

碰撞电离产生 Au L_3 空穴态定向行为的研究*

夏宗璜 马宏骥 傅胜春

(北京大学技术物理系, 北京 100871)

(1993年9月8日收到)

采用一种简单的实验方法测定低能区几种离子与 Au 碰撞产生 Au 的 L_3 空穴态的定向度, 及定向度的人射离子能量相关性; 同时在平面波玻恩近似理论基础上加上库仑偏转效应的校正进行了理论计算, 改善了实验点与平面波玻恩近似理论计算的符合程度, 讨论了有关空穴态定向行为。

PACC: 3490; 3280H; 3220R; 2970

1 引言

1968 年 Mehlhorn^[1] 指出: 当一束准直的电子束或带电粒子束轰击靶原子时, 被电离的靶原子将发射特征 X 射线或俄歇电子。一般来说, 被电离原子的空穴态在满足一定条件 ($n, l > 0, j > 1/2$) 下其伴随空穴衰变发射的特征辐射或俄歇电子对于入射束方向具有非各向同性角分布, 对特征辐射来说还应是极化的。这类从角相关现象出发探讨电离空穴态的行为区别于前人大量的内壳层电离总截面测定及研究, 它可提取电离过程更进一步的信息。

本文从实验与理论两个方面, 用几种离子与 Au 构成碰撞体系, 对碰撞电离过程中, 电离 Au 原子产生的 L_3 空穴态对入射束方向的取向问题作了探讨。在实验上用 α 粒子、B 离子和 O 离子等轰击 Au 靶, 通过探测 Au 的特征 LX 射线谱, 求得 L_3 空穴的定向度和定向度的人射离子能量相关性。在理论方面侧重在较低电离能区从平面波玻恩近似出发计算了定向度的人射离子能量相关曲线, 并估算了低速区库仑畸变对定向度的影响, 讨论了实验与理论的偏离。

2 基本理论

通常在处理原子内壳层空穴的产生与衰变是分两步进行的, 即靶原子电离产生空穴与空穴的衰变是相互独立的。这个两阶段理论的前提是依据了^[2]典型的碰撞相互作用时间 ($\sim 10^{-17}$ s) 远小于空穴的寿命 ($\sim 10^{-15}$ s), 因此可认为空穴的产生与衰变在时间上互不影响, 理论上分开处理。

2.1 定向度 A_2

对非极化的人射离子束诱导产生的偶极特征辐射, 其角分布可表示成如下形式^[3]:

* 中国核工业总公司资助项目。

$$I(\theta) = \frac{I_0}{4\pi} [1 + \alpha A_2 P_2(\cos\theta)], \quad (1)$$

式中 I_0 为 4π 立体角发射的特征辐射线的总强度; θ 为入射束与探测 X 射线方向的夹角; $\beta = \alpha A_2$ 称为各向异性度, α 为一常数, 取决于 X 射线跃迁始末态的角动量, A_2 为定向度。对 L_1 子壳层, A_2 作为 L_1 空穴电离截面的函数可表示为^[3]

$$A_2 = \frac{\sigma^i(3/2, 3/2) - \sigma^i(3/2, 1/2)}{\sigma^i(3/2, 3/2) + \sigma^i(3/2, 1/2)}, \quad (2)$$

式中 $\sigma^i(j, m)$ 为库仑电离产生空穴的截面, m 为磁量子数, 这里 m 为总角动量 j 在入射束方向的投影。对 L_1 子壳层, $j = 3/2$, m 可取值为 $|1/2|, |3/2|$ 。

2.2 平面波玻恩近似

设 $Z_1 \ll Z_2$; $E_1 \gg U_i$, 其中 Z_1, Z_2 分别为入射离子和靶原子的原子序数; E_1, U_i 分别对应于入射离子能量和靶原子中 i 壳层电子的结合能, 若不考虑电子自旋, (2) 式中

$$\sigma^i(3/2, 3/2) = \sigma^i(1), \quad (3)$$

$$\sigma^i(3/2, 1/2) = \frac{1}{3} \sigma^i(1) + \frac{2}{3} \sigma^i(0), \quad (4)$$

式中 $\sigma^i(j, m)$ 意义同前; $\sigma^i(m)$ 为不考虑电子自旋的电离截面。借助于类氢原子波函数^[2]计算如下:

$$\begin{aligned} \sigma^i(0) = & 8\pi Z_1^2 \frac{a_0^2}{Z_i^2} \left(\frac{e^2}{\hbar v} \right)^2 \int_{W_{\min}}^{W_{\max}} dW \cdot \int_{Q_{\min}}^{Q_{\max}} dQ / Q^2 \\ & \cdot [(1 - \cos^2\lambda) F(\mu = 1) + \cos^2\lambda F(\mu = 0)], \end{aligned} \quad (5)$$

$$\begin{aligned} \sigma^i(1) = & 8\pi Z_1^2 \frac{a_0^2}{Z_i^2} \left(\frac{e^2}{\hbar v} \right)^2 \int_{W_{\min}}^{W_{\max}} dW \cdot \int_{Q_{\min}}^{Q_{\max}} dQ / Q^2 \\ & \cdot \left[\frac{(1 + \cos^2\lambda)}{2} F(\mu = 1) + \frac{(1 - \cos^2\lambda)}{2} F(\mu = 0) \right], \end{aligned} \quad (6)$$

式中 Z_i 为靶原子的有效电荷数, 对 $2P_{3/2}$ 电子, $Z_i = Z_2 - Z_0$, $Z_0 = 4, 15$; Z_1, Z_2 意义同前; a_0 为 H 原子玻尔半径; v 为入射粒子的速度; θ_1 为屏蔽常数; W 为传输能量, 单位为 $Z_i^2 R_y$, R_y 为里德伯常数; Q 为传输动量的平方, 单位为 Z_i^2 / a_0^2 ; μ 为以传输动量为轴的磁量子数; λ 为入射粒子方向与传输动量方向间的夹角,

$$\cos^2\lambda = \frac{W^2}{4Q\eta}, \quad (7)$$

而

$$\eta = \left(\frac{\hbar v}{e^2} \right)^2 / Z_i^2 \quad (8)$$

正比于入射粒子的动能; e 为电子的电量; $\hbar$ 为普朗克常数; $F(\mu = 1), F(\mu = 0)$ 为 W , Q 和出射电子动能 k 的代数表达式^[2]。积分限分别为

$$Q_{\min} = M^2 \eta \left[1 - \left(1 - \frac{W}{\eta M} \right)^{1/2} \right]^2, \quad (9)$$

$$Q_{\max} = M^2 \eta \left[1 + \left(1 - \frac{W}{\eta M} \right)^{1/2} \right]^2, \quad (10)$$

$$W_{\min} = \theta_1/4, \quad (11)$$

$$W_{\max} = M\eta, \quad (12)$$

式中

$$M = \frac{M_1 \cdot M_2}{M_1 + M_2}, \quad \eta = \frac{2E_1}{M_1 \cdot Z_1^2}, \quad \theta_1 = \frac{8U_{L_3}}{Z_1^2}, \quad (13)$$

M 为约化质量, M_1, M_2 分别为入射粒子与靶原子的质量; E_1 为入射粒子能量; U_{L_3} 为 Au L_3 壳层结合能.

通过以上的计算可以求出 $\sigma^i(m)$, 代入(2)式, 即可得出从平面波玻恩近似计算的定向度 A_2 值.

3 实 验

Au 原子部分能级及衰变示意图如图 1 所示. 图中 $L_{\alpha_1}, L_{\alpha_2}$ 和 L 特征辐射来自同一初始空穴态 L_3 (或 $2P_{3/2}$), 因此由(1)式计算两组辐射的强度比 $R = (I_{L_{\alpha_1}} + I_{L_{\alpha_2}})/I_L$ 的简单结果如下:

$$R = \frac{(I_{L_{\alpha_1}} + I_{L_{\alpha_2}})/I_L}{\frac{\Gamma_{L_{\alpha_1}}[1 + (1/10)A_2 \cdot P_2(\cos \theta)] + \Gamma_{L_{\alpha_2}}[1 - (2/5)A_2 \cdot P_2(\cos \theta)]}{\Gamma_L[1 + (1/2)A_2 \cdot P_2(\cos \theta)]}}, \quad (14)$$

式中 Γ 为辐射宽度, 本文引用数据见表 1. 在 $\theta = 135^\circ$ 方向探测 X 射线时, 对 Au 靶 R 与 A_2 的关系如图 2 所示, 可见定向度 A_2 可通过上述两组辐射的强度比 R 值的测定得到.

实验是在北京大学 $2 \times 1.7\text{MV}$ 串列加速器上完成的. 据前人报道, 在 $V \leq 0.3$ (V 为入射离子约化速度, 即 $V = V_i/V_e, V_i, V_e$ 分别为入射离子速度和靶原子轨道电子的速度, V_e 可由轨道电子结合能的推荐值计算)的低速区, A_2 的实验结果与理论计算有很大的偏离, 因此我们侧重在 $V \sim (0.1-0.3)$ 低速区进行了实验测量. 实验布局参见文献[5]. 本实验所用 Si(Li)X 射线探测器能量半宽度 FWHM 为 200eV (对 65Zn 源 8.048keV),

表 1 α 系数^[3]及辐射宽度^[4]数据表

	L_{α_1}	L_{α_2}	L_L
α	1/10	-2/5	1/2
$\Gamma/\text{eV} \cdot \hbar^{-1}$	1.214	0.138	0.068

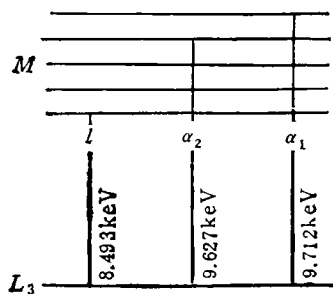


图1 重原子部分能级及衰变图

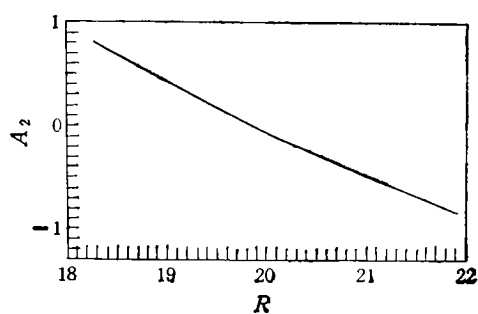


图2 Au L_1 线定向度 A_2 与比值 R 的关系 ($\theta = 135^\circ$)

Au 靶纯度为 99.99%，厚度约为 100nm，探测器置于真空靶室外，并与入射束呈 135° 角。准直束束斑 < 2mm。为了防止 AuM 线堆积，影响 L 线能谱的分析，在探测器前加入 24μm Al 箔将 M 线吸收掉。典型的实验谱图如图 3 中 a，所示测量的 LX 射线谱经扣除本底后通过解谱（包括 X 射线吸收校正）后给出 $L_{\alpha_1+\alpha_2}$ 与 L 的面积比 R 值。估计 R 值的误差不大于 5%， A_2 的实验结果见表 2。

表 2 定向度 A_2 测定值 $A_{2,exp}$ 误差估计 < 15%

离 子	E/MeV	$V^2/10^{-2}$	$A_{2,exp}$
α	1.2	1.4	-0.36
B^{3+}	3.3	1.4	-0.49
α	1.6	1.8	-0.54
B^{3+}	4.4	1.8	-0.50
O^{3+}	6.6	1.9	-0.49
α	2.0	2.3	-0.58
B^{3+}	5.5	2.3	-0.48
α	2.4	2.8	-0.52
α	2.8	3.2	-0.42
α	3.2	3.7	-0.39
α	3.6	4.1	-0.21

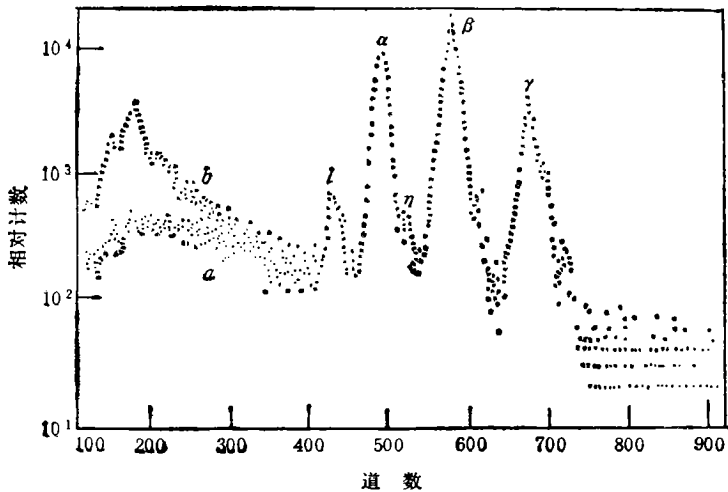


图 3 谱线 a 为 α -Au LX 射线能谱；谱线 b 为 O^{3+} -Au LX 射线能谱

4 讨 论

1. L 壳层电离情况较复杂。存在着 Coster-Kronig (C-K) 跃迁过程，即各 L 支壳层间可发生电子的跃迁，即空穴发生移动，如空穴从 $L_1 \rightarrow L_2 \rightarrow L_3$ 或 $L_2 \rightarrow L_3$ ，因此上述 C-K 跃迁的存在改变了原始空穴在 L 壳层上的分布，必然影响到定向度。考虑到 C-K 跃迁的影响，增加一个校正系数 F 于 A_2 值上，即 $A'_2 = A_2 \cdot F$

$$F = \frac{\sigma_{L_1}^{i_1}}{\sigma_{L_1}^{i_1} + f_{23}\sigma_{L_2}^{i_2} + (f_{13} + f_{12} \cdot f_{23})\sigma_{L_3}^{i_3}}, \tag{15}$$

式中 σ_1^i, σ_2^i 和 σ_3^i 分别为 L_1, L_2, L_3 子壳层的电离截面^[6], f_{ij} 为 C-K 跃迁产额^[7].

2. 库仑偏转效应-靶核库仑场的影响

实验结果表明,在所研究电离能区 Au 的 L 线呈现出明显的各向异性,而且电离空

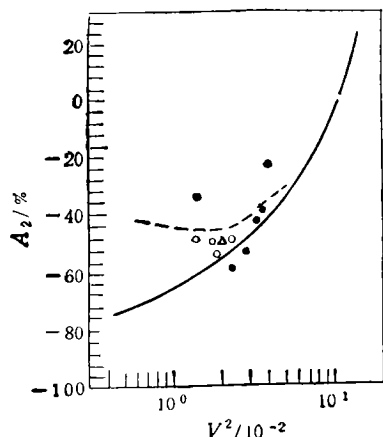


图4 实线为平面波玻恩近似计算的 A_2-V^2 关系曲线;虚线为按(16)式计算的 A_2-V^2 关系曲线;●,○,△分别为 α, B^{3+}, O^{3+} 实验测定结果

穴的定向度 A_2 为负值,从(2)式可知,这意味着 $\sigma_3^i(1/2) > \sigma_3^i(3/2)$ 。图4所示 $A-V^2$ 曲线中实验点分布在平面波玻恩近似计算曲线上方,从 $V^2 \sim 5 \times 10^{-2}$ 开始出现与计算值偏离并随速度变低加剧。这差异的出现主要原因之一是在平面波玻恩近似处理中没有考虑入射离子与靶原子核间的相互排斥作用,这种排斥作用阻止了低能入射离子靠近靶原子,因此作用效果是减小电离截面,即实验测定截面值将小于计算值。对 $\sigma_3^i(m=3/2)$, $\sigma_3^i(m=1/2)$ 电离状态可经典地看作分别对应空穴沿外环和内环分布的状态,当入射束能量高时,入射离子轨道可视为近似直线,假定入射束中离子分布是均匀的,那么穿过两环面的离子数比值可视为固定,但当在低速区,靶核库仑场的作用相

对地加强,入射离子直线轨迹不再保持,这将考虑入射离子分布呈内疏、外密,因而改变子态取向的分配份额,或者说, $|3/2\rangle$ 态被增强,因此可预言在低速区存在 A_2 值变得更正的倾向。另一方面,由于库仑偏转效应,(1)式中描述的角分布实为对一定的散射角 ω ,即对出射的散射粒子方向观察的 X 射线角分布。因此实测角分布是不同散射方向角分布的平均,而这个平均应考虑到不同 L_j 子壳层的加权平均。显然这一角度平均效果亦起着退定向的作用。

我们参用 Barros 等人加权的方法^[8],对 α 粒子入射,取 $Z_1 = 2$,按下式作了这项修正的估算:

$$A_2'' = \frac{4F}{3\sigma_3^i} [\sigma_3^i(m=1) \langle P_2[\cos(\omega/2)] \rangle_1 - \sigma_3^i(m=0) \langle P_2[\cos(\omega/2)] \rangle_0]. \quad (16)$$

权函数取下述形式:

$$W_0(x) = \frac{7}{18} \left(1 + 2X + 2X^2 + 0.8X^3 + 0.16X^4 + \frac{1}{128} \pi X^5 \right) e^{-2x}, \quad (17)$$

$$W_1(x) = \frac{7}{48} \left(1 + 1.96X + 1.52X^2 + \frac{1}{8} \pi X^3 \right) X^2 e^{-2x}, \quad (18)$$

$$\begin{aligned} \langle P_2[\cos(\omega/2)] \rangle_m &= \int_0^\infty P_2 \left[\cos \left(\frac{\omega(x)}{2} \right) \right] X W_m(x) dx \\ &= \int_0^\infty \frac{2X^2 - (dq_0)^2}{2[X^2 + (dq_0)^2]} X W_m(x) dx, \end{aligned} \quad (19)$$

$d = Z_1 \cdot Z_2 / 2E_1$, $q_0 = U_{L_1} / V_1$, $x = pq_0$, p 为经典碰撞参数, hq_0 为最小传输动量,

$$V_1 = 137.036 \left[1 - \frac{1}{(1 + E_1/931.498 M_1)^2} \right]^{1/2}. \quad (20)$$

经上述计算所得 A_2'' 与 V^2 关系如图 4 中虚线表示。从图 4 中可见, 实验点的分布与 A_2'' 随 V^2 变化趋势相同, 偏离减小, 说明空穴态的定向行为是对库仑偏转效应的灵敏检验, 同时说明靶核库仑场对入射离子轨迹影响存在的真实性。

3. 本实验采用一种简单测量定向度的方法。它给出积分定向度, 对其它可能存在的相互作用以及这些作用对定向度的影响不能灵敏地观察到。例如在 $Z_1 > 2$ 低速区的 AuLX 射线谱图上已发现有分子轨道连续辐射出现(参见图 3 中b), 同时亦不能排除有多重电离发生。在这样复杂情况下, 单纯从描述单电离, 直接库仑相互作用的平面波玻恩近似出发来处理问题是不充分的, 尚有待从实验与理论两方面进一步研究。

- [1] W. Mehlhorn, *Phys. Lett.*, **A26**(1968), 166.
- [2] S. C. Mcfarlane, *J. Phys. B*, **5**(1972), 1906
- [3] E. G. Bereshko and N. M. Kabachik, *J. Phys. B*, **10**(1977), 2467.
- [4] H. Scofield, *Phys. Rev.*, **179**(1969), 9.
- [5] Xia Zonghuang, Ma Hongji *et al.*, *Chinese Phys. Lett.*, **10** (1993), 135.
- [6] B. H. Choi and E. Merzbacher, G. S. Kuandelwal, *Atomic Data*, **5**(1973), 291.
- [7] W. Bambynek, R. Crasemann *et al.*, *Rev. of Mod. Phys.*, **44** (1972), 716.
- [8] B. Leite and N. V. de Castro faria, *Phys. Rev.*, **A25** (1982), 1880.

A STUDY ON THE BEHAVIOR OF THE ALIGNMENT FOR L_3 VACANCY STATE IN Au BY IMPACT IONISATION

XIA ZONG-HUANG MA HONG-JI FU SHENG-CHUN

(Department of Technical Physics, Peking University, Beijing 100871)

(Received 8 September 1993)

ABSTRACT

In low projectile energy region, the alignment of L_3 vacancy state in Au and the projectile energy dependence of alignment were measured for several kinds of ions and Au collision systems by a simple method. Using the plane-wave Born approximation (PWBA) and taking into account the coulomb deflection effect, the alignment was calculated. It is shown that the present calculated results are closer to the experimental data. The alignment behavior of L_3 vacancy state in Au is furtherly discussed.

PACC: 3490; 3280H; 3220R; 2970