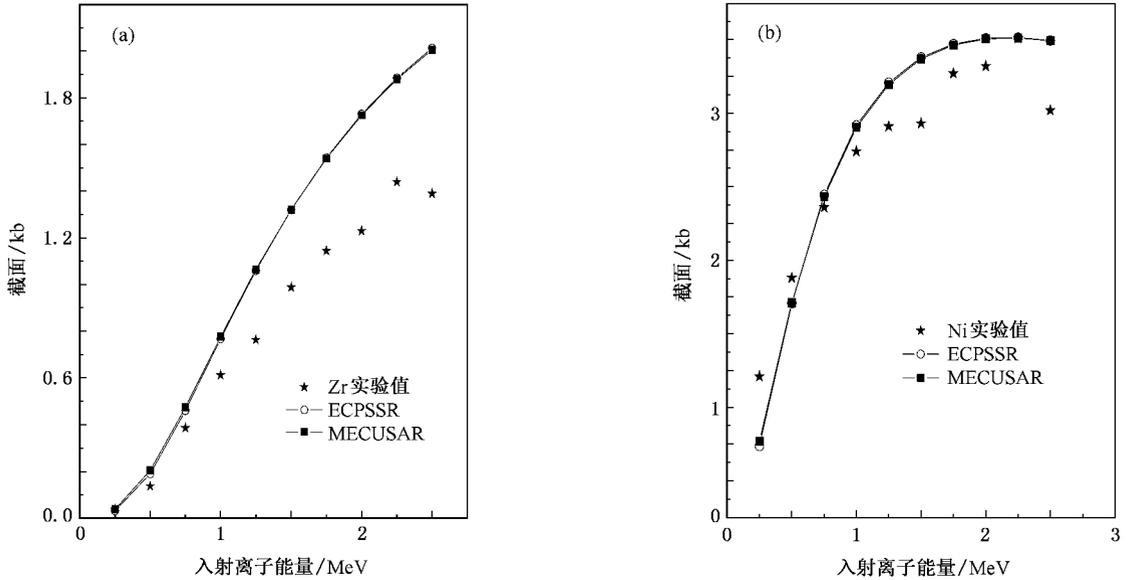


图 2 H^+ 与 Zr, Ni 原子碰撞的 L 壳层 X 射线产生截面 (a) H^+ 与 Zr 原子碰撞, Zr 实验值取自文献 [16] (b) H^+ 与 Ni 原子碰撞, Ni 实验值取自文献 [16]

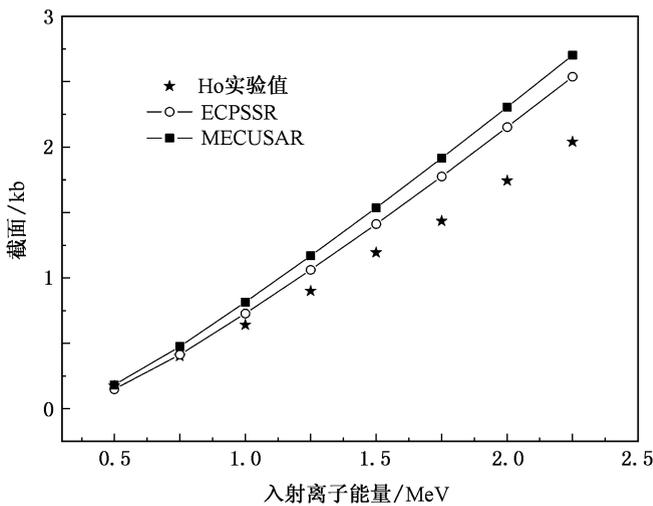


图 3 He^+ 与 Ho 原子碰撞的 M 壳层 X 射线产生截面 Ho 实验值取自文献 [17]

我们还选择了较高核电荷数的 C^{q+} 与原子碰撞体系进行计算,计算得到的结果见图 4 和图 5,对应

的核电荷数的比值分别为 $Z(C)/Z(Al)=0.46$, $Z(C)/Z(Ho)=0.089$. 从图 4 和图 5 可以看到,当入

射离子能量为 2 MeV 时, MECUSAR 计算值比 ECPSSR 计算值能更好地描述实验结果. 入射离子能量为 6 MeV 时, 图 5 中 MECUSAR 计算值与实验值相符. 而对于具有 K 壳层空穴的 C^{q+} 入射离子, MECUSAR 和 ECPSSR 计算值均明显大于实验结果, 见图 4. 入射离子为 12 MeV 时, MECUSAR 计算值与 ECPSSR 计算值基本相同, 对于具有 K 壳层空穴的 C^{q+} 入射离子, 两者的计算值均大于实验值.

以上我们对 ECPSSR 理论和 MECUSAR 理论的计算结果进行了比较. 对于低核电荷的入射离子, 满足 $Z_1/Z_2 \ll 1$, ECPSSR 理论和 MECUSAR 理论的计算结果基本相同. 对于高核电荷的入射离子(如 C^{q+}),

在低能时, MECUSAR 理论值与实验值的符合情况要好于 ECPSSR 理论值与实验值的符合情况. 在较高能量时, 两种模型的计算值基本相同. 对于满 K 壳层的入射离子, MECUSAR 理论的计算结果与实验结果较好符合, 但对于具有 K 壳层空穴的入射离子, 计算得到的截面值要明显大于实验结果, 尤其对于入射离子与靶原子核电荷数比值较大的情况. 如对于 $Z(C)/Z(Al) = 0.46$, 从图 4 可以看出, 计算值要远远高于实验值. 当 Z_1/Z_2 比值较大时, 入射离子对靶原子的作用不能再视作微扰, 正如 $Yu^{[18]}$ 指出, 当 Z_1/Z_2 值接近或大于 0.3 时, 采用微扰方法处理电子俘获过程会与实验结果产生偏差.

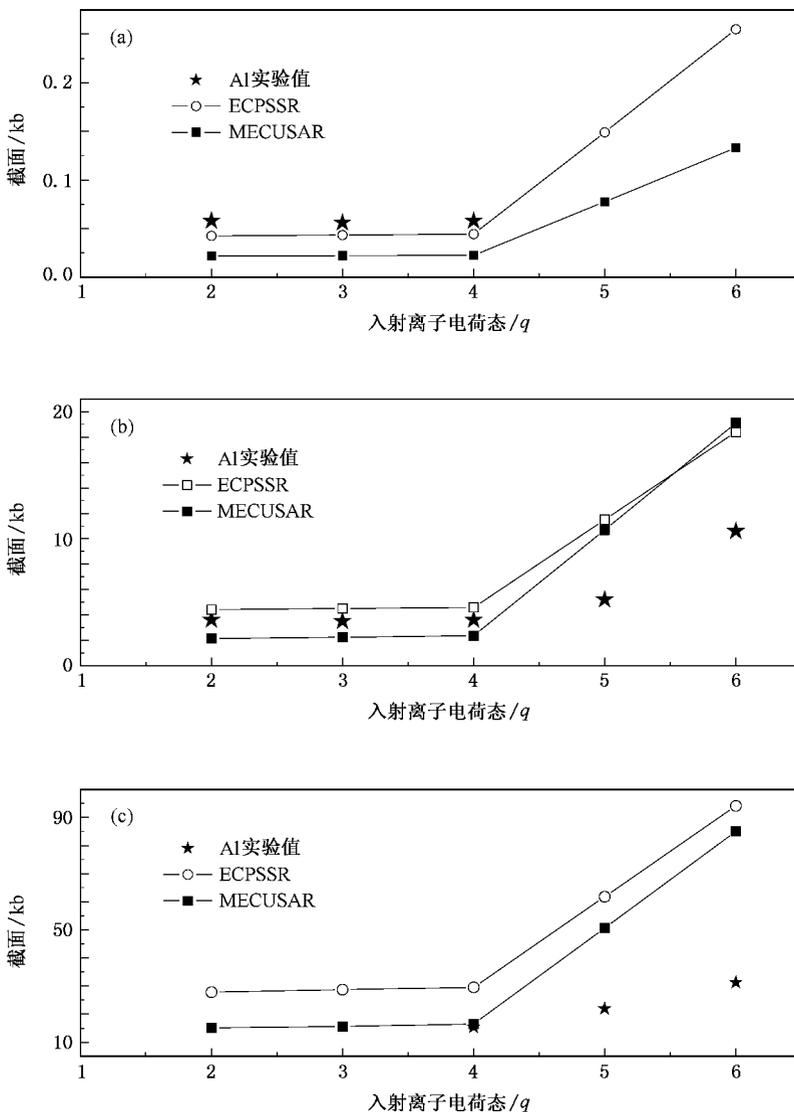


图 4 不同能量下 C^{q+} 与 Al 碰撞的 K 壳层 X 射线产生截面 [Al 实验值取自文献 [9], 入射离子 C^{q+} 的能量依次为 (a) 2 MeV (b) 6 MeV (c) 12 MeV

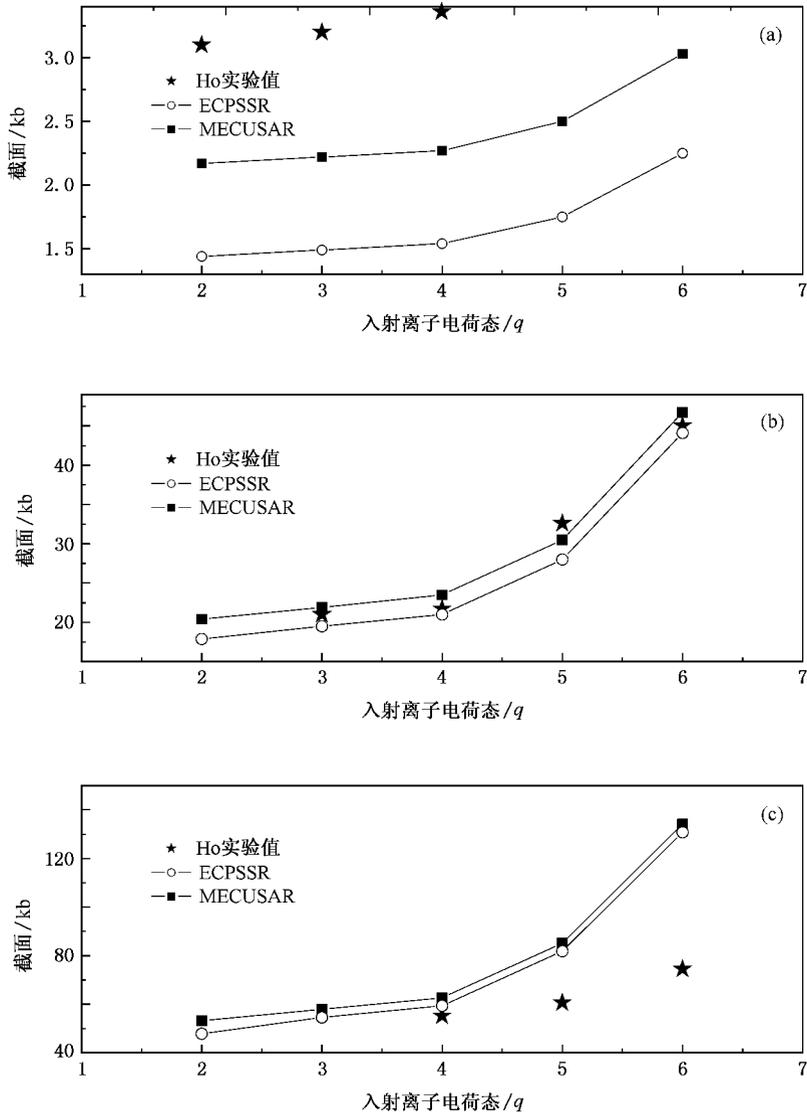


图5 不同能量下 C^{q+} 与 Ho 碰撞的 M 壳层 X 射线产生截面 Ho 实验值取自文献 [8]. 入射离子 C^{q+} 的能量依次为 (a) 2 MeV (b) 6 MeV (c) 12 MeV

4. 结 论

本工作采用 USA 模型替代 ECPSSR 中的 PSS 模型, 结合分子轨道效应而得到了 MECUSAR 理论. 应用结合能加权方法对不同电荷态入射离子的碰撞系

统进行了计算, 并做了相应的讨论. 对于低能入射离子, MECUSAR 计算结果与实验结果的符合程度要明显好于 ECPSSR 理论, 尤其对于低能高核电荷的入射离子, MECUSAR 理论结果能更好地与实验结果相符.

- [3] Yang Z H , Song Z Y , Chen X M , Zhao Y T , Zhang X A , Cui Y , Zhang H Q , Zhang Y P , Xu X , Shao J X , Yu D Y , Cai X H 2006 *Acta Phys. Sin.* **55** 2221 (in Chinese) [杨治虎、宋张勇、陈熙萌、赵永涛、张小安、崔莹、张红强、张艳萍、徐徐、邵剑雄、于得洋、蔡晓红 2006 物理学报 **55** 2221]
- [4] Rice R , Basbas G , McDaniel F D 1977 *At. Data Tables* **20** 503
- [5] Hansen J S 1973 *Phys. Rev. A* **8** 822
- [6] Hansteen J M , Mosebekk O P 1970 *Z. Phys.* **234** 281
- [7] Brandt W , Lapicki G 1981 *Phys. Rev. A* **23** 1717
- [8] Yu Y C , Sun H L 1995 *Phys. Rev. A* **52** 3836
- [9] Sun H L , Yu Y C , Lin E K , Wang C W 1996 *Phys. Rev. A* **53** 4190
- [10] Benka O , Geretschlager M , Paul H 1987 *J. Phys. C* **12** 251
- [11] Lapicki G 2002 *Nucl. Instr. Meth. B* **189** 8
- [12] Lapicki G , McDaniel F D 1980 *Phys. Rev. A* **22** 1896
- [13] Krause M 1979 *J. Phys. Chem. Ref. Data* **8** 307
- [14] Nambynek W , Crasemann B , Fink R , Freund H , Mark H , Swift C , Price R , Rao P 1972 *Rev. Mod. Phys.* **44** 716
- [15] Yu Y C , Hsu J Y , Chen K M 2005 *Nucl. Instr. Meth. B* **241** 90
- [16] Duggan J L , Kocur P M , Price J L , McDaniel F D 1985 *Phys. Rev. A* **32** 2088
- [17] Mehta R , Duggan J L , Price J L , Kocur P M , McDaniel F D , Lapicki G 1983 *Phys. Rev. A* **28** 3217
- [18] Yu Y C , Azordegan A R , Sun H L , Duggan J L , McDaniel F D , Lin E K , Wang C W , Lapicki G 1999 *Nucl. Instr. Meth. B* **150** 27

A ionization theory based on united and separated atom model^{*}

Li Ming-Sheng^{1,2)} Cai Xiao-Hong^{1)†}

1) *Institute of Modern Physics , Chinese Academy of Sciences , Lanzhou 730000 , China*)

2) *Graduate School of Chinese Academy of Sciences , Beijing 100049 , China*)

(Receive 4 November 2006 ; revised manuscript received 12 January 2007)

Abstract

The direct Coulomb ionization process can be generally well described by the ECPSSR theory , which bases on the perturbed-stationary-state (PSS) and accounts for the energy-loss , Coulomb-deflection , and relativistic effects . But the ECPSSR calculation has significant deviations for heavy projectile at low impinging energies . In this paper we propose a new modified ECPSSR theory , i. e. MECUSAR , in which PSS is replaced by an united and separated atom model , and molecule-orbit effect is considered . The MECUSAR calculations give better agreement with the experimental data at lower impinging energies , and agree with the ECPSSR calculations at high energies . By using OBKN (Oppenheimer-Brinkman-Kramers formulas of Nikolaev) theory to describe the contribution of the electron capture , we further modified the proposed MECUSAR theory , and calculated the target ionization cross sections for different charge states of the projectile .

Keywords : X-ray production cross sections , ion-atom collision , electron capture

PACC : 3450D , 3410 , 7920N

* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant Nos. 10134010 , 10375080 , 10304019) .

† Corresponding author . E-mail : caixh@impcas.ac.cn