

# 电子碰撞 Ga, As, Pt, W 和 Au 原子 $L\alpha$ X 射线 产生截面的理论计算\*

何 彪<sup>1)</sup> 易有根<sup>1)†</sup> 江少恩<sup>2)</sup> 唐永建<sup>2)</sup> 郑志坚<sup>2)</sup>

1) 中南大学物理科学与技术学院, 长沙 410083)

2) 中国工程物理研究院高温高密度等离子体物理国家重点实验室, 绵阳 621900)

(2008 年 11 月 10 日收到, 2008 年 12 月 16 日收到修改稿)

利用修改后的 MBELL 模型, 研究了  $L$  壳层的相对论效应和离子效应对快电子碰撞电离  $L\alpha$  X 射线产生截面的影响. 通过在 BELL 模型中引入相对论效应和离子效应, 基于相对论性的  $L$  壳层的电子碰撞电离截面的理论, 计算了 Ga, As, Pt, W 和 Au 的  $L$  壳层电子碰撞电离截面, 并将其转化成  $L\alpha$  X 射线产生截面, 计算结果表明考虑到相对论效应和离子效应后, 修改后的 MBELL 的  $L\alpha$  X 射线产生截面结果明显优于 BELL 的计算结果, 并和最近的文献实验数值和其他理论数值符合得较好, 其计算结果可用来模拟  $L$  壳层激光等离子体的超热电子能谱和产额, 且可为一些电子仪器的制造提供十分精确的碰撞电离参数.

关键词: 快电子,  $L\alpha$  射线, 电离截面, 相对论效应

PACC: 3130, 3480B, 3280H

## 1. 引 言

电子碰撞电离对理解物质的辐射输运碰撞过程、聚变等离子体中杂质的诊断, 多电子跃迁、电子间的相互关系及物质结构的机理等方面起着十分重要的作用. 此外, 精确的电子碰撞电离截面等原子数据在实验室和等离子体天体物理的建模和诊断方面也是必不可少的数据. 例如, 电子碰撞电离截面在辐射物理、质谱分析、半导体物理、天体物理、X 射线激光及聚变研究方面有着十分重要的用途. 在应用领域, 电子碰撞电离截面对制造精密的电子仪器也是必备的参数, 如电子探针显微分析(EPMA)、俄歇电子谱仪(AES)、电子能损谱仪(EELS)都迫切需要精确的有关电子致原子内壳层电离截面的数据.

迄今为止, 人们对  $K$  壳层电离截面的研究工作已有较多研究<sup>[1-8]</sup>, 但对于  $L$  壳层, 电离截面的数据却相当稀少, 而对  $M$  壳层几乎没有相应的报道, 主要是因为光谱诊断时测量的  $K$  壳层的光谱强度仅仅是  $K$  壳层电离截面的函数, 而  $L$  壳层和  $M$  壳层的

光谱强度极其复杂, 还同时依赖于次壳层的各种各样的电离截面, 这种依赖性主要表现  $L$  壳层和  $M$  壳层的空穴不仅可以由电子碰撞产生, 而且还可以由 Coster-Kroning 跃迁产生, 因此对它们的测量和分析变得极端困难. 1993 年 Schneider 等<sup>[9]</sup>首次测量了 Au 的  $L$  壳层的能量范围为 10—45 keV 电子碰撞电离截面, 2002 年 Campos 等<sup>[10]</sup>报道了 W, Pt 和 Au 的能量范围为 10—30 keV 的电子碰撞电离截面, 采用 Gryzinski 模型<sup>[11]</sup>作了近似计算, 2004 年 Peng 等<sup>[12]</sup>测量了 W 的  $L$  壳层的低能电子碰撞电离截面, Wu 等<sup>[13]</sup>测量了 Au 的  $L$  壳层的低能电子碰撞电离截面, 2006 年 Merlet 等<sup>[14]</sup>测量了 Ga 和 As 的  $L$  壳层的能量范围为 1.5—39 keV 低能电子碰撞电离截面, 并用 Gryzinski 模型、扭曲波近似<sup>[15]</sup>和平面波近似<sup>[16]</sup>作了理论上的分析, 但各种模型及计算方法得出的结果差异也较大. 因此, 对  $L$  壳层电离截面进行精确的细致研究也就显得很有必要.

电子碰撞电离截面数据主要来自理论和实验两方面, 基于量子机理详细计算电子碰撞电离截面在理论上是可行的, 但在实际中, 它包含多体相互作用

\* 国家自然科学基金(批准号: 10275056)和国防科技重点实验室基金(批准号: 51480010104ZS7702)资助的课题.

† 通讯联系人. E-mail: yougenyi@hotmail.com

机理从而导致许多近似.在实际计算中,我们都希望用有足够精度的分析或半经验的模型而不是全量子力学的模型来简化计算结果. MBELL 模型是近年来发展的一种很好的处理  $K$  壳层的电子碰撞电离的经验模型<sup>[17]</sup>,在计算从氢原子到铀原子的  $K$  壳层的电子碰撞电离截面获得了很大的成功,它成功地解决扭曲波近似和平面波近似在电离阈值附近过高地估计了电子碰撞电离截面的难题.本文利用 BELL 模型<sup>[18]</sup>,通过在 BELL 模型中,引入离子效应和相对论效应,将  $K$  壳层的电子碰撞电离截面推广到  $L$  壳层.基于相对论性  $L$  壳层的电子碰撞的电离截面理论,计算了 Ga, As, Pt, W 和 Au 的  $L$  壳层电子碰撞电离截面,并将其转化成  $L\alpha$  X 射线产生截面,并研究了  $L$  壳层相对论效应和离子效应对快电子碰撞电离产生截面的影响.计算结果表明  $L$  壳层考虑到相对论效应和离子效应后,修改后的 MBELL 模型计算的  $L$  壳层电子碰撞电离截面结果明显优于 BELL 的计算结果,修改后的 MBELL 公式与 Gryzinski 近似、扭曲波近似和平面波近似相比有很好的计算精度.

## 2. 基本理论和方法

在 BELL 模型中,我们将  $K$  壳层的电子碰撞电离截面推广到  $L$  壳层的电子碰撞电离截面情形, $L$  壳层的电子碰撞电离截面  $\sigma_{\text{BELL}}$  可由下式给出

$$\sigma_{\text{BELL}}(E) = \frac{1}{I_{n1}E} \left[ A \ln\left(\frac{E}{I_{n1}}\right) + \sum_{k=1}^5 B_k \left(1 - \frac{I_{n1}}{E}\right)^k \right], \quad (1)$$

这里  $E$  是入射电子的能量, $I_{n1}$  是  $n1$  轨道的电离能, $A$  和  $B_k$  是相应 BELL 参数.

在修改后的  $L$  壳层的电子碰撞电离截面 MBELL 模型中,考虑到相对论效应和离子效应后,总的  $L$  壳层的电子碰撞电离截面  $\sigma_{\text{MBELL}}$  的表达式为

$$\sigma_{\text{MBELL}}(E) = \sum_{n1} N_{n1} F_{\text{ion}} G_{\text{R}} \sigma_{\text{BELL}}(E), \quad (2)$$

这里  $N_{n1}$  是  $n1$  电离轨道上的总电子数; $G_{\text{R}}$  是 Gryzinski 相对论效应因子; $G_{\text{R}}$  的表达式由下式给出

$$G_{\text{R}} = \left(\frac{1+2J}{U+2J}\right) \left(\frac{U+J}{1+J}\right)^2 \times \left(\frac{(1+U)(U+2J)(1+J)^2}{J^2(1+2J)+U(U+2J)(1+J)^2}\right)^{1.5}, \quad (3)$$

其中  $U = E/I_{n1}$ ,  $J = m_e c^2/I_{n1}$ ,  $m_e$  是电子的静止质

量; $F_{\text{ion}}$  是包含电离参数  $\lambda$  和  $m$  的修正因子,它有如下形式

$$F_{\text{ion}} = 1 + m \left(\frac{q}{UZ}\right)^\lambda, \quad (4)$$

其中  $q = Z - N_U$ ,  $N_U$  表示从  $1s$  轨道到相应的  $n1$  轨道的总电子数, $q$  是原子靶的有效电荷.

## 3. 计算结果与讨论

考虑到  $L$  壳层的电子碰撞电离截面的相对论效应和离子效应后,我们用修改后的  $L$  壳层电子碰撞电离截面的 MBELL 公式计算了 Ga, As, Pt, W, Au 的  $L$  壳层电子碰撞电离截面,为了方便与实验数据的比较,我们将  $L$  壳层的电子碰撞电离截面转化成  $L\alpha$  的 X 射线产生截面,具体转化公式由下式决定

$$\sigma_{L\alpha} = \frac{\Gamma_{M_{4,5-L_3}}}{\Gamma_{\text{Total}-L_3}} \omega_{L_3} \times [\sigma_{L_3} + f_{23}\sigma_{L_2} + (f_{13} + f_{12}f_{23})\sigma_{L_1}], \quad (5)$$

这里和  $\Gamma_{M_{4,5-L_3}}$  和  $\Gamma_{\text{Total}-L_3}$  是 X 射线  $L\alpha$  的发射率 ( $M_{4,5-L_3}$ ) 和总的发射率 ( $M, N, O-L_3$ ).  $L_1, L_2$  和  $L_3$  分别为  $L$  壳层的次壳层, $\omega_{L_3}$  是  $L_3$  壳层的荧光产量, $f_{ij}$  是 Coster-Kronig 跃迁概率.

表 1 列举出了计算过程中我们所需的 Ga, As, Pt, W 和 Au 几种元素的 X 射线发射率,荧光产量, Coster-Kronig 跃迁几率.表 2 列举出了 BELL 参数  $A$  和  $B$ , 以及  $1s, 2s, 2p$  轨道的电离参数,参数的单位是  $10^{-13} \text{ eV}^2 \cdot \text{cm}^2$ .

表 1 X 射线发射率、荧光产量和 Coster-Kronig 跃迁概率

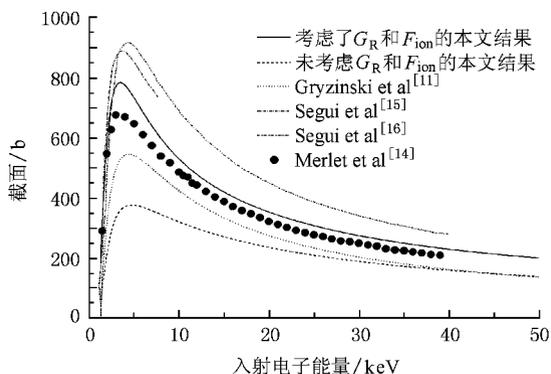
元素	$\Gamma_{M_{4,5-L_3}}/\Gamma_{\text{Total}-L_3}$	$\omega_{L_3}$	$f_{12}$	$f_{13}$	$f_{23}$
Ga	0.957	0.013	0.290	0.530	0.032
As	0.953	0.016	0.280	0.530	0.063
W	0.800	0.245	0.102	0.325	0.106
Pt	0.790	0.294	0.066	0.562	0.104
Au	0.780	0.307	0.047	0.582	0.101

采用修改后的  $L$  壳层电子碰撞电离截面 MBELL 模型,在上述所选参数的基础上,我们计算了 Ga, As, Pt, W, Au 等  $L$  壳层电子碰撞电离截面,计算结果如图 1—5 所示,其中实心圆圈、实方形和实三角形均表示实验数据, Ga 和 As 的实验数据

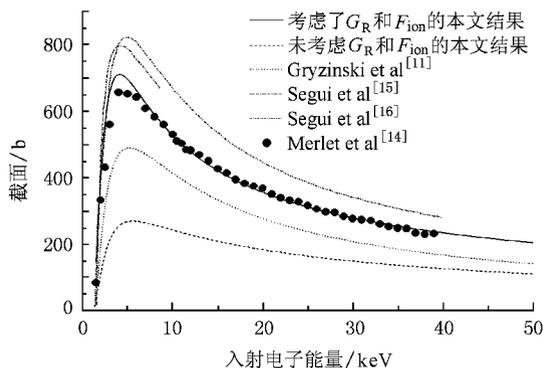
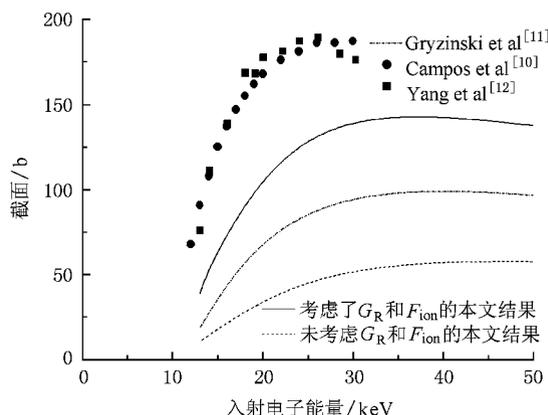
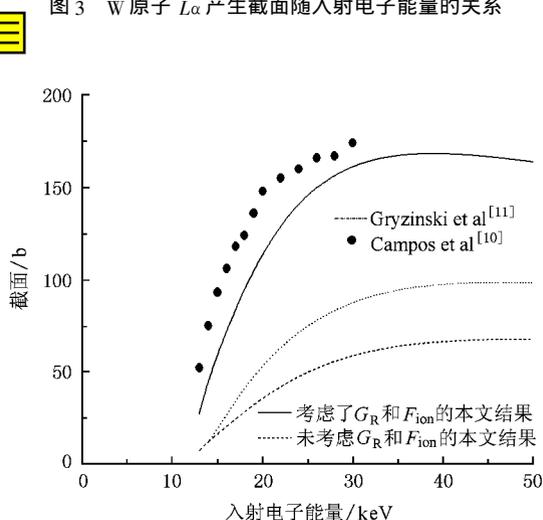
表 2 BELL 参数  $A$  和  $B$ , 以及  $1s, 2s, 2p$  轨道的电离参数

轨道	参数/ $10^{-13} \text{ eV}^2 \cdot \text{cm}^2$					$m$	$\lambda$	
	$A$	$B_1$	$B_2$	$B_3$	$B_4$			$B_5$
1s	+0.525	-0.510	+0.200	+0.050	-0.025	-0.100	+3.000	+1.270
2s	+0.530	-0.410	+0.150	+0.150	-0.200	-0.150	+3.000	+1.270
2p	+0.600	-0.400	-0.710	+0.655	+0.425	-0.750	+3.000	+0.542

来自文献 [14]; Pt 和 W 的实验数据来自文献 [10, 12], Au 的实验数据来自文献 [9, 10, 13]. 从图 1-2 可以看出, 对中  $Z$  元素, MBELL 计算的 Ga 和 As 的亚壳层的  $L\alpha$  X 射线电离截面与实验结果相比, 除峰值处误差稍大外(约 10%—15%), 其他地方符合得很好(约 5%), 计算结果比 Gryzinski 等<sup>[11]</sup>、Segui 等扭曲波和平面波<sup>[15, 16]</sup>的计算结果更靠近实验值, Gryzinski 方法所得的结果与实验数据相比偏低, 峰值误差在 20%—25% 之间, 而扭曲波和平面波的计算结果与实验数据相比偏高, 峰值误差在 25%—30% 之间. 用 Bell 模型的计算峰值结果与实验数据的误差在 40%—45% 之间, 这主要是由于 Bell 模型没有考虑离子效应和相对论效应, 而 Gryzinski 等、扭曲波和平面波三种模型都考虑到了相对论效应. 从图 3—5 可以看出, 对高  $Z$  元素, MBELL 计算的 Pt 和 W, Au 的  $L\alpha$  X 射线电离截面与实验数据的差别稍大, 但最大峰值处误差也不超过 30%, 这都在误差允许的范围内, 而用 Gryzinski 方法所得的结果明显要低于实验数据, 由于 Bell 模型中未考虑离子效应和相对论效应, 计算的峰值结果与实验数据的误差在 60%—70% 之间, 而高  $Z$  元素 Pt 和 W, Au 的扭曲波和平面波的计算结果尚未见相关文献报道.

图 1 Ga 原子  $L\alpha$  产生截面随入射电子能量的关系

由上述讨论可知, 用修改后的  $L$  壳层电子碰撞电离截面 MBELL 模型比 BELL 的模型、Gryzinski 模型以及扭曲波和平面波近似的计算精度要高很多,

图 2 As 原子  $L\alpha$  产生截面随入射电子能量的关系图 3 W 原子  $L\alpha$  产生截面随入射电子能量的关系图 4 Pt 原子  $L\alpha$  产生截面随入射电子能量的关系

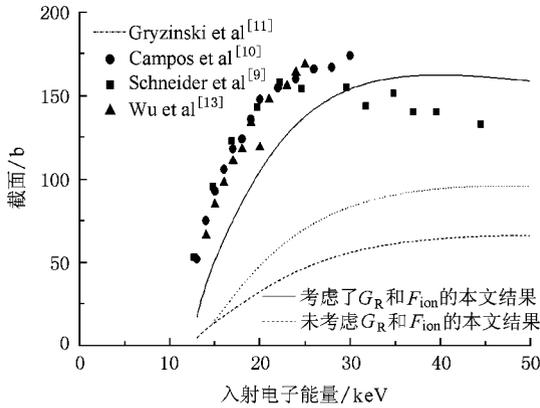


图5 Au原子  $L\alpha$  产生截面随入射电子能量的关系

这是因为 MBELL 模型中考虑了相对论效应,由  $G_R$  相对论因子表示,同时还用包含电离参数  $\lambda$  和  $m$  的修正因子  $F_{ion}$  对电离截面进行了修正,因此,它成功地解决了 Gryzinski 模型、扭曲波近似和平面波近似在电离阈值附近过高地估计了电子碰撞电离截面的难题.

## 4. 结 论

本文通过在 BELL 模型中引入相对论效应和离子效应,将  $K$  壳层的电子碰撞电离截面推广到  $L$  壳层,基于相对论性的  $L$  壳层的电子碰撞的电离截面理论,计算了 Ga, As, Pt, W 和 Au 的  $L$  壳层电子碰撞电离截面,并将其转化成  $L\alpha$  X 射线产生截面,计算结果表明考虑到相对论效应和离子效应后,修改后的 MBELL 的结果明显优于 BELL 的计算结果,比 Gryzinski 的计算结果和扭曲波和平面波的计算结果要好,它成功地解决了扭曲波近似和平面波近似在电离阈值附近过高地估计了电子碰撞电离截面的难题,并和最近的文献实验数值符合得较好,理论和实验参考数据误差大多小于 10%—30%. 计算结果也表明用修改后的 MBELL 模型来计算  $L$  壳层的电子碰撞电离截面是切实可行的. 同时其计算结果可用于模拟  $L$  壳层激光等离子体的超热电子能谱和产额,理论的计算结果也将为一些电子仪器的制造提供十分准确的碰撞电离参数.

- [ 1 ] Hombourger C 1998 *J. Phys.* B **31** 3693
- [ 2 ] Liu M T, An Z, Tang C H, Luo Z M, Peng X F, Long X G 2000 *At. Data Nucl. Data Tables* **76** 213
- [ 3 ] Ye Z P, Dai C J, He H L 2002 *Acta Phys. Sin.* **51** 935 (in Chinese) [ 叶子飘、戴长江、何会林 2002 物理学报 **51** 935 ]
- [ 4 ] Luo Z M, Tang C H, An Z, He F Q, Peng X F, Long X G 2001 *Phys. Rev. A* **63** 034702
- [ 5 ] Zhou G G, An Z, Luo Z M 2002 *J. Phys.* B **35** 841
- [ 6 ] Tang C H, An Z, Luo Z M, Liu M T 2002 *J. Appl. Phys.* **91** 6739
- [ 7 ] Merlet C, Llovet X, Salvat F 2004 *Phys. Rev. A* **69** 032708
- [ 8 ] Xiong Y, Yi Y G, Zheng Z J 2008 *High Power Laser and Particle Beams* **20** 159 (in Chinese) [ 熊 勇、易有根、郑志坚 2008 强激光与粒子束 **20** 159 ]
- [ 9 ] Schneider H, Tobehn I, Ebel I, Hippler R 1993 *Phys. Rev. Lett.* **71** 2707
- [ 10 ] Campos C S, Vasconcellos M A Z, Llovet X, Salvat F 2002 *Phys. Rev. A* **66** 012719
- [ 11 ] Gryzinski M 1965 *Phys. Rev.* **138** 336
- [ 12 ] Yang D L, Luo X B, Fu Y C, He Q F, Long X G, Peng X F, Luo Z M 2004 *Chin. Phys.* **13** 670
- [ 13 ] Wu Y, An Z, Liu M T, Tang C H, Luo Z M 2004 *J. Phys.* B **37** 4527
- [ 14 ] Merlet C, Llovet X, Fernandez-Varea J M 2006 *Phys. Rev. A* **73** 062719
- [ 15 ] Segui S, Dingfelder M, Salvat F 2003 *Phys. Rev. A* **67** 062710
- [ 16 ] Segui S, Dingfelder M, Fernández J M, Salvat F 2002 *J. Phys.* B **35** 33
- [ 17 ] Haque A K F, Uddin M A, Basak A K, Karim K R, Saha B C 2006 *Phys. Rev. A* **73** 012708
- [ 18 ] Bell K L, Gilbody H B, Hughes J G, Kingston A E, Smith F J 1983 *J. Phys. Chem. Ref. Data* **12** 891

# Theoretical calculation of $L\alpha$ x-ray production cross sections of Ga , As , Pt , W , and Au atoms by electron impact \*

He Biao<sup>1)</sup> Yi You-Gen<sup>1)†</sup> Jiang Shao-En<sup>2)</sup> Tang Yong-Jian<sup>2)</sup> Zheng Zhi-Jian<sup>2)</sup>

1) ( School of Physical Science and Technology , Central South University , Changsha 410083 , China )

2) ( State Key Laboratory of High Temperature and Density Plasma Physics , China Academy of Engineering Physics , Mianyang 621900 , China )

( Received 10 November 2008 ; revised manuscript received 16 December 2008 )

## Abstract

The  $L\alpha$  x-ray production cross sections of Ga , As , Pt , W and Au by electron impact are calculated using a modified version of the BELL formula by incorporating both ionic and relativistic corrections in it. The proposed modified Bell model with a single set of parameters can provide an excellent data in the reduced energy range  $1 \leq E/I_{nl} \leq 10^6$  (  $E$  and  $I_{nl}$  are , respectively , the incident energy and ionization energy ) with performance level at least as good as any of the existing methods and models. Experimental data are compared with the present results in cases of with and without the relativistic correction factor  $G_R$  and the ionic correction factor  $F_{ion}$  , with calculated cross sections obtained from the distorted wave Born approximation and with other experimental data available in the literature. The calculated results can be used to simulate the hot-electron energy spectrum and laser plasma yields and accordingly can provide accurate parameters for electron devices.

**Keywords** : hot electron ,  $L\alpha$  x-ray , ionization cross section , relativistic effect

**PACC** : 3130 , 3480B , 3280H

\* Project supported by the National Natural Science Foundation of China ( Grant No. 10275056 ) and the Foundation of Key Laboratory of National Defence Science and Technology , China ( Grant No. 51480010104ZS7702 ).

† Corresponding author. E-mail : yougenyi@hotmail.com